

文章编号: 1007-4627(2007)03-0313-05

C^{q+} 和 O^{q+} 与原子碰撞的电子俘获过程的理论研究*

李明生^{1,2}, 阮芳芳^{1,2}, 蔡晓红¹

(1 中国科学院近代物理研究所, 甘肃 兰州 730000;

2 中国科学院研究生院, 北京 100049)

摘要: 在 ECPSSR 理论的基础上, 利用 OBKN 近似描述电子俘获过程, 得到了包括电子俘获过程贡献的 ECPSSR 理论, 编写了相应的计算程序。采用该程序计算了不同电荷态离子与多种靶原子碰撞的电子俘获截面和相应的 X 射线产生截面, 将计算得到的包含电子俘获过程贡献的 X 射线产生截面与实验结果进行了比较。对于具有满 K 壳层的入射离子碰撞, X 射线产生截面与入射离子电荷态基本无关; 对于以直接电离为主导的碰撞过程, 计算得到的 X 射线产生截面与实验数据符合得很好; 对于全裸和单 K 空穴入射离子的碰撞, 计算高估了 X 射线产生截面。

关键词: ECPSSR 理论; 单电子俘获截面; X 射线产生截面; 离子-原子碰撞; OBKN 理论

中图分类号: O469 **文献标识码:** A

1 引言

在过去的十多年中, 离子-原子碰撞研究得到了长足发展, 积累了大量的实验数据^[1,2], 发展了相关的理论模型。中国科学院近代物理研究所长期以来致力于离子-原子碰撞的研究, ECR 平台、320 kV ECR 平台、兰州重离子加速器和兰州重离子加速器冷却储存环可提供从低能到高能的各种重离子束, 为进行重离子-原子碰撞研究创造了良好的实验条件^[3]。

高电荷态离子与多电子原子碰撞有多个反应道, 包括单/多重电离和单/多电子俘获等不同反应机制, 有多个电子参与碰撞的过程, 是一个复杂的多体动力学问题, 理论处理的难度很大。离子-原子碰撞的内壳层电离主要有 3 种机制^[4]: 直接电离、电子俘获和分子轨道跃迁 (MO Promotion)。 Z_1/Z_2 比值 (Z_1 为入射离子的电荷数, Z_2 为靶原子的电荷数) 和 v_1/v_{2s} 比值 (v_1 和 v_{2s} 分别对应入射离子速度和靶原子 S 壳层的轨道速度) 的不同, 决定了反应机制的不同。当 $Z_1/Z_2 \ll 1$, $v_1/v_{2s} \gg 1$ 时, 主要是直接电离机制; 对于 $Z_1/Z_2 \leq 1$, $v_1/v_{2s} \leq 1$ 时的非对称碰撞过程, 电子俘获或者电荷转移到入射离子空壳层的反应将变得重要; 而当 $Z_1/Z_2 \approx 1$, $v_1/v_{2s} \ll 1$

时, 分子轨道跃迁引起的电离将起主要作用。

目前, 直接电离过程的理论描述已相对比较完善。常用的几种理论模型有: 平面波波恩近似^[5]、二体碰撞近似^[6]、半经典近似^[7]以及 ECPSSR 理论等。其中, ECPSSR 理论是基于平面波波恩近似, 采用静态微扰 (PSS) 近似处理了极化和结合能效应, 并引入了相对论效应 (R)、能量损失效应 (E) 和库仑偏转效应 (C) 的修正而得到的^[8], 是目前最为成功的直接电离理论。

对于较低能区的重离子-原子碰撞过程, 即满足 $v_1/v_{2s} \leq 1$ 情况时, 除直接电离机制之外, 电子俘获过程逐渐变得重要, 相应的理论处理需要考虑电子俘获过程的贡献。考虑到中国科学院近代物理研究所 ECR 平台和 320 kV ECR 平台上的实验基本都属于这个能区, 在 ECPSSR 理论基础上, 利用 Oppenheimer-Brinkman-Kramers-Nikolaev (OBKN) 近似描述电子俘获过程, 得到了包括该过程贡献的 ECPSSR 理论, 编写了相应的计算程序^[3], 计算了一些碰撞体系的截面, 并与实验结果进行了比较。

2 OBKN 近似

Nikolaev^[9]应用非相对论类氢波函数, 得到了

* 收稿日期: 2006-10-09; 修改日期: 2007-05-15

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (10134010, 10375080, 10304019)

作者简介: 李明生 (1980-), 男 (汉族), 河北平山人, 硕士, 从事原子物理研究; E-mail: lms@inpcas.ac.cn

全裸离子与靶原子碰撞的内壳层电子俘获截面, 即 OBKN 理论电子俘获截面:

$$\sigma_{SS'}^{OBKN} = \frac{2^9 \pi}{5} \left(\frac{n_1 n_2}{v_1} \right)^2 \left(\frac{v_{1S'}}{v_{2S}} \right)^5 \xi_{SS'}^{10}(\theta_S) \cdot \frac{\Phi_4 [(1 - \theta_S)^2 \xi_{SS'}^2(\theta_S)]}{[1 + (1 - \theta_S) \xi_{SS'}^2(\theta_S)]^3}, \quad (1)$$

其中, θ_S 为靶原子 S 壳层的约化电子结合能, n_1 和 n_2 分别对应壳层 S 和 S' , 其中 S 为靶原子的某一壳层, S' 为入射离子俘获电子的某一壳层, v_1 为入射离子速度, $v_{1S'}$ 和 v_{2S} 分别对应于入射离子和靶原子 S' 和 S 壳层的轨道速度, $v_{1S'} = Z_1/n_1$, $v_{2S} = Z_{2S}/n_2$, Z_1 为入射离子的电荷数, Z_{2S} 为靶原子的有效电荷数。

$$\xi_{SS'}(\theta_S) = \frac{v_{2S}}{[v_{1S'}^2 + q_{SS'}^2(\theta_S)]^{1/2}}, \quad (2)$$

$$q_{SS'}^2(\theta_S) = 0.5 \left(v_1 + \frac{v_{2S} \theta_S - v_{1S'}}{v_1} \right), \quad (3)$$

$$\Phi_4 \equiv \left\{ 1 - \frac{4}{t} \left[\left(1 + \frac{1}{t} \right)^3 \ln(1+t) - \left(1 + \frac{1}{t} \right)^2 - \frac{1}{2}(1+t) - \frac{1}{3} \right] \right\}. \quad (4)$$

Lapicki 对上述理论进行了修正, θ_A 修正为 $\xi_S \theta_S$ (其中 ξ_S 为电子结合能修正因子), 并考虑了靶原子的内壳层电子的相对论修正, 详见文献 [10]。结合描述直接电离的 ECPSSR [8] 理论, 可以得到考虑电子俘获过程贡献的 ECPSSR 理论。

具有 S' ($S' = K, L, M, \dots$) 壳层空穴的入射离子相应地有一定几率将靶电子俘获到其某一 S 壳层 [11]。例如, S' 壳层的电离截面应该是直接电离截面 (DI) 和电子俘获截面 (EC) 之和:

$$\sigma_{S'X} = \sigma_{S'X}^{DI} + \sigma_{S'X}^{EC}. \quad (5)$$

入射离子的电子与靶原子的电子相互作用很小, 即不同电荷态的入射离子对直接电离截面的影响可以忽略。对于 K 壳层, 电子俘获到双 K 壳层空穴的截面表示为

$$\sigma_{KX}^{EC(K \text{ shell})} = \sigma_{KX}^{EC(K, L, M, \dots \text{shell})+DI} - \sigma_{KX}^{EC(L, M, \dots \text{shell})+DI}. \quad (6)$$

公式 (6) 假定了入射离子的 L 和 M 壳层电子俘获截面与其 K 壳层是否有空穴无关。

电子俘获到单 K 壳层空穴可表示为

$$\sigma_{KX}^{EC(1/2 K \text{ shell})} = \sigma_{KX}^{EC(1/2 K, L, M, \dots \text{shell})+DI} - \sigma_{KX}^{EC(L, M, \dots \text{shell})+DI}, \quad (7)$$

其中, $1/2 K$ 代表入射离子存在单个 K 壳层空穴。

本文所指的电子俘获截面均指单电子俘获截面, 电离截面通过荧光产额, Coster-Kronig 因子 [12] 以及 Super Coster-Kronig 因子 [13] 转化为相应的 X 射线产生截面。

3 计算方法和结果

由于 OBKN 理论 [10] 只能计算全裸离子以及满 K 壳层、空 L 壳层; 满 K 和 L 壳层、空 M 壳层的离子, 例如对 C^{6+} , C^{4+} , Ar^{18+} , Ar^{16+} 和 Ar^{8+} 等进行计算, 其应用范围有很大的局限性。为了对不同价态入射离子进行计算, 我们提出可以根据入射离子各个壳层的结合能对俘获电子的几率进行加权, 得到不同价态入射离子的单电子俘获截面。例如, 将 C^{5+} 单电子结合能与 C^{6+} 单电子结合能的比值乘 C^{6+} 单电子俘获截面, 可以得到 C^{5+} 单电子俘获截面, 以此类推, 可以得到 C^{3+} 和 C^{2+} 单电子俘获截面。同理可得到 O^{7+} , O^{6+} 和 O^{5+} 等单电子俘获截面。

根据以上假设选择一些碰撞系统进行了计算。表 1 给出了 C^{q+} 与 Al 碰撞, 靶的 K 壳层 X 射线产生截面, 其中 $Z(C)/Z(Al) = 0.46$, q 值为入射离子的电荷态。在表 1 中, C^{4+} 和 C^{3+} 离子碰撞所得到的 X 射线产生截面基本相同, 本计算结果和实验结果一致性很好; 而对于 C^{6+} 和 C^{5+} 碰撞, 理论计算值比实验值高 1.7—3 倍。

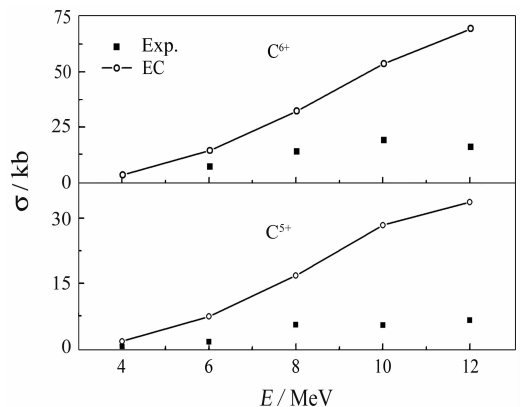


图 1 C^{6+} 和 C^{5+} 电子俘获贡献的 Al 的 K 壳层 X 射线产生截面
EC 为计算值, Exp. 代表实验值 [4]。

图 1 给出了电子俘获截面贡献的 X 射线产生截面, 其中理论计算值是由公式(6)和(7)计算得到的, 实验值则通过 C^{6+} 和 C^{5+} 离子碰撞的截面减去 C^{4+} 离子碰撞的截面得出。从图中可以看到, 随着能量增大即 v_1/v_{2s} 值的增加, 理论计算具有 K 壳层空穴的入射离子电子俘获贡献的 X 射线产生截面值也随之增大, 其值约比实验值高 2—6 倍。

表 2 给出了 C^{q+} 与 Ho 碰撞的 M 壳层 X 射线产生截面。这里, $Z(C)/Z(Ho) = 0.09$, $0.13 \leq v_1/v_{2s}$

≤ 0.45 , q 值为入射离子的电荷态。从表 2 可以看到, 对于 C^{6+} 和 C^{5+} , 随着能量的升高, 本计算过高地估计了截面, 随着能量升高理论值高出实验值近 1.7 倍。在同一入射能量下, 入射离子 C^{4+} , C^{3+} 和 C^{2+} 引起的 X 射线产生截面基本相同, 本计算结果和实验结果基本一致。对于 2 和 4 MeV 低能情况, 本计算过低地估计了截面。

表 3 给出了 12 MeV O^{q+} 离子与 Ni, Cu, Ge 碰撞的 L 壳层 X 射线产生截面, q 值为入射离子的电

表 1 $C^{q+} + Al$ 碰撞的 K 壳层 X 射线产生截面

kb

E/MeV	v_1/v_{2s}	$q = 3$			$q = 4$			$q = 5$			$q = 6$		
		Exp.	DI	本计算	Exp.	DI	本计算	Exp.	DI	本计算	Exp.	DI	本计算
2	0.2	0.056	0.02	0.022	0.058	0.02	0.022		0.02	0.076		0.02	0.13
4	0.29	0.64	0.75	0.81	0.67	0.75	0.83	1.1	0.75	2.4		0.75	3.98
6	0.35	3.5	4.1	4.5	3.6	4.1	4.59	5.2	4.1	11.5	10.6	4.1	18.4
8	0.41	9.2	10.1	11.4	9.2	10.1	11.7	14.7	10.1	26.9	23.1	10.1	42.3
10	0.46	13.6	17.4	19.9	15.7	17.4	20.4	21.1	17.4	45.8	34.2	17.4	71.1
12	0.50		24.5	28.7	15.4	24.5	29.5	21.9	24.5	61.8	31.3	24.5	94.1

Exp. 引自文献[4]。

表 2 $C^{q+} + Ho$ 碰撞的 M 壳层 X 射线产生截面

kb

E/MeV	v_1/v_{2s}	$q = 2$		$q = 3$		$q = 4$		$q = 5$		$q = 6$	
		Exp.	本计算	Exp.	本计算	Exp.	本计算	Exp.	本计算	Exp.	本计算
2	0.2	3.1	1.4	3.2	1.5	3.36	1.5		1.75		2.25
4	0.29	11	8.1	11.6	8.6	11.7	9.1	18.6	11.5	29.4	17.0
6	0.35		17.9	21.0	19.5	21.7	21.0	32.6	28.5	45	44.1
8	0.41		29.2	35.4	32	36.6	34.8	47.6	47.6	58.6	76.5
10	0.46		40.1	43.1	44.0	45.8	48.0	52.7	66.1	67	106.5
12	0.50		49.8		54.6	55.2	59.3	60.7	81.8	74.5	130.8

Exp. 引自文献[11]。

表 3 12 MeV $O^{q+} + Ni, Cu$ 和 Ge 碰撞的 L 壳层 X 射线产生截面

kb

		Z_1/Z_2	$q = 3$	$q = 4$	$q = 5$	$q = 6$	$q = 7$	$q = 8$
	DI	0.29	110.5	110.5	110.5	110.5	110.5	110.5
	本计算	0.29	112.9	113.7	114.5	115	925	1 071
Cu	Exp.	0.28	105	104	107	112	197	267
	DI	0.28	95.4	95.4	95.4	95.4	95.4	95.4
	本计算	0.28	98.2	98.8	99.5	100	811	938
Ge	Exp.	0.25	49	47	45	51	107	148
	DI	0.25	47.8	47.8	47.8	47.8	47.8	47.8
	本计算	0.25	48.4	48.6	48.8	49	376	434

Ni, Cu 和 Ge 的截面值引自文献[14]。

荷态。从表中可以看到对于满 K 壳层入射离子 O^{9+} ，随着入射离子电荷态的变化，X 射线产生截面的变化不大，与表 2 中 C^{4+} 、 C^{3+} 和 C^{2+} 离子入射的情况相似，计算结果也与实验结果基本一致。对于 O^{7+} 和 O^{8+} 离子入射，理论计算得到的 X 射线产生截面值比实验值高 3 到 4 倍。

图 2 给出了电子俘获对靶 Ni, Cu 和 Ge 的 L 壳层 X 射线产生截面的贡献。由图可见，随着 Z_2 值的增加及 Z_1/Z_2 的减小，计算值和实验值逐渐趋向一致。

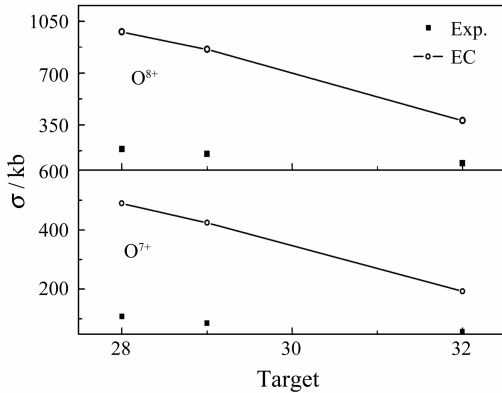


图 2 由 O^{7+} 和 O^{8+} 离子电子俘获贡献的 Ni, Cu 和 Ge 的 L 壳层 X 射线产生截面

EC 为计算的电子俘获贡献的 X 射线截面值, Exp. 为实验值引自文献[14]。

4 结果和讨论

从 C 离子与 Al 和 O 离子与 Ni, Cu 和 Ge 的碰撞情况可发现，对于 $Z_1/Z_2 \approx 1$ 时，随着 v_1/v_{2s} 增加，理论计算值与实验值相差越大（见图 1）；在 v_1/v_{2s} 值一定的情况下，随着 Z_1/Z_2 值的减小，理论计算值与实验值趋向一致（见图 2）。可见 ECPSSR 的电子俘获理论对于 v_1/v_{2s} 值和 Z_1/Z_2 值较小的情况，可以很好地符合于实验结果。

对于具有满 K 壳层空穴的入射离子，相应的靶 X 射线产生截面与入射离子电荷态基本无关，见表 2 以及表 1 和表 3 中 C^{4+} 、 C^{3+} 、 O^{6+} 、 O^{5+} 、 O^{4+} 等离子。对于具有 K 壳层空穴的入射离子的电子俘获截面，ECPSSR 理论计算值明显高于实验值。见图 1 和图 2。这可能是与具有 K 壳层空穴的入射离子相比，满 K 壳层空穴的入射离子电子俘获截面很小的缘故。在满 K 壳层空穴的情况下，ECPSSR 计算值与实验值基本符合。

入射离子能量为 2 和 4 MeV 时，理论计算值比实验值偏低，在表 2 能直观地看到这种现象，在表 1 中入射离子能量为 2 MeV 时实验值约是理论值的 2.6 倍，这主要有两方面的原因：第一，随着能量降低， v_1/v_{2s} 变小，分子轨道电离机制将变得重要，而在计算中未考虑分子轨道电离的贡献；第二，随着能量的降低，多重电离效应导致荧光产额增大，计算中所采用的荧光产额没有进行多重电离效应修正，从而导致低能区的截面计算值偏低^[4, 11]。

从以上比较来看，对于具有满 K 壳层的入射离子碰撞，靶的 X 射线产生截面与入射离子电荷态基本无关。对于 $Z_1/Z_2 \ll 1$ ， $v_1/v_{2s} \gg 1$ ，即以直接电离为主导的碰撞过程，本工作计算得到的 X 射线产生截面与实验数据符合得很好，由此说明 ECPSSR 理论很好地描述了直接电离过程；但对于全裸离子和单 K 空穴入射离子的碰撞，本工作计算结果高估了 X 射线产生截面，说明 ECPSSR 理论描述电子俘获，尤其对 Z_1/Z_2 比值以及 v_1/v_{2s} 比值较大的碰撞过程，明显过高地估计了电子俘获对 X 射线产生截面的贡献。

总体来说，我们的计算方法和实验结果符合得比较好，这套计算程序为进行几 MeV 能量的高电荷态重离子与多电子原子碰撞研究提供了帮助。重离子碰撞是个复杂的过程，涉及到多方面的机制，在以后将继续进行这一领域的研究。

参考文献 (References):

- [1] Cai X, Liu Z Y, Chen X M, *et al.* Physica Scripta, 1993, **47**: 751.
- [2] Cai X, Liu Z Y, Chen X M, *et al.* Nucl Instr and Meth, 1992, **B72**: 159.
- [3] Xia Jiawen, Zhan Wenlong, Wei Baowen, *et al.* Nuclear Physics Review, 2001, **18**(1): 35 (in Chinese).
(夏佳文, 詹文龙, 魏宝文等. 原子核物理评论, 2001, **18**(1): 35.)
- [4] Sun H L, Yu Y C, Lin E K, *et al.* Phys Rev, 1996, **A53**: 4 190.
- [5] Merzbacher E, Lewis H. Handbuch der Physik. Berlin: Springer, 1958, **34**: 166.
- [6] Hansen J S. Phys Rev, 1973, **A8**: 822.
- [7] Hansteen M, Mosebekk O P. Z Phys, 1970, **234**: 281.
- [8] Brandt W, Lapicki G. Phys Rev, 1981, **A23**: 1 717.
- [9] Nikolaev V S. Sov Phys JETP, 1967, **24**: 847.

- [10] Lapicki G, McDaniel F D. Phys Rev, 1980, **A22**: 1 896. 1972, **44**: 716.
- [11] Yu Y C, Sun H L. Phys Rev, 1995, **A52**: 3 836. [14] Yu Y C, Azordegan A R, Sun H L, *et al.* Nucl Instr and Meth, 1999, **B150**: 27.
- [12] Krause M. J Phys Chem Ref Data, 1979, **8**: 307.
- [13] Nambynek W, Crasemann B, Fink R, *et al.* Rev Mod Phys,

Theoretical Study of Electron Capture Induced by Multiple Charged Carbon and Oxygen Ions*

LI Ming-sheng^{1, 2, 1)}, RUAN Fang-fang^{1, 2}, CAI Xiao-hong¹

(1 *Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China;*

2 *Graduate School of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

Abstract: Based on the ECSSR theory, the contribution of the electron capture is described by the OBKN theory. The cross sections of electron capture and X ray production for the collision of different charge state projectiles with various targets are calculated, and compared with the available experimental data. It is found that the obtained X ray production cross sections are almost independent of the projectile charge states for projectiles without a *K* vacancy. For the collision processes of direct ionization, the present calculated results agree well with the experimental data. The calculations overestimate the X ray production cross sections for the projectiles with full and a *K* vacancy.

Key words: ECSSR theory; cross section of single electron capture; X ray production cross section; ion-atom collision; OBKN theory

* **Received date:** 9 Oct. 2006; **Revised date:** 15 May 2007

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China(10134010, 10375080, 10304019)

1) E-mail: lms@impcas.ac.cn