

狭义相对论下电子自旋轨道耦合对 X 射线光谱的影响*

余志强 谢 泉[†] 肖清泉

(贵州大学理学院, 新型光电子材料与技术研究所, 贵阳 550025)

(2009 年 4 月 26 日收到; 2009 年 4 月 29 日收到修改稿)

基于狭义相对论的基本观点, 研究了特征 X 射线的产生机理, 分析了电子自旋轨道耦合对特征 X 射线波长的影响, 导出了一个计算特征 X 射线波长的公式, 同时对计算推导的波长值做了系统的误差分析, 得到了相对误差的规律. 结果表明, 计算推导的波长值与实验的波长值非常接近, 在实际应用中对分析特征 X 射线光谱具有一定的参考意义.

关键词: 狭义相对论, 特征 X 射线, 自旋轨道耦合, 误差分析

PACC: 3220R

1. 引 言

X 射线是 1895 年被伦琴发现的, 是一种波长很短的电磁波, 波长范围为 0.001—10 nm, 具有非常强的穿透力. 1912 年德国物理学家劳厄发现 X 射线通过晶体时产生衍射现象, 证明了 X 射线的波动性. X 射线光谱已被广泛地应用于晶体的结构分析和材料的元素分析等领域, 对于促进科学技术的发展产生了巨大而深远的影响.

在分析特征 X 射线光谱时, 通常取的电子质量都是原子核外电子的静质量, 一般都没有考虑在狭义相对论下电子自旋轨道耦合对特征 X 射线光谱的影响.

本文基于爱因斯坦狭义相对论^[1]的基本理论原理, 在经典量子理论的基础上, 研究了特征 X 射线^[2]的辐射机理, 分析了在狭义相对论下电子自旋轨道耦合对特征 X 射线波长的影响, 得到了一个计算特征 X 射线波长的公式, 并且对常见元素的特征波长做了理论的推导计算, 通过计算所得到的波长值与实验的波长值非常接近, 在实际应用中对分析特征 X 射线光谱具有一定的参考意义.

2. X 射线光谱分析的基本原理

X 射线光谱通常由连续谱和特征谱组成. 对于 X 射线光谱, 其连续谱是由高能电子与构成阳极靶的原子碰撞时, 电子失去动能所辐射出的光子产生的. 由于每个电子可能产生多次碰撞, 而每次碰撞电子所损失的能量又可能不同, 因此辐射出的不同频率的光子形成了连续 X 射线谱.

而在 X 射线光谱中, 其特征 X 射线表征的是各元素的本征特性, 特征 X 射线与阳极靶的组成元素紧密相关, 它和可见光谱一样, 是由原子内部电子做能级跃迁辐射^[3]光子的结果. 但是由于 X 射线光子能量比可见光光子的能量大得多, 所以不可能是原子中外层电子的能级跃迁的结果, 但可以用内壳层电子的能级跃迁来加以解释. 然而在正常情况下, 由于原子的内壳层都已填满了电子, 根据泡利不相容原理^[4]可知, 电子不可能再跃入. 在这里高能加速电子的碰撞起了关键的作用, 高能加速电子的碰撞可以将内壳层的电子击出原子, 而在原来位置留下一个空穴. 根据能量最低原理, 处在较高能级的不稳定电子会跃入低能级空穴而形成稳定状

* 国家自然科学基金(批准号:60566001, 60766002)、科技部国际合作专项基金(批准号:2008DFA52210)、贵州省信息产业厅基金(批准号:0831)和贵阳市科学技术计划(批准号:[2008]15-3)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: qxie@gzu.edu.cn

态,而在电子的跃迁过程中就会辐射出具有一定频率的高能量的 X 射线. 由于离原子核越远之处电子所产生的跃迁概率越小,所以高次辐射的强度也就越来越弱,因此在特征 X 射线光谱分析中,通常主要采用的是 K_{α} 辐射,它近似一束单色的特征 X 射线.

考虑到电子自旋轨道耦合^[5]对电子运动状态的影响,电子的自旋轨道耦合使原来简并的能级分裂开来,当 n 和 $l(l > 0)$ 都确定后, j 可以取两个值 $j = l \pm \frac{1}{2}$, 即具有相同的量子数 n 和 l 的能级有两个,它们之间的差别很小. 通常把电子由 L 层的 $2p_{1/2}$ 态和 $2p_{3/2}$ 态跃迁填充 K 层 $1s_{1/2}$ 态空穴时所形成的特征 X 射线称为 K_{α} 辐射,同理还有 K_{β} 辐射、 K_{γ} 辐射.

如果将电子由 L 层的 $2p_{1/2}$ 态和 $2p_{3/2}$ 态跃迁填充 K 层 $1s_{1/2}$ 态空穴所产生的特征波长分别表示为 $\lambda_{1/2}$ 和 $\lambda_{3/2}$, 由于 $\lambda_{1/2}$ 和 $\lambda_{3/2}$ 的值很接近,并且在特征 K_{α} 辐射中 $\lambda_{3/2}$ 出现的概率是 $\lambda_{1/2}$ 的两倍,于是特征 X 射线的 K_{α} 辐射波长公式可表示为如下形式:

$$\lambda_{\alpha} = (2\lambda_{3/2} + \lambda_{1/2})/3. \quad (1)$$

根据爱因斯坦光子能量公式^[6] $E = 2\pi\hbar f$, 只要能够知道特征 X 射线的波长就可以间接地确定靶的组成元素,实现对靶的测定和分析. 以及通过已知的 X 射线的 K_{α} 辐射波长 λ 和晶体掠射角 θ , 就可以对晶体的晶面间距 d 进行测定,从而分析晶体的周期特性^[7].

3. 狭义相对论下的电子自旋轨道耦合

狭义相对论涉及的是无加速运动的惯性系,它是根据爱因斯坦的相对性原理的假设和光速不变原理的假设而创立起来的一套完整的理论.

根据狭义相对论的基本观点,在洛伦兹变换^[8]的基础上,可以得到在相对论中运动电子的质量与速率的关系

$$\mu = \frac{\mu_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (2)$$

其中 μ 为电子的相对论质量, μ_0 为电子的静质量, v 为电子的速率, c 为光速.

由于核外电子的速率主要由轨道速率所决定,于是核外电子的相对论质量 μ_n 可以由 Bohr-

Sommerfeld 量子化条件和库仑电势表示为如下的形式:

$$\mu_n = \frac{\mu_0}{\sqrt{1 - \frac{v_n^2}{c^2}}} \approx \mu_0 \left[1 + \frac{(z - \sigma_{n,l,j})^2 e_s^4}{2\hbar^2 c^2} \frac{1}{n^2} \right], \quad (3)$$

式中, $\sigma_{n,l,j}$ 为屏蔽常数(n 为主量子数, l 为轨道量子数, j 为总动量量子数), z 为原子序数, e_s 为 SI 制电子电量. 从(3)式可以知道,电子的相对论质量 μ_n 是与主量子数 n 相关的函数.

在相对论电子自旋轨道耦合中,电子自旋对原子能级和谱线都有影响,电子的总角动量由其自旋角动量和轨道角动量共同耦合形成,电子自旋角动量和轨道角动量之间相互作用的能量与电子的动能以及电子在核的力场中的势能相比很小,它可以被看做是微扰能量.

4. 狭义相对论下电子自旋轨道耦合对 X 射线光谱的影响分析

特征 X 射线表征的是各元素的本征特性,它是各原子的内层电子跃迁辐射的结果. 通过原子内部较外层的电子跃迁填充就会辐射出能量光子,本文基于爱因斯坦狭义相对论的基本原理,在经典量子理论的基础上,研究特征 X 射线的辐射机理,分析在狭义相对论中电子自旋轨道耦合微扰对特征 X 射线的 K_{α} 辐射波长的影响.

考虑狭义相对论下电子自旋微扰的影响(即考虑电子自旋轨道耦合的影响),在电子库仑屏蔽的作用下,对原子序数为 z 的原子,其 K 层电子填满时具有两个电子,考虑同层电子间的库仑屏蔽作用,其屏蔽常数^[9] $\sigma_{1,0,1/2}$ 约为 1,对其中一个电子,另一个电子近似受到核电荷数为 $z - 1$ 的库仑场作用. 当 K 层出现空穴, L 层电子向 K 层跃迁填充时, L 层内 $2p_{1/2}$ 态的电子受到 K 层电子的库仑屏蔽作用,其屏蔽常数 $\sigma_{2,1,1/2}$ 约为 1,其 L 层内 $2p_{3/2}$ 态屏蔽常数 $\sigma_{2,1,3/2}$ 约为 1,于是 L 层 $2p$ 态的电子近似受到核电荷数为 $z - 1$ 的库仑场作用.

当不考虑电子自旋角动量和轨道角动量相互作用的耦合能量时,核外电子体系的哈密顿算符可

表示为

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_0} \nabla^2 + U(r). \quad (4)$$

考虑核外电子的屏蔽, 则电子库仑电势为

$$U(r) = -\frac{(z - \sigma_{n,l,j})e_s^2}{r}, \quad (5)$$

其中 r 为电子到核的距离.

\hat{H}_0 是体系未受微扰时的力学量算符, 它所对应的能量为 E_n^0 , 由于 \hat{H}_0 属于 E_n^0 的本征函数, 因此可采用无自旋轨道耦合情况的 Bohr-Sommerfeld 量子化条件求解 E_n^0 的值.

Bohr-Sommerfeld 量子化条件为

$$\oint p dq = 2\pi n \hbar, \quad (6)$$

其中, p 为广义动量, q 为广义坐标.

将(5)式代入(6)式, 可得

$$E_n^0 = -\frac{\mu_0(z - \sigma_{n,l,j})^2 e_s^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (7)$$

因为 $\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ 以及 \hat{S}_z 都是相互对易, 它们有共同的无耦合表象基矢. 电子的能级 E_n^0 (\hat{H}_0 的本征值) 只与 n 有关, 不计及电子的自旋, 这个能级是 n^2 度简并的.

考虑电子自旋角动量和轨道角动量相互作用的耦合能量. 根据经典量子理论, 原子核外电子是分层排布的, 电子的总角动量由其自旋角动量和轨道角动量共同耦合形成, 电子的总角动量^[10] 算符可表示为

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}, \quad (8)$$

其中 \hat{J} 为电子总角动量算符, \hat{S} 为电子自旋角动量算符, \hat{L} 为电子轨道角动量算符.

因为 $\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{J}^2$ 和 \hat{J}_z 都是相互对易的 (其中 $\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$ 是常数, 它与任何算符都是对易的), 它们有共同的耦合表象基矢. 电子自旋角动量和轨道角动量之间相互作用耦合的能量可表示为

$$\frac{1}{2\mu_n^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} \hat{L} \cdot \hat{S}. \quad (9)$$

于是, 在考虑电子自旋角动量和轨道角动量相互作用时, 核外电子体系的含 \hat{H}' 微扰项的哈密顿算符可表示为

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_n} \nabla^2 + U(r) + \xi(r) \hat{L} \cdot \hat{S} \\ &= \hat{H}_0 + \hat{H}', \end{aligned} \quad (10)$$

其中,

$$\xi(r) = \frac{1}{2\mu_n^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr}, \quad (11)$$

$$\hat{H}' = \xi(r) \hat{L} \cdot \hat{S}, \quad (12)$$

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2} [\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \frac{3}{4}\hbar^2]. \quad (13)$$

\hat{H} 的本征值和本征函数 ψ 之间的关系为

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}') \psi = E \psi. \quad (14)$$

由于 \hat{H}_0 的本征值是简并的, 因此可用简并情况下的微扰理论求解(14)式.

对于 \hat{H} 的本征函数 ψ , 可表示为

$$\psi = \sum_{ljm} c_{ljm} \psi_{nljm}, \quad (15)$$

其中 m 为磁量子数.

根据简并条件下的微扰理论

$$\sum_{ljm} [(\hat{H}')_{l'j'm',ljm} - E_n^{(1)} \delta_{l'l} \delta_{j'j} \delta_{m'm}] c_{ljm} = 0, \quad (16)$$

其中

$$\begin{aligned} (\hat{H}')_{l'j'm',ljm} &= \langle n, l', j', m' | \hat{H}' | n, l, j, m \rangle \\ &= \int_0^\infty R_{nl}^2(r) \xi(r) r^2 dr \\ &\quad \times \langle l', j', m' | \hat{L} \cdot \hat{S} | l, j, m \rangle. \end{aligned} \quad (17)$$

由于 $\hat{J}^2 = (\hat{L} + \hat{S})^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}$, $\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$, 于是

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2} [\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \frac{3}{4}\hbar^2]. \quad (18)$$

将(18)式代入(17)式, 有

$$\begin{aligned} &\langle l', j', m' | \hat{H}' | l, j, m \rangle \\ &= \langle l', j', m' | \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \frac{3}{4}\hbar^2) | l, j, m \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \delta_{l'l} \delta_{j'j} \delta_{m'm}. \end{aligned} \quad (19)$$

如果令

$$\begin{aligned} H'_{nlj} &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \\ &\quad \times \int_0^\infty R_{nl}^2(r) \xi(r) r^2 dr, \end{aligned} \quad (20)$$

将(5)式代入(20)式可得

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty R_{nl}^2(r) \xi(r) r^2 dr \\ &= \frac{(z - \sigma_{n,l,j}) e_s^2}{2\mu_n^2 c^2} \int_0^\infty \frac{R_{nl}^2}{r} dr \\ &= \frac{\mu_n e_s^8}{2\hbar^6 c^2} \frac{(z - \sigma_{n,l,j})^4}{n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)}. \end{aligned} \quad (21)$$

于是

$$(H')_{l'j'm',ljm} = H'_{nlj}\delta_{l'l}\delta_{j'j}\delta_{m'm}. \quad (22)$$

将(22)式代入(16)式,可得

$$[H'_{nlj} - E_n^{(1)}]c_{ljm} = 0, \quad (23)$$

在微扰条件下的一级修正能量可表示为

$$E_n^{(1)} = E_{nlj}^{(1)} = \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \times \int_0^\infty R_{nl}^2(r)\xi(r)r^2dr. \quad (24)$$

将(21)式代入(24)式,有

$$E_n^{(1)} = E_{nlj}^{(1)} = \frac{1}{4} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \times \frac{\mu_n e_s^8}{\hbar^4 c^2} \frac{(z - \sigma_{n,l,j})^4}{n^3 l \left(l + \frac{1}{2} \right) (l+1)}. \quad (25)$$

由此可见,自旋轨道耦合使原来简并的能级分裂开来,当 n 和 $l(l > 0)$ 都确定后, j 可以取两个值 $j = l \pm \frac{1}{2}$, 即具有相同的量子数 n 和 l 的能级有两个;而当 $n = 1$ 和 $l = 0$ 时, j 只有一个值 $j = \frac{1}{2}$, 即 $1s_{1/2}$ 态的电子没有自旋轨道耦合,因而能级没有移动。

考虑狭义相对论质量 μ_n 的影响,于是量子数为 $n, l, j = l \pm \frac{1}{2} (l > 0)$, 以及 $j = \frac{1}{2} (l = 0)$ 态的电子能量分别为

$$E_{n,l,j=l+\frac{1}{2}} = E_n^0 + \frac{\mu_n c^2}{2} \left(\frac{z - \sigma_{n,l,j}}{137} \right)^4 \times \frac{1}{n^3 (2l+1)(l+1)}, \quad (26)$$

$$E_{n,l,j=l-\frac{1}{2}} = E_n^0 - \frac{\mu_n c^2}{2} \left(\frac{z - \sigma_{n,l,j}}{137} \right)^4 \times \frac{1}{n^3 l(2l+1)}, \quad (27)$$

$$E_{n,0,j=1/2} = E_n^0 + \frac{\mu_n c^2}{2} \left(\frac{z - \sigma_{n,0,j}}{137} \right)^4 \frac{1}{n^3}. \quad (28)$$

将(3)和(7)式分别代入(26)–(28)式,可以得到在狭义相对论中, $2p_{3/2}$ 态, $2p_{1/2}$ 态和 $1s_{1/2}$ 态的电子能量。

$2p_{3/2}$ 态的电子能量为

$$E_{2,1,j=3/2} = -\frac{\mu_0 (z - \sigma_{2,1,3/2})^2 e_s^4}{8\hbar^2} + \frac{\mu_0 c^2}{6} \left[1 + \frac{(z - \sigma_{2,1,3/2})^2 e_s^4}{8\hbar^2 c^2} \right]$$

$$\times \left(\frac{z - \sigma_{2,1,3/2}}{274} \right)^4, \quad (29)$$

$2p_{1/2}$ 态的电子能量为

$$E_{2,1,j=1/2} = -\frac{\mu_0 (z - \sigma_{2,1,1/2})^2 e_s^4}{8\hbar^2} - \frac{\mu_0 c^2}{3} \left[1 + \frac{(z - \sigma_{2,1,1/2})^2 e_s^4}{8\hbar^2 c^2} \right] \times \left(\frac{z - \sigma_{2,1,1/2}}{274} \right)^4, \quad (30)$$

$1s_{1/2}$ 态的电子能量为

$$E_{1,0,j=1/2} = -\frac{\mu_0 (z - \sigma_{1,0,1/2})^2 e_s^4}{2\hbar^2} + \frac{\mu_0 c^2}{2} \left[1 + \frac{(z - \sigma_{1,0,1/2})^2 e_s^4}{2\hbar^2 c^2} \right] \times \left(\frac{z - \sigma_{1,0,1/2}}{137} \right)^4, \quad (31)$$

其中, $\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, $\mu_0 = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$, $e_s = 1.52 \times 10^{-14} \text{ C}$, $c = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s}$, $\sigma_{1,0,1/2} = \sigma_{2,1,1/2} = \sigma_{2,1,3/2}$.

电子由 L 层跃迁填充 K 层所形成的特征 X 射线的 K_α 辐射过程如图 1 所示。

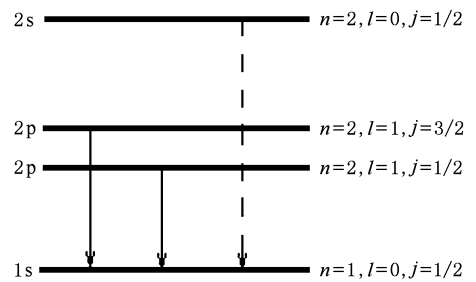


图 1 形成特征 X 射线的 K_α 辐射过程简图

电子由 L 层的 $2p_{1/2}$ 态和 $2p_{3/2}$ 态跃迁填充 K 层 $1s_{1/2}$ 态空穴所形成的 X 射线波长 $\lambda_{1/2}$ 和 $\lambda_{3/2}$ 分别表示为

$$\lambda_{1/2} = \frac{2\pi\hbar c}{E_{2,1,j=1/2} - E_{1,0,j=1/2}}, \quad \lambda_{3/2} = \frac{2\pi\hbar c}{E_{2,1,j=3/2} - E_{1,0,j=1/2}}. \quad (32)$$

将(32)式代入(1)式,得到计算特征 X 射线的 K_α 辐射波长公式

$$\lambda_\alpha = \frac{2\pi\hbar c}{3} \times \frac{2E_{2,1,j=1/2} + E_{2,1,j=3/2} - 3E_{1,0,j=1/2}}{(E_{2,1,j=1/2} - E_{1,0,j=1/2})(E_{2,1,j=3/2} - E_{1,0,j=1/2})}. \quad (33)$$

5. 结果及分析

理论计算出 Mg, Ca, Fe 等元素的 K_{α} 辐射波长, 将计算的各波长分别与文献 [11] 的实验波长相比较, 如表 1 所示.

根据(33)式特征 X 射线波长的计算公式, 可以

表 1 特征 X 射线的 K_{α} 辐射波长的计算值与实验值比较

元素	z	实验值/ \AA	计算值/ \AA	相对误差/%	元素	z	实验值/ \AA	计算值/ \AA	相对误差/%
Na	11	11.9101	12.0453	1.13	Sb	51	0.4718	0.4818	2.12
Mg	12	9.8900	9.9548	0.65	Te	52	0.4528	0.4631	2.27
Al	13	8.3401	8.3648	0.29	I	53	0.4348	0.4454	2.45
Si	14	7.1263	7.1274	0.02	Xe	54	0.4179	0.4288	2.61
P	15	6.1580	6.1456	0.20	Cs	55	0.4018	0.4130	2.80
S	16	5.3731	5.3535	0.36	Ba	56	0.3866	0.3981	2.99
Cl	17	4.7288	4.7052	0.49	La	57	0.3723	0.3840	3.16
Ar	18	4.1928	4.1679	0.59	Ce	58	0.3586	0.3707	3.38
K	19	3.7424	3.7177	0.66	Pr	59	0.3457	0.3580	3.57
Ca	20	3.3595	3.3367	0.68	Nd	60	0.3334	0.3460	3.78
Sc	21	3.0320	3.0113	0.68	Pm	61	0.3217	0.3345	4.00
Ti	22	2.7497	2.7314	0.67	Sm	62	0.3106	0.3237	4.22
V	23	2.5048	2.4887	0.64	Eu	63	0.3000	0.3133	4.45
Cr	24	2.2910	2.2770	0.61	Gd	64	0.2899	0.3034	4.68
Mn	25	2.1031	2.0912	0.56	Tb	65	0.2803	0.2940	4.91
Fe	26	1.9374	1.9273	0.52	Dy	66	0.2711	0.2850	5.16
Co	27	1.7903	1.7819	0.47	Ho	67	0.2623	0.2765	5.42
Ni	28	1.6592	1.6523	0.42	Er	68	0.2539	0.2683	5.68
Cu	29	1.5418	1.5364	0.35	Tm	69	0.2459	0.2604	5.93
Zn	30	1.4364	1.4323	0.29	Yb	70	0.2382	0.2529	6.21
Ga	31	1.3414	1.3384	0.23	Lu	71	0.2309	0.2458	6.46
Ge	32	1.2554	1.2534	0.15	Hf	72	0.2238	0.2389	6.76
As	33	1.1772	1.1763	0.08	Ta	73	0.2171	0.2323	7.02
Se	34	1.1061	1.1061	0.00	W	74	0.2106	0.2260	7.32
Br	35	1.0411	1.0420	0.08	Re	75	0.2044	0.2199	7.61
Kr	36	0.9814	0.9833	0.19	Os	76	0.1984	0.2141	7.93
Rb	37	0.9269	0.9294	0.27	Ir	77	0.1927	0.2085	8.22
Sr	38	0.8767	0.8799	0.36	Pt	78	0.1871	0.2031	8.58
Y	39	0.8302	0.8342	0.48	Au	79	0.1818	0.1979	8.90
Zr	40	0.7873	0.7919	0.58	Hg	80	0.1767	0.1930	9.22
Nb	41	0.7476	0.7528	0.69	Tl	81	0.1718	0.1882	9.55
Mo	42	0.7107	0.7166	0.82	Pb	82	0.1670	0.1836	9.93
Tc	43	0.6765	0.6828	0.93	Bi	83	0.1624	0.1791	10.30
Ru	44	0.6445	0.6514	1.07	Po	84	0.1580	0.1748	10.66
Rh	45	0.6147	0.6222	1.21	At	85	0.1538	0.1707	10.99
Pd	46	0.5869	0.5948	1.35	Rn	86	0.1496	0.1667	11.44
Ag	47	0.5609	0.5692	1.48	Fr	87	0.1456	0.1628	11.85
Cd	48	0.5365	0.5452	1.63	Ra	88	0.1418	0.1591	12.22
In	49	0.5136	0.5228	1.79	Ac	89	0.1381	0.1555	12.63
Sn	50	0.4921	0.5016	1.94	Th	90	0.1345	0.1520	13.06

分析表 1 中的数据,可以看出,理论计算推导的各元素 K_{α} 辐射波长值与它们各自所对应的实验波长值非常接近,并且随着原子序数的增加,两者间的相对误差成规律性的变化.在原子序数 11—40 的范围内,相对误差大致在 0.5% 左右;在原子序数 41—60 的范围内,相对误差大致在 2.5% 左右;在原子序数 61—76 的范围内,相对误差大致在 6% 左右;在原子序数 77—90 的范围内,相对误差大致在 9% 左右.

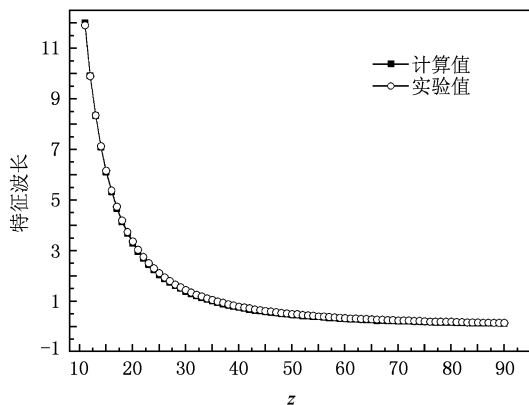


图 2 特征 X 射线的 K_{α} 辐射波长的计算值与实验值比较

通过图 2 所示的特征 X 射线的 K_{α} 辐射波长的

计算值与实验值比较及变化规律可以知道, K_{α} 辐射波长的计算值与实验值两者之间非常接近,并且随着原子序数的增加,它们之间的 K_{α} 辐射波长的变化规律基本上一致.

通过(33)式所推导的计算特征 X 射线波长的计算公式,可以对物质元素进行测定以及对晶体的周期性结构进行理论研究.利用布拉格方程^[12] $2d\sin\theta = n\lambda$,如果知道晶体的晶面间距 d ,掠射角 θ ,就可以计算特征 X 射线的波长 λ ,通过(33)式就可以确定组成靶的各种元素.通过已知的晶体掠射角 θ 和特征 X 射线的 K_{α} 辐射波长 λ ,利用布拉格方程就可以计算出晶体的晶面间距 d ,从而分析晶体的周期性结构.

6. 结 论

基于狭义相对论的基本原理,在经典量子理论的基础上,研究了特征 X 射线的辐射机理,分析了在狭义相对论下电子自旋轨道耦合对特征 X 射线波长的影响,得到了一个计算特征 X 射线波长的公式,并且其计算推导的各元素 K_{α} 辐射波长值与实验的波长值相比也是非常接近的,这在实际应用中对分析特征 X 射线光谱具有一定的参考意义.

- [1] Einstein A 1905 *Annalen der Physik* **17** 891
 [2] Quarles C, Semaan M 1982 *Phys. Rev. A* **26** 3147
 [3] Li J, Dong C Z, Xie L Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 655 (in Chinese) [李 杰、董晨钟、颀录有 2006 物理学报 **55** 655]
 [4] Pauli W 1925 *Z Physik* **31** 765
 [5] Goudsmit S A, Uhlenbeck G E 1925 *Naturwissenschaften* **13** 953
 [6] Einstein A 1905 *Annalen der Physik* **17** 132
 [7] Yu Z Q, Xie Q, Xiao Q Q, Zhao K J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58**

6889 (in Chinese) [余志强、谢 泉、肖清泉、赵珂杰 2009 物理学报 **58** 6889]

- [8] Lorentz H A 1904 *Proc. Roy. Soc. Amst.* **6** 809
 [9] Pais A 1986 *Inward Bound of Matter and Forces in the Physical World* (New York: Oxford University Press) p229
 [10] Thomas L H 1926 *Nature* **117** 514
 [11] Bearden J A 1967 *Rev. Mod. Phys.* **39** 78
 [12] Bragg W L 1913 *Proc. Cam. Phil. Soc.* **17** 43

Effects of the spin-orbit coupling on X-ray spectrum in special relativity^{*}

Yu Zhi-Qiang Xie Quan[†] Xiao Qing-Quan

(*Institute of Advanced Optoelectronic Materials and Technology, College of Science, Guizhou University, Guiyang 550025, China*)

(Received 26 April 2009; revised manuscript received 29 April 2009)

Abstract

Based on special relativity, the formation mechanism of characteristic X-ray was studied, and the influence of the spin-orbit coupling on the characteristic X-ray wavelength was analyzed. A calculation formula of the X-ray wavelength based on special relativity is obtained. Error analysis is carried out systematically for the calculation values of wavelength, and the rules of relative error are obtained. It is shown that the results of the calculation are very close to the experimental results, which have some reference meaning for spectrum analysis of characteristic X-ray in application.

Keywords: special relativity, characteristic X-ray, spin-orbit coupling, error analysis

PACC: 3220R

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60566001, 60766002) the Special Foundation for International Cooperation of the Ministry of Science and Technology of China (Grant No. 2008DFA52210), the Foundation of the Information Industry of Guizhou Province, China (Grant No. 0831), and the Science-Technology Program of Guiyang, China (Grant No. [2008]15-3).

[†] Corresponding author. E-mail: qxie@gzu.edu.cn