

Kr 原子 4s 自电离区和 3d 内壳层光学振子强度研究^y

苑震生¹, 朱林繁¹, 刘小井¹, 钟志萍², 李文斌¹, 成华东¹, 徐克尊¹

(1 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;

2 中国科学院研究生院物理部, 北京 100039)

摘要: 用高分辨快电子能量损失谱方法研究了 Kr 原子 4s 内价壳层自电离区的光学振子强度, 说明了以前几家实验存在差异的原因, 并首次得到了 3d 内壳层激发的绝对光学振子强度.

关键词: Kr 原子; 4s 自电离区; 3d 内壳层; 光学振子强度

中图分类号: O561.5 文献标识码: J

1 引言

原子分子的绝对光吸收截面是重要的物理数据, 可由此得到原子分子之间的 Van der Waals 相互作用强度、样品的旋光特性^[1]、原子分子极化率^[2,3]、原子分子中电子之间的关联相互作用强度^[4]等多方面的物理信息, 能够应用在辐致分解、等离子体物理、天体物理、生物物理等各个领域, 并且可以用来定量地检验理论方法和模型的可靠性^[5]. 得到光学振子强度的方法有很多种, 例如 Beer-Lambert 光吸收方法、双电离室方法、电子碰撞方法等^[5].

对 Kr 原子的 4s 内价壳层激发的光学截面有 Chan 等^[5]的电子碰撞方法、Samson^[6]的双电离室方法、Codling 等^[7]的同步辐射光吸收方法和 Flemming 等^[8]的同步辐射光电子产额谱方法研究的实验. 目前存在的问题主要有两个: (1) 据我们所知, 还没有文献准确地标识 25 eV 处的 3 个光学跃迁; (2) 电子碰撞方法和双电离室方法以及其它几种光学方法在 25 eV 处的峰结构上存在差异, 即相对光学方法而言, 以前的电子碰撞方法在谱线中缺失了几个峰结构. 在当前实验条件下, 本文将明确地澄清第(2)个问题. 而对于 Kr 原子 3d 内壳层的研究, 最早 King^[9]使用电子能量损失谱方法得到了 3d 电子激发的能级, 并获得了几个跃迁的振子强度密度比; 此后, Sairanen 等^[10]使用同步辐射方法测量了相同能区的更精细的光电子产额谱. 本工作首次得到了

3d 电子激发的绝对光学振子强度谱.

实验中所使用的电子能量损失谱装置和实验方法已经在文献[11, 12]中做了介绍. 本工作的实验条件: 入射电子能量为 2.5 keV, 能量分辨为 70—90 meV, 在 0°角测量(光学近似). 测得的能损谱先经过 Bethe-Born 转换得到相对光学振子强度密度谱, 再使用文献[13]给出的连续区数据进行单点标定, 从而得到绝对的光学振子强度密度谱. 所得实验谱线的总误差小于 7%.

2 结果和讨论

图 1(a) 给出的是 Samson^[6]使用双电离室方法得到的光学振子强度密度, 可以看到在 24.7 eV 处有一个谷, 此谷也就是 Chan 等^[5]提到的使用电子碰撞方法没有测到的 Q 峰, 而这一点是值得怀疑的: 因为光学方法可以测到的谱结构, 电子碰撞方法在光学近似下同样应该测到. 而文献[7]和文献[8]分别使用同步辐射吸收和同步辐射光电子产额谱方法测到了 24.7 eV 处很陡的谷. 为了找到不同方法中存在差异的原因, 我们使用电子能量损失谱方法测量了这段能区的光吸收谱(如图 1(b) 实心点所示). 可以看到在 24.7 和 25.2 eV 处分别有一个浅浅的凹陷, 这既与 Samson 的结果不同也和 Chan 等^[5]的光吸收曲线有区别. 把 Flemming 等^[8]的高分辨光电子产额谱(图 1(b) 中右小框内)卷积我们的谱仪函数(图 1(b) 中左小框内所示 $FWHM = 70$ meV 的高斯峰形), 得到图 1(b) 中的虚线, 由于绝对标定取自不同的数据, 因而在绝对值上与我

^y 收稿日期: 2002 - 02 - 28; 修改日期: 2002 - 05 - 29

* 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: 苑震生(1976-), 男(汉族), 河北保定人, 博士研究生, 从事原子分子物理研究.

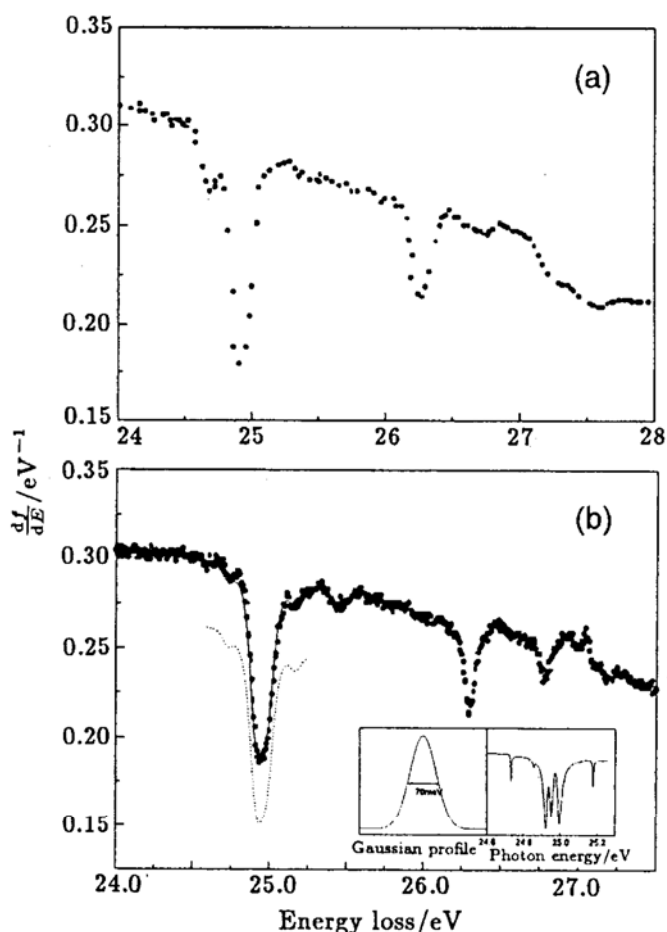


图 1 24—28 eV 光学振子强度密度
(a) Samson^[6]双电离室方法; (b) 电子能量损失谱方法. 详细说明见正文.

们的结果有些区别, 当把该虚线向上平移之后, 发现与我们的测量结果符合很好. 也可以由图 1(b) 中两个小图所示的卷积过程看出, 24.7 eV 的很陡的谷在卷积之后变成了一个很浅的凹陷, 即如果分辨变差, 一些谷就变得不明显, 这就需要很高的事例数才能避免这个浅凹陷淹没在统计涨落中; 同理在 25.2 eV 处的凹陷是缘于文献[8]中所示的谷 6. 我们猜测统计涨落过大是 Chan 等^[5]没有测到 24.7 eV 处浅凹陷的原因. 而从本工作与 Flemming 等^[8]的结

果符合也说明 Samson^[6]测量的谱线是存在问题的, 在他们的分辨下(约 120 meV), 应该不会测到在 24.7 eV 处的如此明显的谷; 另一方面, 如果 24.7 eV 处有谷, 则在 25.2 eV 处必然应该有一个类似的结构, 但 Samson^[6]的谱线不存在这一结构.

图 2 是我们得到的 3d 电子激发的绝对光学振子强度密度曲线, 经过最小二乘拟合得到的光学振子强度和光学振子强度密度列于表 1. 分立态 n 的光学振子强度密度 df_n/dE 和光学振子强度 f_n 的关系如下^[9]

$$\frac{df_n}{dE} = N^{*3} \cdot f_n, \quad (1)$$

其中 N^{*3} 是态密度, N^* 是有效量子数. 从相对振子强度密度可以看出, 在误差范围内 $3d_{5/2}6p, 7p$ 和 $3d_{3/2}5p$ 的值与 King 等^[9]的结果符合, 而 $3d_{5/2}6p, 7p$ 的值都略低于 King 等^[9]的结果. 由于我们的入射电子能量比 King 等实验中的 1.5 keV 要高, 从而更接近于光学近似, 与他们的结果也就会有差异, 这需要有进一步的光学方法实验来检验这一点; 另外, 解谱时电离截面的扣除方法不同也可能造成差异.

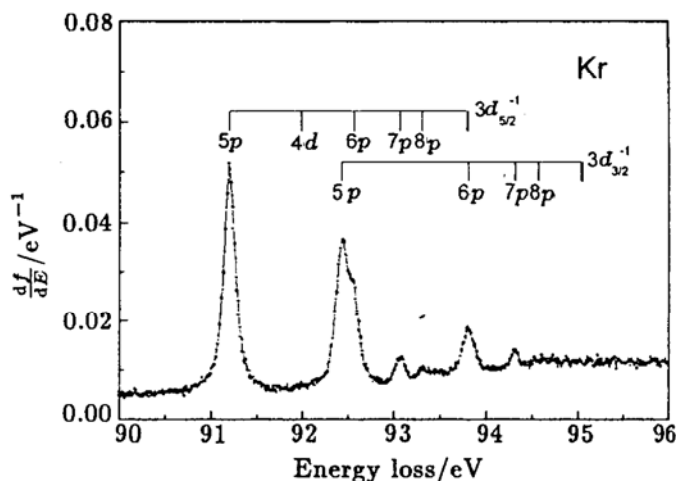


图 2 Kr 的 3d 电子激发光学振子强度密度

表 1 3d 电子激发的光学振子强度密度

标识	能级/eV	有效量子数 N^*	绝对光学振子强度(10^{-3})		相对光学振子强度密度	
			本工作	King 等 ^[9]	本工作	King 等 ^[9]
$3d_{5/2}^{-1}$	5p	91.200	2.293	9.98(0.77)	1.0	1.0
	6p	92.560	3.330	3.84(0.34)	1.18	1.16(4)
	7p	93.063	4.342	1.49(0.14)	1.01	0.84(6)
	8p	93.301	5.348			1.06(45)
$3d_{3/2}^{-1}$	5p	92.425	2.282	5.90(0.18)	0.58	0.62(1)
	6p	93.809	3.319	1.43(0.03)	0.43	0.71(4)
	7p	94.319	4.311	0.60(0.03)	0.40	0.61(7)
	8p	94.567	5.337			0.45(18)

参 考 文 献:

- [1] Onley T N, Cann N M, Cooper G, *et al.* Absolute Scale Determination for Photoabsorption Spectra and the Calculation of Molecular Properties Using Dipole Sum-rules[J]. *Chem Phys*, 1997, **223**: 59.
- [2] Fano U, Cooper J W. Spectral Distribution of Atomic Oscillator Strength[J]. *Rev Mod Phys*, 1968, **40**: 441.
- [3] Inokuti M. Inelastic Collisions of Fast Charged Particles with Atom and Molecules—the Bethe Theory Revisited[J]. *Rev Mod Phys*, 1971, **43**: 297.
- [4] Takahashi M, Watanabe N, Wada Y, *et al.* Bethe Surfaces and X-ray Incoherent Scattering Factor for H₂O Studied by Electron Energy Loss Spectroscopy[J]. *J Elect Spect Relat Phen*, 2000, **112**: 107.
- [5] Chan W F, Cooper 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**: 149.
- [6] Samson J A R. Observed and Predicted New Autoionized Energy Levels in Krypton, Argon, and Xenon[J]. *Phys Rev*, 1963, **132**: 2 122.
- [7] Codling K, Madden R P. The Absorption Spectra of Krypton and Xenon in the Wavelength Range 330—600 Å [J]. *J Res Natl Bur Stand*, 1972, **A76A**: 1.
- [8] Flemming M G, Wu J Z, Caldwell C D, *et al.* Partial Cross Sections and Photoelectron Angular Distributions in the Region of 4s → 5p and 5s → 6p Resonances in Krypton and Xenon[J]. *Phys Rev*, 1991, **A44**: 1 733.
- [9] King G C, Tronc M, Read F H, *et al.* An Investigation of the Structure Near the L_{2,3} Edges of Argon, the M_{4,5} Edges of Krypton and the N_{4,5} Edges of Xenon, Using Electron Impact with High Resolution [J]. *J Phys*, 1977, **B10**: 2 479.
- [10] Sairanen O P, Kivimäki A, Nommiste E, *et al.* High-resolution Pre-edge Structure in the Inner-shell Ionization Threshold Region of Rare Gases Xe, Kr, and Ar[J]. *Phys Rev*, 1996, **A54**: 2 834.
- [11] Xu K Z, Feng R F, Wu S L, *et al.* Absolute Generalized Oscillator Strengths of 2¹s and 2¹p Excitations of Helium Measured by Angle-resolved Electron energy-loss Spectroscopy[J]. *Phys Rev*, 1996, **A53**: 3 081.
- [12] 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 II. *Rev Sci Instrum*. 2001. **72**: 3 357.
- [13] Samson J A R, Yin L F. Precision Measurements of Photoabsorption Cross Sections of Ar, Kr, Xe, and Selected Molecules at 58. 4, 73. 6, and 64. 4 nm[J]. *J Opt Soc Am*, 1989, **B6**: 2 326.

Study on Optical Oscillator Strengths of Krypton in 4s Autoionization Energy Region and 3d Inner-shell Excitations*

YUAN Zhen-sheng¹, ZHU Lir-fan¹, LIU Xiaojing¹,

ZHONG Zhir-ping², LI Wen-bin¹, CHENG Hua-dong¹, XU Ke-zun¹

(1 Key Laboratory of Bond Selective Chemistry, Department of Modern Physics,

University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China;

2 Department of Physics, Graduate School of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

Abstract: Optical oscillator strengths of Krypton in the 4s autoionization energy region are obtained by using a high resolution fast electron energy loss spectrometer. Some discrepancies among previous papers are discussed. In addition, absolute optical oscillator strengths for the 3d inner-shell excitations are measured for the first time.

Key words: Krypton atom; 4s autoionization; 3d inner shell; optical oscillator strength

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