

氮原子价壳层的广义振子强度研究^y

李文斌, 朱林繁, 刘小井, 苑震生, 成华东, 徐克尊
(中国科学技术大学选键化学重点实验室, 近代物理系, 安徽 合肥 230027)

摘要: 在入射电子能量 2.5 keV、角度 $1^\circ - 8^\circ$ 条件下测量了氮的价壳层偶极允许跃迁 $4p^6(^1S_0) \rightarrow 4p^5 5s[3/2]_1$, $4p^5 5s'[1/2]_1$, 以及偶极禁戒跃迁 $4p^6(^1S_0) \rightarrow 4p^5 5p$ 的绝对广义振子强度, 并与前人的实验和理论结果进行了比较。

关键词: 氮原子电子能量损失谱; 光学振子强度; 广义振子强度

中图分类号: O561.5 文献标识码: J

1 引言

由于氮原子在准分子激光、大气物理、等离子体物理中的重要运用, 其能级结构及微分散射截面一直是原子分子物理研究的重点^[1, 2]. 利用快电子碰撞测量氮原子的微分散射截面和广义振子强度 (GOS) 不仅可以为各学科的研究提供必要的实验数据, 而且可以作为检验量子理论的一种方法^[3, 4]. 在高入射电子能量下, 氮原子的分立跃迁的微分散射截面和 GOS 研究并不多. Takayanagi 等^[1] 在电子入射能量 300, 500 eV, 能量分辨 25—40 meV, 动量转移 K^2 在 0.018—1.04 ato. unit 条件下测量了 $5s$ 和 $5s'$ 跃迁的绝对 GOS. Wong 等^[5] 在电子入射能量 25 keV, 能量分辨 1 eV, 动量转移 K^2 在 0.25—7.0 ato. unit 条件下测量了 $5s + 5s'$ 跃迁的相对 GOS. 由于理论上计算的氮原子 GOS 的极值的位置以及强度与实验中测量的极值比较可以作为 Born 近似以及波函数精确度的检验方法^[3, 6], Chen 等^[4] 利用含交换势的随机相应近似方法; Padma 等^[7] 利用相对论局域密度势方法; Shi 等^[8] 在一阶 Born 近似条件下利用 Dirac-Fock 和 Dirac-Fock-Slater 理论分别计算了 $5s$ 和 $5s'$ 的 GOS.

2 实验装置和方法

本实验采用高分辨快电子能量损失谱仪 (HREELS)^[9]. 实验条件是入射电子能量 2.5 keV、

散射角范围 $1^\circ - 8^\circ$ 、相应动量转移 K^2 为 0.05—3.6 ato. unit、能量分辨为 75 meV, 测量总误差不大于 8%.

根据 Bethe-Born 理论, 在一阶 Born 近似成立且忽略交换效应时, GOS 可表示为^[6]:

$$f(K) = \frac{E}{2} \frac{P_0}{P_a} K^2 \frac{d\sigma}{d\Omega}, \quad (1)$$

其中 $d\sigma/d\Omega$ 代表微分散射截面; p_0 和 p_a 分别代表入射、出射电子的动量; E 和 K 分别是能量损失值和动量转移. 当动量转移平方 K^2 趋于零时, GOS 趋于光学振子强度 (OOS), 即有:

$$\lim_{K^2 \rightarrow 0} f(K) = f_0. \quad (2)$$

实验测量的每一跃迁的相对强度角分布, 在经过束流修正、气压修正和角度因子修正后即可得到该跃迁的相对微分散射截面. 经公式 (1) 转换后, 由相对微分散射截面可获得相对 GOS. 由公式 (2), 相对 GOS 外推到动量转移为零得到相对 OOS, 并使用我们先前测量的 $4p^5 5s[3/2]_1$ 跃迁的绝对 OOS (0.214) 标定实验数据, 从而得到绝对的 GOS.

3 结果和讨论

图 1 给出的是氮原子 $4p^6(^1S_0) \rightarrow 4p^5 5s[3/2]_1$ 跃迁和 $4p^6(^1S_0) \rightarrow 4p^5 5s'[1/2]_1$ 跃迁的绝对 GOS 以及 Takayanagi^[1] 在电子入射能量为 500 eV 的实验

^y 收稿日期: 2002 - 03 - 05; 修改日期: 2002 - 05 - 30

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (10134010, 10004010); 中国科技大学青年基金资助项目

作者简介: 李文斌 (1973-), 男 (汉族), 云南弥渡人, 博士研究生, 从事原子分子物理的实验研究.

结果. 由图中可以看出我们的结果在形状上和他们的结果符合得很好, 但我们的实验结果高于他们的结果. 我们测量的氮原子 $4p^6(^1S_0) \rightarrow 4p^55s [3/2]_1$ 跃迁和 $4p^6(^1S_0) \rightarrow 4p^55s' [1/2]_1$ 跃迁的绝对 GOS 外推得到的绝对 OOS 分别为 0.214(绝对标定值)和 0.206. Chan 等^[10]测量的结果分别为 0.214 和 0.193, 这在误差范围内符合的很好. 而 Takayanagi 等人的 $5s [3/2]_1$ 和 $5s' [1/2]_1$ 跃迁外推得到的绝对 OOS 分别为 0.143 和 0.127, 小于我们以及 Brion 的结果. 由于 Takayanagi 数据的绝对标定使用的是他人的绝对弹性微分散射截面, 所以可能是数据标定导致他们的结果偏低. 当然入射电子能量较低也可能是原因之一. 与 Takayanagi 的实验结果^[11]相比, 我们测量的动量转移范围更大, 且测量到了 $5s$ 和 $5s'$ 跃迁 GOS 的极小和极大值, 测量结果列于表 1 中.

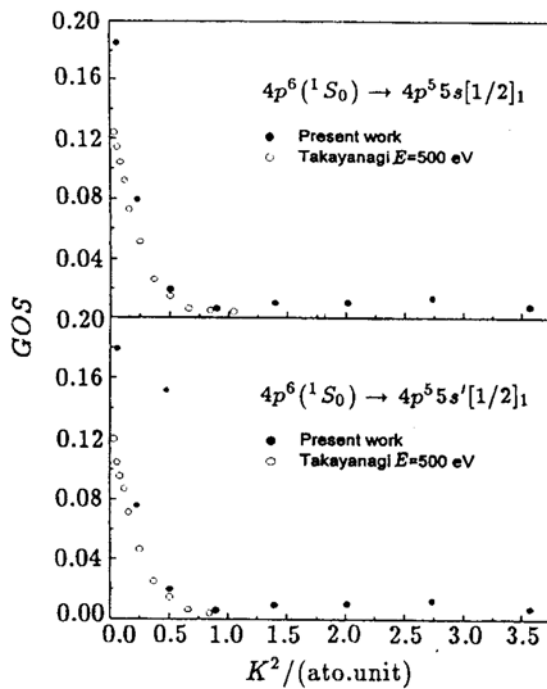


图 1 氮 $4p^55s [3/2]_1$ 跃迁的广义振子强度

图 2 显示的是 $4p^6 \rightarrow 4p^55s + 5s'$ 跃迁的绝对 GOS, 并与其他实验^[1, 5]和理论^[4]的结果进行了比较. Wong^[5]实验结果是相对 GOS, 图中给出的是使用 Takayanagi 的结果标定的值^[4]. 从图中可以看出, 我们的实验结果与前人的实验结果在趋势上是一致的, 但绝对值上有较大的差异, 这有待于进一步的研究.

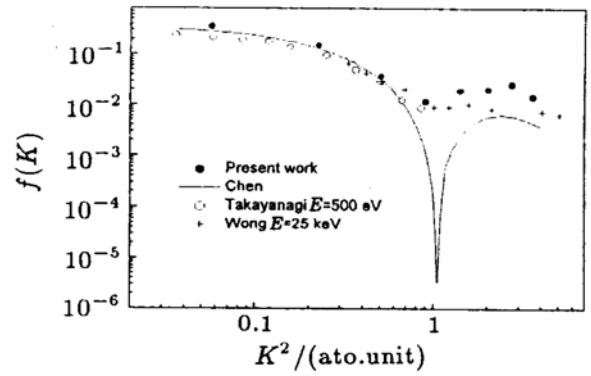


图 2 氮 $4p^6 \rightarrow 4p^55s + 5s'$ 跃迁的广义振子强度

图 3 显示的是 $4p^6 \rightarrow 4p^55p$ 禁戒跃迁的 GOS, 据我们所知, 这在以前文献中未见报道, 同时发现有两个极大值一个极小值. 第一极大在 $K^2 \approx 0.22$ ato. unit, 第二极大在 $K^2 \approx 2.74$ ato. unit, 极小值在 $K^2 \approx 1.4$ ato. unit. 这与我们以前氮的实验结果类似^[11].

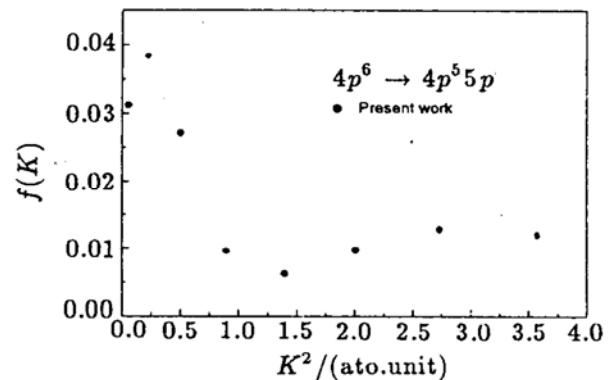


图 3 氮 $4p^6 \rightarrow 4p^55p$ 跃迁的广义振子强度

为了便于比较, 表 1 列出的是氮原子的 $4p^6 (^1S_0) \rightarrow 4p^55s [3/2]_1 + 5s' [1/2]_1$ 跃迁的 GOS 的极小和极大值的位置.

表 1 氮原子 $4p \rightarrow 5s + 5s'$ 跃迁的 GOS 的极小和极大值的位置

作者	K 极小值		K 极大值	
	实验值	理论值	实验值	理论值
Prensent	0.95		1.65	
Wong 等 ^[5]	1.02 ± 0.05		1.58 ± 0.10	
Kim 等 ^[3]	0.95	1.10		
Chen ^[4] RPAE		1.026		1.55
Padma ^[7]		1.21		
Miller ^[12]		0.83		1.16

参 考 文 献:

- [1] Takayanagi T, Li G P, Wakiya K, *et al.* Measurement of Electron impact excitation Cross Sections and Oscillator Strengths for Kr[J]. Phys Rev, 1990, **A41**(11): 5 948.
- [2] Trajmar S, Srivastava S K, Tanaka H, *et al.* Excitation Cross Sections for Krypton by Electrons in the 15—100 eV Impact-energy Range[J]. Phys Rev, 1981, **A23**(5): 2 167.
- [3] Kim Y K, Inokuti M, Chamberlain G E, *et al.* Minima of Generalized Oscillator Strengths[J]. Phys Rev Letters, 1968, **A21**(16): 1 146.
- [4] Chen Zhifan, Msezane Alfred. Minima and Maxima in Generalized Oscillator Strengths of Ne, Kr and Xe[J]. J Phys B: At Mol Opt Phys, 2000, **33**: 5 397.
- [5] Wong T C, Lee J S, Bonham R A. Maxima and Minima in the Angular Dependence of the $[(np)(n+1)s]$ Transition in the Rare Gases Observed by High-energy Electron Impact Spectroscopy[J]. Phys Rev, 1975, **A11**(6): 1 963.
- [6] Inokuti M. Inelastic Collisions of Fast Charged Particles with Atoms and Molecules—the Bethe Theory Revisited[J]. Phys Rev, 1971, **A43**: 297.
- [7] Padma R, Deshmukh P C. Calculations of Generalized Oscillator Strength for Electron impact Excitations of Krypton and Xenon Using a Relativistic Local-density Potential[J]. Phys Rev, 1992, **A46**(5): 2 513.
- [8] Shi Qicun, Zhang Suimeng, Cho Hyuck, *et al.* Relativistic Structure Description and Relaxation Effect on Krypton $4p^5(^2P_{3/2}, 1/2)5s$ Excitation at Small Squared Momentum Transfer[J]. J Phys B: At Mol Opt Phys, 1998, **31**: 4 123.
- [9] Liu X J, Zhu L F, Jiang X M, *et al.* Application of a Multichannel Detection System to The High-resolution Fast Electron Energy Loss Spectrometer[J]. Rev Sci Instrum, 2001, **72**(8): 3 357.
- [10] Chan W F, Copper G, Guo X, *et al.* Absolute Optical Oscillator Strengths for the Electronic Excitation of Atoms at High Resolution. III. The Photoabsorption of Argon, Krypton, and Xenon[J]. Phys Rev, 1992, **A46**(1): 149.
- [11] Ji Q, Wu S L, Feng R F, *et al.* Absolute Generalized Oscillator Strengths of $4s, 4s', 4p + 4p'$ Excitations of Argon Determined by the Angle-resolved Electron energy-loss Spectrometer[J]. Phys Rev, 1996, **A54**(4): 2 786.
- [12] Miller K J. Dependence of Extrema in the Generalized Oscillator Strengths on Momentum Transfer and Effective Nuclear Charge for Atomic Transitions[J]. J Chem Phys, 1973, **59**(10): 5 639.

An Investigation of Absolute Generalized Oscillator Strengths for Krypton in Valence Shell^{*}

LI Werr bin, ZHU Lirr fan, LIU Xiaor jing, YUAN Zheir sheng, CHEN Huan dong, XU Ker zun
(Key Laboratory of Bond Selective Chemistry, Department of Modern Physics,
University of Science and Technology of China, Hfei 230027, China)

Abstract: The absolute generalized oscillator strengths of $4p^6(^1S_0) \rightarrow 4p^55s[3/2]_1, 4p^55s'[1/2]_1$ transitions and $4p^6(^1S_0) \rightarrow 4p^55p[5/2]_{2,3}[3/2]_{1,2}[1/2]_0$ dipole-forbidden transition in Krypton are determined by angle-resolved electron energy-loss spectrometer at an incident electron energy of 2500 eV and scattering angles from 1° to 8° . These results are compared with other experimental and theoretical results.

Key words: Krypton electron energy-loss spectrometer; optical oscillator strength; generalized oscillator strength

^{*} **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China(10134010, 10004010); Youth Foundation of University of Science and Technology of China