

# 原子和分子结构对电子阻止本领 $Se(E)$ 的 Z 振荡的影响\*

王德宁 王渭源

(中国科学院上海冶金研究所, 上海)

**摘要** 本文在 Firsov 理论上, 引入 Slater 波函数等概念, 解释了原子结构对  $Se(E)$  的 Z 振荡的影响。它不仅能解释常规能量范围内(10—1000 keV)的轻元素靶和重元素靶的 Z 振荡行为, 而且能解释更高的能量范围内(10—100 MeV) Z 振荡行为。本文引用了分子轨道法理论来处理分子靶问题, 导出了分子结构对  $Se(E)$  的 Z 振荡影响的方程式, 使能处理相当宽的能量范围内的分子靶的  $Se(E)$  的 Z 振荡问题。应用本文方法所得结果与  $Z_1 \rightarrow C$  和  $Li^+ \rightarrow Z_2$  靶的  $Z_1$  (或  $Z_2$ ) 振荡的实验结果进行了比较, 同时还与在较高能量范围的  $S^+ \rightarrow Na$  和  $F^+ \rightarrow Ag$  系统的实验结果作了比较, 都得到了满意的结果, 说明本文提出的方法是令人满意的。

**关键词** Z 振荡; 电子阻止本领; 原子和分子结构

## 一、引言

许多实验结果<sup>[1-3]</sup>表明, 电子阻止本领  $Se(E)$  随离子的原子序数  $Z_1$  或单元素靶的原子序数  $Z_2$  发生振荡而变化(简称 Z 振荡)。不少文章<sup>[4-6]</sup>已对这一现象进行了较系统的理论研究, 得到了一些有用的结果, 但均未定量计算过分子结构对  $Se(E)$  的 Z 振荡的影响。本文从原子的周期性结构出发, 不仅研究了常规能量范围内(10—1000 keV)的 Z 振荡, 而且还研究了更高能量范围内的 Z 振荡, 并进一步利用分子轨道法导出了分子结构对 Z 振荡的影响。文中还提出了具体的计算方法。

## 二、理论推导

按 Firsov<sup>[7]</sup> 理论, 定义离子注入靶中与靶原子中的电子相互碰撞时的能量损失为

$$\mathcal{E} = m\nu \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_S \varphi dS \quad (1)$$

这里  $m$  是电子质量;  $\nu$  为离子速度, 它正比于注入离子能量  $E^{\frac{1}{2}}$ ;  $\varphi = (1/4)q\bar{u}$  是流过表面积为  $S$  的电子流,  $q$  是电子密度,  $\bar{u}$  是电子速度的绝对值的平均值。流过第  $i$  壳层的电子流为

$$\varphi_i(r) = (1/4)q_i\bar{u}_i$$

\* 1986 年 9 月 8 日收到, 1987 年 7 月 31 日修改定稿。

这里  $q_i = \phi_i \phi_i^* \omega_i$ ,  $\phi_i$  是原子的波函数;  $\omega_i$  是第  $i$  壳层的电子占有数 ( $\omega_i = 2l_i(l_i+1)$ ),  $l_i$  为第  $i$  壳层的角量子数;  $\bar{u}_i$  可借助于第  $i$  壳层的平均动能来计算, 即  $\bar{u}_i = 2.19 \times 10^{18} \sqrt{E_{n,i}}$  (cm/s),  $E_{n,i}$  为第  $i$  壳层的平均动能, (单位为 rydberg);  $r$  为离子与靶原子的核间距. 由于  $dS = 2\pi p dp$ , 则 (1) 式变为

$$\mathcal{E}_i = 2\pi m v \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{\infty} \varphi_i(r) p dp \quad (2)$$

$p$  为碰撞参数, 单位为 cm. 由图 1 可见

$$r^2 = p^2 + \alpha^2(x^2 + r_0^2) \quad (3)$$

这里  $r_0$  为近碰撞距离, 而  $\alpha$  按文献 [6] 的定义

$$\alpha = [1 + (Z_2/Z_1)^{1/6}]^{-1}; \quad \beta = 1 - \alpha$$

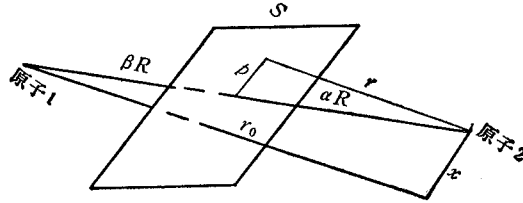


图 1 Firsov 模型的示意

若设  $\eta^2 = p^2 + \alpha^2 x^2$ ,  $\eta_0^2 = \alpha^2 r_0^2$ , 则由 (3) 式得

$$r = \sqrt{\eta^2 + \eta_0^2}; \quad p dp = r dr = \eta d\eta \quad (4)$$

(4) 式代入 (2) 式, 且设  $t = \alpha x$ , 则由 (2) 式得

$$\mathcal{E}_i = \frac{2\pi m v}{\alpha} \int_{-\infty}^0 dt \int_{\infty}^t \varphi_i(\sqrt{\eta^2 + \eta_0^2}) \eta d\eta$$

上式利用  $\int_a^b dx \int_a^x f(x, y) dy = \int_a^b dy \int_y^b f(x, y) dx$  的积分关系, 再经简化, 合并后得

$$\mathcal{E}_i = \frac{4\pi m v}{\alpha} \int_t^{\infty} \varphi_i(\sqrt{\eta^2 + \eta_0^2}) \eta^2 d\eta \quad (5a)$$

离子的第  $i'$  壳层与原子的第  $i$  壳层中电子相互碰撞后能量转移为

$$\mathcal{E}_{ii'} = \pi m v \left[ \frac{\omega_i \bar{u}_i}{\alpha} \int_{\alpha r_0}^{\infty} \phi_i \phi_i^* r \sqrt{r^2 - \alpha^2 r_0^2} + \frac{\omega_{i'} \bar{u}_{i'}}{\beta} \int_{\beta r_0}^{\infty} \phi_{i'} \phi_{i'}^* r \sqrt{r^2 - \beta^2 r_0^2} dr \right] \quad (5b)$$

在无定形靶中, 电子阻止本领  $Se(E)$  的表达式为<sup>[6]</sup>

$$Se(E) = Se_1 + Se_2 = \int_{r_{0,\min}}^{\infty} 2\pi r_0 \mathcal{E}_{\text{tot}}(r_0) dr_0 \quad (6)$$

这里  $r_{0,\min}$  是近碰撞的最小距离, 其计算方法可参阅文献 [6], 而  $\mathcal{E}_{\text{tot}} = \sum_{ii'} \mathcal{E}_{ii'}$ , 在单元素靶中  $\mathcal{E}_{\text{tot}} = \mathcal{E}_{ii'}$ , 由 (5b) 式代入 (6) 式, 用文献 [6] 所示方法积分可得

$$Se_1 = \frac{2\pi^2 m v}{\alpha} \sum_{n,l} \sum_{i=n+1}^{2n} \omega_{nl} \bar{u}_{nl} \frac{a_{i-1}}{2 \times 10^n} \mu_{nl}^{i-1} r_{0,\min}^2 K_{i+1}(\mu_{nl}) \quad (7a)$$

这里  $Se_1$  表示靶原子的电子阻止本领部分; 离子部分  $Se_2$  的表示式与上式完全一样, 只需用  $\beta$  代替  $\alpha$ , 并代入离子的各轨道参数即可. 这里  $\mu_{nl} = \alpha r_{0,\min} \xi_{nl}$ ,  $\xi_{nl}$  为 Slater 参

需数<sup>[8]</sup>;而  $K_i(\mu_{nl})$  是第  $i$  壳层的第二类修正的 Bessel 函数,即

$$K_i(\mu_{nl}) = \sqrt{\frac{\pi}{2\mu_{nl}}} e^{-\mu_{nl}} \left( 1 + \sum_{k=1}^{i+1} \frac{(n-k)!}{(n+k)!k!(2\mu_{nl})^k} \right)$$

当  $Z_1$  较大时或注入角较大时,可近似取  $r_{0,\min} \rightarrow 0$ , 则

$$Se_1 = \frac{2\pi^2 m v}{\alpha^3} \sum_{nl} \sum_{i=n+1}^{2n} \omega_{nl} \bar{u}_{nl} \frac{a_{i-1} i! 2^i}{2 \cdot 10^n \xi_{i,nl}^2} \quad (7b)$$

$Se_2$  的表示式可以同样处理。

当注入速度相当高时 ( $E(\text{MeV}/\text{amu}) \geq 0.1$ ), Burenkov<sup>[9]</sup> 认为 (1) 式中电子流  $\varphi$  以一定有效动量  $\Delta P (\approx m v)$  流向另一原子,从而得出

$$Se_1 = \frac{2\pi^2 m v}{\alpha} \left[ \sum_{nl} \sum_{i=n+1}^{2n} \frac{\overline{\Delta P_{nl}^{\text{sum}}}}{\bar{u}_{nl}^{\text{sum}}} \bar{u}_{r,nl} \frac{a_{i-1}}{2 \cdot 10^n} \mu_{nl}^{i-1} r_{0,\min}^2 K_{i+1}(\mu_{nl}) \right] \quad (8a)$$

当  $Z_1$  较大或注入角度较大时,  $r_{0,\min} \rightarrow 0$ , 则

$$Se_1 = \frac{2\pi^2 m v}{\alpha^3} \sum_{nl} \sum_{i=n+1}^{2n} \frac{\overline{\Delta P_{nl}^{\text{sum}}}}{\bar{u}_{nl}^{\text{sum}}} \bar{u}_{r,nl} \frac{a_{i-1} i! 2^i}{2 \times 10^n \cdot \xi_{i,nl}^2} \quad (8b)$$

$Se_2$  的表示式可作同样处理。(8a) 和 (8b) 式中  $\bar{u}_{nl}^{\text{sum}}$  为总的平均电子速度,

$$\bar{u}_{nl}^{\text{sum}} = \sqrt{v^2 + \bar{u}_{r,nl}^2} \quad (9a)$$

$\bar{u}_{r,nl}$  为径向平均速度(考虑电子转动的贡献),

$$\bar{u}_{r,nl} = \sqrt{\bar{u}_{nl}^2 - l(l+1)(r_{nl}^{-1})^2} \quad (9b)$$

这里  $r_{nl}^{-1}$  为核间距的倒数,可从文献 [10] 中查到;  $\overline{\Delta P_{nl}^{\text{sum}}}$  为第  $nl$  壳层的电子所转移的平均动量(若设  $j = nl$ ,  $j' = n'l'$ ),

$$\overline{\Delta P_{ij}^{\text{sum}}} = \frac{1}{N_s} \sum_{j'} \omega_{j'} \overline{\Delta P_{ij'}} \quad (9c)$$

这里  $N_s$  是计算  $Se_1$  时相应离子中的电子总数,对于  $\overline{\Delta P_{ij'}}$  的计算,根据文献 [9] 中的图 2, 可得如下关系(设  $y = \bar{u}_{j'}/\bar{u}_i$ ),

$$\overline{\Delta P_{ij'}} = \begin{cases} \bar{u}_i \left[ 4.023 - \frac{18.161}{4.101 + y} \right], & \bar{u}_i \geq \bar{u}_{j'} \\ \bar{u}_i [1.085 y^{-0.301} \cdot \exp(-0.2364 y)], & \bar{u}_i < \bar{u}_{j'} \end{cases} \quad (9d)$$

对分子靶(如  $AB$  分子)来说,应该用分子波函数代替 (5b) 式中的原子波函数  $\phi_A$  (或  $\phi_B$ ), 应用分子轨道法原理

$$\phi_{AB} = N_{AB}(\phi_A + \lambda_{AB}\phi_B) \quad (10)$$

其中归一化因子  $N_{AB}^2 = \Delta/\lambda_{AB}^2$ ; 而  $\lambda_{AB}$  与分子离子性  $\Delta$  有如下关系

$$\left( \frac{1}{\Delta} - 1 \right) \lambda_{AB}^2 - 2\lambda_{AB} S_{AB} - 1 = 0$$

这里  $S_{AB}$  为分子的约化重叠积分,计算方法可参阅文献 [11],  $\Delta$  的计算参阅文献 [12]. 一般分子靶的分子量较大,入射角也较大,  $r_{0,\min}$  可取为零, (10) 式代入 (5b) 式和 (6) 式,用类同于文献 [6] 的方法进行积分可得

$$\left. \begin{aligned} Se_1 &= \frac{2\pi^2 m v}{\alpha_A^3} N_{AB}^2 \sum_{n_A l_A} \sum_{i=n_A+1}^{2n_A} \omega_{n_A l_A} \bar{u}_{n_A l_A} \frac{a_{i-1} \cdot 2^i \cdot i!}{2 \times 10^{n_A} \cdot \xi_{i, n_A l_A}^2} \\ Se_2 &= \frac{2\pi^2 m v}{\alpha_B^3} \lambda_{AB}^2 N_{AB}^2 \sum_{n_B l_B} \sum_{i=n_B+1}^{2n_B} \omega_{n_B l_B} \bar{u}_{n_B l_B} \frac{a_{i-1} \cdot 2^i \cdot i!}{2 \times 10^{n_B} \cdot \xi_{i, n_B l_B}^2} \\ Se_3 &= \frac{4\pi^2 m v}{\alpha_{AB}^3} \lambda_{AB} N_{AB}^2 \sum_{n l} \sum_{i=n+1}^{2n} \omega_{n l} \bar{u}_{n l} \frac{a_{i-1} \cdot 2^i \cdot i!}{2 \cdot 10^n \xi_{i, n_A l_A} \cdot \xi_{i, n_B l_B}} \\ Se_4 &= \frac{2\pi^2 m v}{\beta^3} \sum_{n' l'} \sum_{i=n'+1}^{2n'} \omega_{n' l'} \bar{u}_{n' l'} \frac{a_{i-1} \cdot 2^i \cdot i!}{2 \cdot 10^{n'} \xi_{i, n' l'}^2} \end{aligned} \right\} \quad (11a)$$

而

$$Se_{AB}(E) = Se_1 + Se_2 + Se_3 + Se_4 \quad (11b)$$

这里要指出的是, 对于分子靶, 令  $\omega_{nl} = \omega_{n_A l_A}^{1/2} \cdot \omega_{n_B l_B}^{1/2}$ ,  $\bar{u}_{nl} = \bar{u}_{n_A l_A}^{1/2} \cdot \bar{u}_{n_B l_B}^{1/2}$  和  $\alpha_{AB} = \alpha_A^{1/2} \cdot \alpha_B^{1/2}$ , 在以后的计算中导致的误差并不大, 但给计算却带来很大的方便. 而  $n = n_A + n_B$ ,  $l = l_A + l_B$ . (11a) 式中各式, 当注入能量相当高时, 应取 (8a) 式或 (8b) 式的形式, 当  $r_{0, \min}$  不趋于零时, 则应取 (7a) 式的形式.

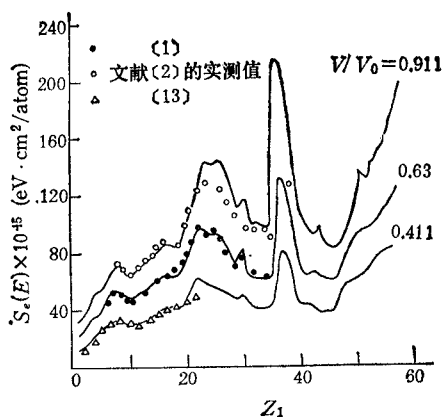
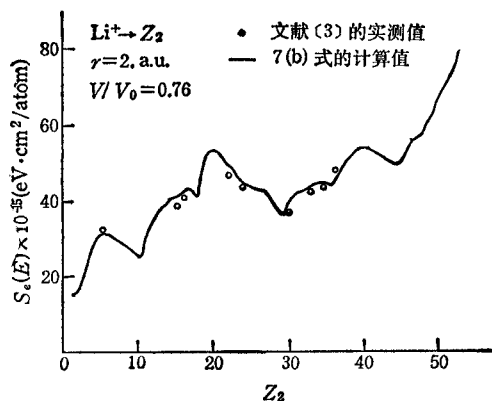
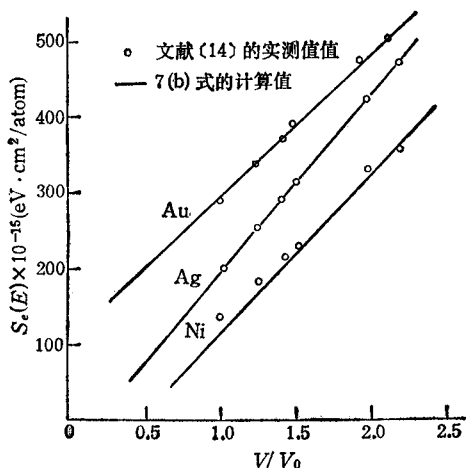
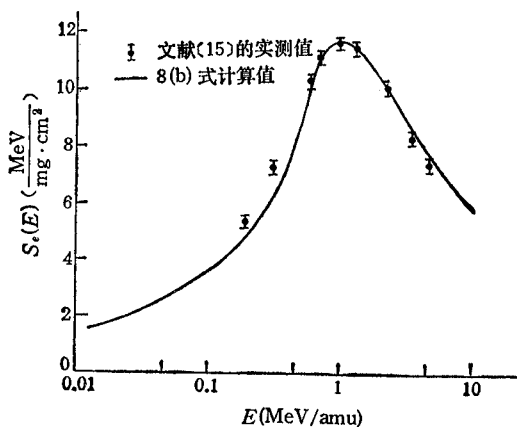
### 三、结果和讨论

根据上面的推导, 可归纳为五种情况: (1) 注入能量较低,  $r_{0, \min}$  不趋于零时, 可用 (7a) 式来计算. (2) 注入能量较低,  $r_{0, \min}$  趋于零时, 可用 (7b) 式来计算. (3) 注入能量较高,  $r_{0, \min}$  不趋于零时, 可采用 (8a) 式来计算. (4) 注入能量较高,  $r_{0, \min}$  趋于零时, 可采用 (8b) 式来计算. (5) 对于分子靶, 一般情况下可用 (11a) 和 (11b) 式来计算. 我们根据上述公式, 编成统一的计算程序, 分别对五种情况进行了计算, 并与文献给出的实测值进行了比较.

图 2 是比较三种注入能量下, 各种  $Z_1$  离子注入 C 靶时  $Se(E)$  随  $Z_1$  振荡的变化, 计算时,  $r_{0, \min}$  取 1 a.u., 且用 (7a) 式计算, 实测结果分别取自文献 [1]、[2] 和 [13]. 由图可见, 计算值与实测值很大部份符合较好, 证实了 (7a) 式是足够准确的. 这说明由原子结构的周期性变化引起的  $Se(E)$  的  $Z$  振荡是确实存在的. 在三种不同能量下, 三条振荡曲线的趋势完全一致. 只不过注入能量越高, 振荡幅度越大. 这说明这种振荡的规律似乎与能量的关系不大, 而只与原子的结构有关.

图 3 是  $Li^+$  注入各种靶的  $Z_2$  振荡的实测值与计算值的比较, 计算仍采用 (7a) 式,  $r_{0, \min}$  取 2 a.u. 由图可见, 两者仍符合, 说明  $Z_2$  振荡的原因也是离子结构的周期性变化的结果. (7a) 式对  $Z_1$  振荡和  $Z_2$  振荡均适用.

图 4 示出了  $O^+$  注入 Au, Ag 和 Ni 靶中  $V/V_0$  与  $Se(E)$  的关系. 由于靶 Au, Ag 的原子质量较大, 取  $r_{0, \min}$  为零是合理的. 计算值与实验值符合得甚好. 但 Ni 靶比 Ag, Au 靶的原子质量小, 因此在低能端, 计算值与实测值有一定的偏离, 高能端才较符合. (7b) 式的计算值与文献 [14] 列出的  $O^+ \rightarrow C, Al$  靶的实验数据相差甚大, 这说明对于

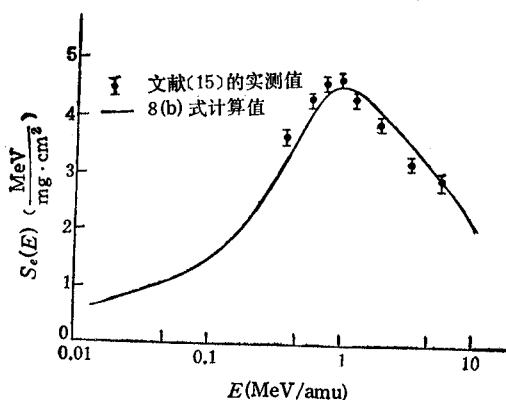
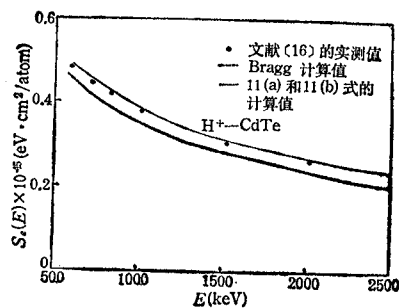
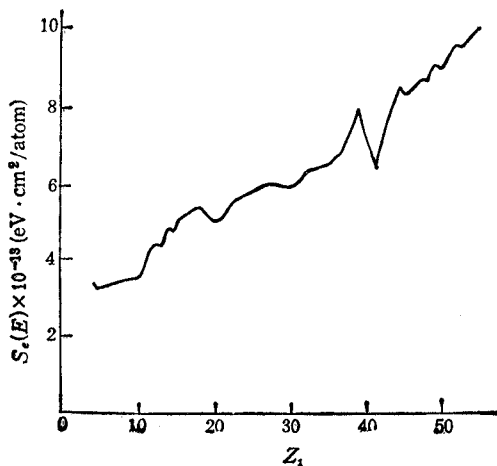
图 2  $Z^+ \rightarrow C$  靶中  $Z_1$  振荡的计算值与实测值的比较图 3  $Li^+ \rightarrow Z_2$  靶中  $Z_2$  振荡的计算值与实测值的比较图 4  $O^+$  注入 Au, Ag 和 Ni 靶中  $V/V_0$  与  $Se(E)$  的关系图 5  $S^+ \rightarrow Ni$  靶中  $Se(E)$  的实测值与计算值的比较

原子质量较小的靶 (7b) 式是不适合的, 用 (7a) 式才较适合。

图 5 示出了  $S^+ \rightarrow Ni$  靶中实测值与计算值比较。由图可见, 计算值与实测值比较符合, 这说明注入能量高达十几至几十 MeV, 且靶原子质量又不太大时, (8a) 式是适用的; 也说明文献 [9] 提出的考虑动量概念是正确的。而应用 (8a) 式能大大扩展计算原子结构对  $Se(E)$  影响的能量范围, 可扩展至几十 MeV。

图 6 示出了  $F^+ \rightarrow Ag$  靶中  $Se(E)$  的实测值与计算值的比较。由于 Ag 靶的原子质量较大, 采用 (8b) 式来计算。计算值与实测值<sup>[15]</sup>是较符合。这说明 (8b) 式适于靶原子质量较大, 注入能量又足够高的情况, 并进一步说明文献 [9] 提出的模型是正确的。

应用 (11a) 和 (11b) 式, 算出了  $He^+ \rightarrow CdTe$  系统的  $Se_{AB}(E)$  值并与文献 [6] 的实测值作了比较, 结果示于图 7。由图可见, 用 (11a) 和 (11b) 式, 计算值与实测值符合较好, 而 Bragg 值 (即不考虑化学键影响, 而只是将 AB 分子中 A, B 原子的  $Se(E)$  值简单相加) 与实测值有明显的偏离, 这表明用分子轨道法来解决分子靶的  $Se_{AB}(E)$  的计算是成功的。

图6  $F^+ \rightarrow Ag$  靶中  $Se(E)$  的实测值与计算值的比较图7  $H^+ \rightarrow CdTe$  系统的实测值与计算值的比较图8  $Z_1^+$  注入 CdS 靶中  $Z_1(E)$ 

我们还用(11a)和(11b)式对  $Z_1^+$  注入 CdS 靶的  $Se_{AB}(E)$  的  $Z_1$  振荡进行了计算, 结果示于图8。由图可见, 对于化合物靶,  $Se_{AB}(E)$  也存在  $Z$  振荡, 只是其幅度较单元素靶的小, 但基本趋势仍是逐渐上升的。这可能是由于分子靶一般质量较大, 且不仅受原子结构的影响, 而且还受分子结构的影响的缘故。这些因素的综合影响, 可能降低了  $Z$  振荡的幅度, 但由于分子结构的复杂性, 真实情况还有待进一步研究。

综上所述, 应用上述一系列公式, 不仅能研究低注入能量下, 轻靶或重靶中  $Se(E)$  的  $Z$  振荡, 而且能研究注入高能量时, 轻靶或重靶中的  $Se(E)$  的  $Z$  振荡。用分子轨道法来处理分子靶, 也能研究分子靶中  $Se(E)$  的  $Z$  振荡。这无疑是研究离子注入时的电子阻止本领的一种很好方法。它也有利于更好地解决各类靶中射程参数的准确计算。

## 参 考 文 献

- [1] H. Ahmed, et al., *Phys. Rev.*, 173(1968), 454.
- [2] B. Fasturp, et al., *Can. J. Phys.*, 46(1968), 498.
- [3] W. Pietsch, et al., *Nucl. Instr. and Method*, 132(1976), 79.
- [4] 王德宁, 王渭源, 物理学报, 11(1982), 348.

- [ 5 ] D. J. Land, *Nucl. Instr. and Method*, **132**(1976), 69.
- [ 6 ] F. F. Komarov, et al., *Phys. State Solid*, (b), **58**(1973), 389.
- [ 7 ] O. B. Firsov, *Sov. Phys. JETP*, **9**(1959), 1076.
- [ 8 ] E. Clementi, et al., *J. Chem. Phys.*, **47**(1967), 1300.
- [ 9 ] A. F. Burenkov, *Rad. Effect*, **46**(1980), 59.
- [10] C. C. Lu, et al., *Atomic Data*, **3**(1971), 1.
- [11] T. Soma, et al., *Phys. State Solid*, **119**(1983), K41.
- [12] R. S. Mulliken, et al., *J. Chem. Phys.*, **17**(1949), 1248.
- [13] W. Pictsch, et al., *Nucl. Instr. and Method*, **132**(1976), 83.
- [14] D. L. Porat, et al., *Proc. Phys. Soc.*, **77**(1961), 97.
- [15] J. S. Foster, et al., *Nucl. Instr. and Method*, **136**(1976), 349.
- [16] R. A. Langley, et al., *Nucl. Instr. and Method*, **132**(1976), 109.

## THE EFFECT OF THE ATOMIC OR MOLECULAR STRUCTURE ON Z-OSCILLATION OF ELECTRON-STOPPING POWER

Wang Dening    Wang Weiyuan

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica, Shanghai)

**ABSTRACT**    Based on Firsov theory (1959), the concept of the Slater wave function etc. is introduced, then the equation of the effect of atomic structure on Z-oscillation of  $Se(E)$  is derived. And by using the molecular orbital theory, the equation of the effect of the molecular structure on Z oscillation of  $Se(E)$  is obtained. These obtained equations are suitable for light or heavy element target not only in the lower energy range (10—1000 keV), but also at the higher energy.

The results calculated with these equations for  $Z_1^+ \rightarrow C$  and  $Li^+ \rightarrow Z_2$  in the lower energy range,  $S^+ \rightarrow Ni$  and  $F^+ \rightarrow Ag$  in the higher energy range, and  $H^+ - CdTe$  all are in good agreement with the experimental ones given in the literatures.

**KEY WORDS**    Z oscillation; Electron-stopping; Atomic and molecular structure.