

基于狭义相对论转动质量效应的 X-ray 光谱分析

余志强, 谢泉*, 肖清泉

贵州大学理学院, 贵州大学新型光电子材料与技术研究所, 贵州 贵阳 550025

摘要 基于狭义相对论的基本观点, 研究了特征 X-ray 的产生机理, 分析了在狭义相对论下转动质量效应对 X-ray 光谱的影响, 导出了一个计算 X-ray 特征波长的公式, 同时对计算推导的特征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相比是非常的接近的, 并且随着原子序数的增加, 转动质量效应对特征波长的影响越来越明显, 研究结果在实际应用中分析特征 X-ray 光谱具有一定的参考意义。

关键词 狭义相对论; 特征 X-ray; 转动质量效应; 光谱

中图分类号: O434.1 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2010)04-1136-05

引言

X-ray 是 1895 年伦琴发现的, 它是一种波长很短的电磁波, 波长范围是 $0.001 \sim 10$ nm, 因此它具有非常强的穿透力。1912 年德国物理学家劳厄发现 X-ray 通过晶体时产生衍射现象, 证明了 X-ray 的波动性。X-ray 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-ray 的波长时, 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转动质量效应对 X-ray 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-ray^[2,3]的辐射机理, 分析了在狭义相对论下转动质量效应对 X-ray 光谱的影响, 得到了一个基于狭义相对论原理计算 X-ray 特征波长的公式, 并且通过理论计算得到了在转动质量效应下常见元素的 X-ray 特征波长值, 对研究和分析特征 X-ray 光谱具有一定的参考意义。

1 X-ray 光谱形成的基本原理

X-ray 光谱通常由连续谱和特征谱组成。对于 X-ray 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, 因此就辐射出不同频率的光子而形成连续谱 X-ray。在 X-ray 谱中, 其特征谱是与阳极靶的组成元素紧密相关的, 特征 X-ray 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。

特征谱和可见光谱一样, 是由原子内部电子做能级跃迁辐射一定频率光子的结果。但是由于 X-ray 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说明。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特征 X-ray。

通常把电子由 L 层跃迁填充 K 层空穴时所产生的特征 X-ray 称为 k_{α} 辐射, 同理还有 k_{β} 辐射、 k_{γ} 辐射。不过由于离原子核越远的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 X-ray 光谱分析中, 通常主要采用的是 k_{α} 辐射, 在忽略电子自旋对电子运动状态影响的情况下, 它近似一束单色的特征 X-ray。

根据爱因斯坦光子能量公式^[5] $E = 2\pi\hbar f$, 只要能够知道

收稿日期: 2009-05-05, 修订日期: 2009-08-06

基金项目: 国家自然科学基金项目(60766002), 科技部国际合作专项项目(2008DFA52210), 贵州省信息产业厅项目(0831)和贵阳市科学技术计划项目([2008]15-3)资助

作者简介: 余志强, 1984 年生, 贵州大学理学院硕士研究生 e-mail: y_zq2008@yahoo. cn

* 通讯联系人 e-mail: qxie@gzu. edu. cn

特征 X-ray 的波长就可以间接的确定靶的组成元素, 实现对靶的测定和分析。以及通过已知的 X-ray 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^[6]。

2 狭义相对论转动质量效应

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。

相对性原理的假设: 物理规律对所有惯性系都是一样的, 不存在任何一个特殊的惯性系。

光速不变原理的假设: 在任何惯性系中, 光在真空中的速率都相等。

基于上述相对论的基本假设, 在洛伦兹变换^[7]的基础上, 可以得到在相对论中运动物体的转动质量与速率的关系

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

其中: μ 为物体的相对论质量, μ_0 为物体的静质量, v 为物体的速率, 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 量子化条件进行分析。

3 狭义相对论下转动质量效应对 X-ray 光谱的影响

研究狭义相对论中转动质量效应对 X-ray 光谱的影响, 其基本理论原理就是通过爱因斯坦狭义相对论转动质量效应的基本原理, 在经典量子理论的基础上, 研究特征 X-ray 的辐射机理, 分析狭义相对论的转动质量效应对 X-ray 特征波长的影响。

特征 X-ray 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。通过较外层的电子跃迁填充就会辐射出能量光子, 本文所研究的主要是在狭义相对论中转动质量效应对特征 X-ray 的 k_α 辐射波长的影响。

在忽略电子自旋^[8]对电子运动状态影响的情况下(即忽略电子自旋轨道耦合能量微扰的情况下), 对于原子序数为 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, 其屏蔽常数^[9] σ_1 约为 1, 对其中一个电子, 另一个电子相当于受到核电荷数为 $z-1$ 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 层内的电子主要受到 K 层电子的库仑屏蔽作用, 其屏蔽常数 σ_2 约为 1, L 层电子相当于受到核电荷数为 $z-1$ 的库仑场作用。

根据经典量子理论, 在忽略电子自旋对电子运动状态影响的情况下, 原子核外电子是分层排布的, 它们在一定的轨道上绕核作圆周运动, 其量子化分布服从 Bohr-Sommerfeld 量子化条件^[10]。

根据 Bohr-Sommerfeld 量子化条件

$$\oint p dq = nh$$

化简得

$$\mu_n v_n r_n = nh \quad (2)$$

其中: μ_n 为第 n 层电子的质量, v_n 为第 n 层电子的速率, r_n 为第 n 层电子的轨道半径, h 为狄拉克常数。

绕核圆周运动的电子服从库仑运动的条件

$$\frac{(z - \sigma_n) e^2}{4\pi\epsilon r_n^2} = \frac{\mu_n v_n^2}{r_n}$$

化简得

$$\mu_n r_n v_n^2 = \frac{(z - \sigma_n) e^2}{4\pi\epsilon} \quad (3)$$

其中: z 为原子序数, σ_n 为第 n 层电子的屏蔽常数, e 为电子电量, r_n 为第 n 层电子的轨道半径, ϵ 为真空介电常数。

根据(2)和(3)式, 可得第 n 层电子的速率

$$v_n = \frac{(z - \sigma_n) e^2}{4\pi n \hbar} \quad (4)$$

第 n 层电子的轨道半径

$$r_n = \frac{4\pi n^2 \hbar^2}{(z - \sigma_n) \mu_n e^2} \quad (5)$$

第 n 层电子的总能量 E_n 为其动能 E_k 与势能 E_p 的总和

$$E_n = E_k + E_p$$

$$E_n = \frac{1}{2} \mu_n v_n^2 - \frac{(z - \sigma_n) e^2}{4\pi\epsilon r_n} \quad (6)$$

将(4)和(5)式代入(6)式, 化简得

$$E_n = -\frac{\mu_n (z - \sigma_n)^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (7)$$

特征 X-ray 的 k_α 辐射是由原子 L 层($n=2$)电子跃迁填充 K 层($n=1$)空穴时的辐射光子结果, 跃迁填充过程中辐射光子的能量为如下的形式

$$\nabla E = E_2 - E_1 \quad (8)$$

根据光子能量公式 $E = 2\pi\hbar f$ 和光子速度公式 $c = \lambda f$, 可得辐射光子的波长为

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{E_2 - E_1} \quad (9)$$

将(7)式代入(9)式, 于是特征 X-ray 的波长公式可表示为如下的形式

$$\lambda = \frac{64\pi^3 \hbar^3 \epsilon^2 c}{[\mu_1 (z - \sigma_1)^2 - 0.25\mu_2 (z - \sigma_2)^2] e^4} \quad (10)$$

根据狭义相对论, 由(1)和(4)式可得第 n 层电子的相对论质量为

$$\mu_n = \frac{\mu_0}{\sqrt{1 - \frac{v_n^2}{c^2}}} \quad (11)$$

由于 $\frac{v_n^2}{c^2} \ll 1$, 根据泰勒级数, 则:

$$\mu_n = \frac{\mu_0}{\sqrt{1 - \frac{v_n^2}{c^2}}} \approx \mu_0 \left(1 + \frac{v_n^2}{2c^2} \right) \quad (12)$$

将(4)式代入(12)式, 则 K 层($n=1$)电子的相对论质量为

$$\mu_1 = \frac{\mu_0}{\sqrt{1 - \frac{v_1^2}{c^2}}} \approx \mu_0 \left[1 + \frac{(z - \sigma_1)^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2 c^2} \right] \quad (13)$$

则 L 层($n=2$)电子的相对论质量为

$$\mu_2 = \frac{\mu_0}{\sqrt{1 - \frac{v_2^2}{c^2}}} \approx \mu_0 \left[1 + \frac{(z - \sigma_2)^2 e^4}{128\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2 c^2} \right] \quad (14)$$

将(13)和(14)式代入(10)式化简, 于是在狭义相对论中元素 k_α 辐射的波长公式可简化为如下(15)式的形式

$$\lambda = \frac{64\pi^3 \hbar^3 \epsilon^2 c}{\mu_0 e^4} \left[(z - \sigma_1)^2 - \frac{(z - \sigma_2)^2}{4} + \frac{(z - \sigma_1)^4 e^4}{32\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2 c^2} - \frac{(z - \sigma_2)^4 e^4}{512\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2 c^2} \right]^{-1} \quad (15)$$

其中: 圆周率 $\pi=3.1415$, 电子屏蔽常数 $\sigma_1=\sigma_2=1$, 电子静质量 $\mu_0=9.11 \times 10^{-31}$ kg, 真空介电常数 $\epsilon=8.85 \times 10^{-12}$ F·

m^{-1} , 狄拉克常数 $\hbar=1.05 \times 10^{-34}$ J·s, 光速 $c=3.00 \times 10^8$ $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$, 电子电量 $e=1.60 \times 10^{-19}$ C。

从上式可以看出特征 X-ray 的 k_α 辐射波长 λ 是关于原子序数 z 的函数。

4 结果与讨论

根据(15)式推导的特征 X-ray 波长公式, 可以从理论上计算出 Mg, Al, Ca, Si 等元素的 k_α 辐射波长值, 将计算的各波长分别与参考文献[11]的实验波长相比较, 如表 1 所示。

Table 1 Comparison of characteristic wavelength between experimental and calculation

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	11.910 1	12.005 2	0.79	Sb	51	0.471 8	0.444 7	5.74
Mg	12	9.890 0	9.914 7	0.25	Te	52	0.452 8	0.426 1	5.89
Al	13	8.340 1	8.324 8	0.18	I	53	0.434 8	0.408 6	6.02
Si	14	7.126 3	7.087 4	0.54	Xe	54	0.417 9	0.392 1	6.18
P	15	6.158 0	6.105 6	0.85	Cs	55	0.401 8	0.376 4	6.31
S	16	5.373 1	5.313 6	1.10	Ba	56	0.386 6	0.361 7	6.44
Cl	17	4.728 8	4.665 3	1.34	La	57	0.372 3	0.347 7	6.60
Ar	18	4.192 8	4.128 1	1.54	Ce	58	0.358 6	0.334 5	6.72
K	19	3.742 4	3.677 9	1.72	Pr	59	0.345 7	0.321 9	6.87
Ca	20	3.359 5	3.296 9	1.86	Nd	60	0.333 4	0.310 0	7.01
Sc	21	3.032 0	2.971 7	1.99	Pm	61	0.321 7	0.296 8	7.29
Ti	22	2.749 7	2.691 7	2.10	Sm	62	0.310 6	0.288 0	7.29
V	23	2.504 8	2.449 1	2.22	Eu	63	0.300 0	0.277 7	7.42
Cr	24	2.291 0	2.237 5	2.33	Gd	64	0.289 9	0.268 0	7.55
Mn	25	2.103 1	2.051 8	2.44	Tb	65	0.280 3	0.258 7	7.70
Fe	26	1.937 4	1.887 9	2.55	Dy	66	0.271 1	0.249 8	7.83
Co	27	1.790 3	1.742 5	2.66	Ho	67	0.262 3	0.241 4	7.95
Ni	28	1.659 2	1.611 3	2.78	Er	68	0.253 9	0.233 4	8.08
Cu	29	1.541 8	1.497 2	2.89	Tm	69	0.245 9	0.225 7	8.22
Zn	30	1.436 4	1.393 1	3.01	Yb	70	0.238 2	0.218 3	8.35
Ga	31	1.341 4	1.299 3	3.13	Lu	71	0.230 9	0.211 3	8.50
Ge	32	1.255 4	1.214 5	3.26	Hf	72	0.223 8	0.204 5	8.60
As	33	1.177 2	1.137 4	3.37	Ta	73	0.217 1	0.198 1	8.75
Se	34	1.106 1	1.067 3	3.50	W	74	0.210 6	0.191 9	8.87
Br	35	1.041 1	1.003 3	3.63	Re	75	0.204 4	0.186 0	9.01
Kr	36	0.981 4	0.944 7	3.74	Os	76	0.198 4	0.180 3	9.12
Rb	37	0.926 9	0.890 9	3.88	Ir	77	0.192 7	0.174 8	9.27
Sr	38	0.876 7	0.841 4	4.02	Pt	78	0.187 1	0.169 6	9.35
Y	39	0.830 2	0.795 8	4.14	Au	79	0.181 8	0.164 6	9.47
Zr	40	0.787 3	0.753 7	4.27	Hg	80	0.176 7	0.159 7	9.60
Nb	41	0.747 6	0.714 6	4.40	Tl	81	0.171 8	0.155 1	9.73
Mo	42	0.710 7	0.678 5	4.53	Pb	82	0.167 0	0.150 6	9.81
Tc	43	0.676 5	0.644 9	4.67	Bi	83	0.162 4	0.146 3	9.91
Ru	44	0.644 5	0.613 6	4.79	Po	84	0.158 0	0.142 2	10.02
Rh	45	0.614 7	0.584 4	4.92	At	85	0.153 8	0.138 2	10.16
Pd	46	0.586 9	0.557 2	5.06	Rn	86	0.149 6	0.132 7	10.20
Ag	47	0.560 9	0.531 7	5.20	Fr	87	0.145 6	0.134 3	10.28
Cd	48	0.536 5	0.507 8	5.34	Ra	88	0.141 8	0.127 0	10.40
In	49	0.513 6	0.485 5	5.47	Ac	89	0.138 1	0.123 6	10.50
Sn	50	0.492 1	0.464 5	5.61	Th	90	0.134 5	0.120 2	10.58

分析表1中的两组数据,可以比较得出计算的特征 k_{α} 辐射的各波长值与它们各自所对应的实验波长值相比是非常的接近的,并且随着原子序数的增加,两者间的相对误差先变小后变大,狭义相对论下转动质量效应对特征波长的影响越来越明显。

通过表1中特征X-ray的 k_{α} 辐射波长的实验值和计算值,可得到特征X-ray的 k_{α} 辐射波长的实验值与计算值的比较图,如图1所示。

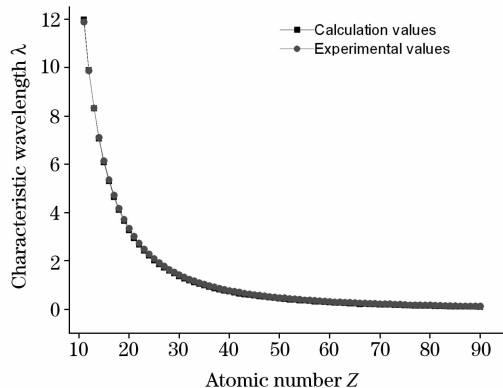


Fig. 1 Characteristic wavelength of experimental and calculation

通过图1所示的特征X-ray的 k_{α} 辐射波长的计算值与实验值的变化规律可以知道,特征X-ray的 k_{α} 辐射波长的计算值与实验值两者之间是非常的接近的,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是一致的。

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-ray的波长 λ ,通过(15)式就可以确定构成靶的各原子的原子序数 z ,从而确定组成靶的各种元素。以及通过已知的晶体掠射角 θ 和特征X-ray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。

5 结论

基于狭义相对论的基本观点,在经典量子理论的基础上,研究了特征X-ray的产生机理,分析了在狭义相对论下转动质量效应对X-ray光谱的影响。结果表明,计算推导的波长值与实验的波长值相比是非常的接近的,并且随着原子序数的增加,转动质量效应对特征波长的影响越来越明显,但是它们之间 k_{α} 的辐射波长的变化规律基本上是一致的,研究结果在实际应用中对分析特征X-ray光谱具有一定的参考意义。

参 考 文 献

- [1] Einstein A. Annalen der Physik, 1905, 17: 891.
- [2] Quarles C, Semaan M. Phys. Rev. A, 1982, 26: 3147.
- [3] Sawhney K J S, Lodha G S, Kataria S K, et al. X-ray Spectrum, 2000, 29: 173.
- [4] Pauli W Z. Physik, 1925, 31: 765.
- [5] Einstein A. Annalen der Physik, 1905, 17: 132.
- [6] LIU Jian-ke(刘建科). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2006, 26(10): 1948.
- [7] Lorentz H A. Proceedings of the Koninklijke Akademie Von Wetenschappen te Amsterdam, 1904, 6: 809.
- [8] Goudsmit S A, Uhlenbeck G E. Naturwissenschaften, 1925, 13: 953.
- [9] Pais A. Inward Bound: Of Matter and Force in the Physical World. New York: Oxford University Press, 1986. 229.
- [10] Ventura I, Marques G C. Physics Letters B, 1976, 64: 43.
- [11] Bearden J A. Rev. Mod. Phys., 1967, 39: 78.
- [12] Bragg W L. Proc. of Cambridge Philosophical Society, 1913, 17: 43.

Study on Spectrum Analysis of X-Ray Based on Rotational Mass Effect in Special Relativity

YU Zhi-qiang, XIE Quan*, XIAO Qing-quan

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

Abstract Based on special relativity, the formation mechanism of characteristic X-ray has been studied, and the influence of rotational mass effect on X-ray spectrum has been given. A calculation formula of the X-ray wavelength based upon special relativity was derived. Error analysis was carried out systematically for the calculation values of characteristic wavelength, and the rules of relative error were obtained. It is shown that the values of the calculation are very close to the experimental values, and the effect of rotational mass effect on the characteristic wavelength becomes more evident as the atomic number increases. The result of the study has some reference meaning for the spectrum analysis of characteristic X-ray in application.

Keywords Special relativity; Characteristic X-ray; Rotational mass effect; Spectrum

(Received May 5, 2009; accepted Aug. 6, 2009)

* Corresponding author

中国科技核心期刊
CODEN: YACEEK

《岩矿测试》

欢迎订阅 欢迎投稿 承接广告

ISSN 0254—5357
CN 11—2131/TD

《岩矿测试》是中国地质学会岩矿测试专业委员会和国家地质实验测试中心共同主办的分析测试技术科技期刊。国际标准刊号: ISSN 0254—5357; 国际刊名代码 CODEN: YACEEK; 国内统一刊号: CN 11—2131/TD。

《岩矿测试》的宗旨是突出服务于地球科学和地质找矿事业以及促进岩矿测试技术的发展; 根据国家地质工作的重点由单一资源向资源环境并重的转变, 《岩矿测试》的内容有所拓宽, 主要报道国内与分析科学、资源环境、地球科学相关的新技术、新方法、新理论和新设备等研究成果、动态、评述及相关实践经验。

《岩矿测试》于 1982 年创刊, 国内外公开发行人。近年来刊物地位不断提高, 是中文核心期刊, 中国科技核心期刊, 中国期刊方阵双效期刊, 中国科技论文统计源期刊, 美国《化学文摘》、美国《剑桥科学文摘》、英国《分析文摘》、俄罗斯《文摘杂志》等数据库收录期刊。曾先后被评为国家、原地矿部、北京市、中国科协的优秀科技刊物。适合于地质、冶金、环保、石油、化工、煤炭等部门从事分析测试的科技工作者及大专院校分析化学、环境资源、地球科学等相关专业的师生阅读。

《岩矿测试》为双月刊, 大 16 开版本, 逢双月出版; 国内邮发代号 2—313; 国际书店发行代号 BM4089; 广告经营许可证: 京西工商广字第 0227 号; 定价 10.00 元/本, 全年 60.00 元。漏订的读者可直接与编辑部联系。

《岩矿测试》编辑部地址: 北京西城区百万庄大街 26 号

国家地质实验测试中心(邮政编码 100037)

电话: 010-68999562; 68999563 传真: 010-68999563

E-mail: ykcs_zazhi@163.com; ykcs_zazhi@sina.com

《岩矿测试》网站(在线投稿): <http://www.ykcs.ac.cn>