

# 内转换电子能量及绝对强度计算

周春梅 黄小龙 吴振东

(中国原子能科学研究院中国核数据中心 北京 102413)

**摘要** 简要介绍  $\gamma$  跃迁的内转换电子能量及绝对强度的计算方法,并以实例说明其具体应用.

**关键词** 内转换电子 辐射能量 绝对强度

## 1 引言

核衰变过程中,处于激发态的原子核将发射(跃迁) $\gamma$ 射线退激,并一直衰变到基态.在退激过程中,由于原子核与核外电子的电磁相互作用,跃迁 $\gamma$ 射线能够将能量传递给原子核外不同壳层( $K, L, M, N \dots$ 壳层)的原子电子;得到能量的核外原子壳层电子被激发并将会发射电子再辐射衰变.以这种方式激发并进行衰变的原子壳层电子被称为 $\gamma$ 跃迁的内转换电子.本文将简要介绍 $\gamma$ 跃迁的内转换电子的辐射能量及其绝对强度的计算方法,并以  $^{232}\text{Th}$  ( $T_{1/2} = 14.05 \times 10^9 \text{a}$ ) 为例说明其具体应用.

## 2 计算方法

### 2.1 内转换电子能量计算

假定原子核跃迁 $\gamma$ 射线的能量为 $E_\gamma$ ,原子核外 $i$ 壳层的原子电子结合能为 $E_i$ ,从原子 $i$ 壳层发射电子的能量为 $E_{e_i}$ ,根据能量平衡,有

$$E_{e_i} = E_\gamma - E_i, \quad (1)$$

其中  $i = K, L, M, N \dots$ .

不同原子(原子核电荷数 $Z$ 不同)电子的结合能 $E_i$ 数据已经系统评价,并汇编成数表<sup>[1]</sup>.该数表列出了不同核电荷数 $Z$ (不同元素)的并对应着 $K, L, M, N \dots$ 等壳层的原子电子结合能.查阅此数表便可得到所需的原子电子结合能 $E_i$ 数据.

## 2.2 内转换电子绝对强度计算

假定原子核跃迁能量为  $E_\gamma$  的  $\gamma$  射线的发射几率为  $P_\gamma$ , 其内转换系数为  $\alpha_i$  ( $i = K, L, M, N \dots$  壳层), 其内转换电子发射几率(即绝对强度)为  $P_{ei}$ , 则有

$$P_{ei} = P_\gamma \cdot \alpha_i, \quad (2)$$

其中  $i = K, L, M, N \dots$ .

由(2)可得

$$P_e = \sum_{i=K} P_{ei} = \sum_{i=K} P_\gamma \cdot \alpha_i = P_\gamma \sum_{i=K} \alpha_i = P_\gamma \cdot \alpha \quad (3)$$

$$\alpha = \sum_{i=K} \alpha_i, \quad (4)$$

其中  $\alpha$  是总的内转换系数,  $P_e$  是总的内转换电子发射几率(绝对强度).

由(2)和(3)式可知, 对能量为  $E_\gamma$  的  $\gamma$  跃迁来说, 只要知道其  $\gamma$  射线的发射几率  $P_\gamma$  及其内转换系数  $\alpha_i$  和总的内转换系数  $\alpha$ , 就可以计算其不同壳层的内转换电子的发射几率  $P_{ei}$  以及总的内转换电子发射几率  $P_e$ .

## 2.3 内转换系数计算

如上所述, 为了计算内转换电子发射几率  $P_{ei}$  和  $P_e$ , 就必须知道其内转换系数  $\alpha_i$  和总的内转换系数  $\alpha$ .

目前, 不同元素的不同原子壳层的内转换系数也已系统评价<sup>[2]</sup>. 它们是以不同元素(原子电荷数)及其跃迁  $\gamma$  射线能量  $E_\gamma$  为函数, 给出了跃迁  $\gamma$  射线的多极性 M1, M2, M3 和 M4 以及 E1, E2, E3, E4 等的 K, L, M, N  $\dots$  壳层及总的内转换系数的数表和曲线图. 现已有专门计算内转换系数的程序 HSICC(见表1). 该程序是以样条拟合方式, 对应其相应  $\gamma$  射线多极性的不同跃迁  $\gamma$  射线的能量  $E_\gamma$  进行计算的, 并根据其  $\gamma$  射线多极性和能量  $E_\gamma$  给出不同壳层  $i$  的内转换系数  $\alpha_i$  和总的内转换系数  $\alpha$ .

## 2.4 $\gamma$ 射线绝对强度计算

如上可知, 为计算内转换电子的绝对强度, 还必须知道其对应  $\gamma$  射线的绝对强度.

众所周知, 放射性核素衰变数据测量中, 多数情况下是进行  $\gamma$  射线的相对  $\gamma$  强度测量的. 核衰变数据评价中, 除给出其相对  $\gamma$  射线的强度外, 还通过数据分析和评价给出对应  $\gamma$  射线相对强度的归一化因子. 利用其归一化因子可以得到所需的  $\gamma$  射线绝对强度(即母核 100 次衰变的  $\gamma$  射线发射几率). 当前, 国际上比较好的核衰变数据汇编是 1996 年由美国苏伦兹贝克莱国家实验室汇编的同位素数据表(第八版)(Table of Isotopes (eighth edition 1996)). 该书是由核结构和衰变数据评价国际协作网的多位科学家分工协作进行数据评价建成的国际评价结构数据库 ENSDF 检索并进行汇编而成的.

## 2.5 主要计算程序及其工作流程

表 1 给出了计算  $\gamma$  跃迁内转换电子能量及其绝对强度的主要程序及其功能简介. 这

些程序是由结构和衰变数据评价国际协作网提供的。

表 1 计算  $\gamma$  跃迁内转换电子数据主要程序及其功能

主要程序	功能	主要程序	功能
HSICC	计算内转换系数 $a_i (i = K, L, M, N \dots)$ 和 $a$	RADLST	计算内转换电子能量及绝对强度
GABS	计算 $\gamma$ 射线绝对强度的归一化因子	ENSDAT	数据输出列表和绘制纲图

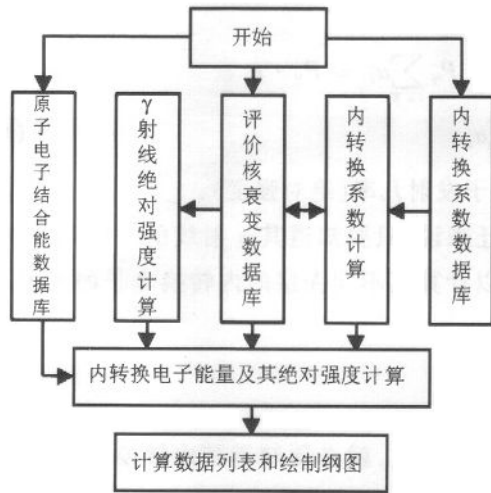


图 1 内转换电子数据计算流程图

图 1 给出了计算内转换电子能量及其绝对强度的流程图。由图 1 可知,计算可分为 3 个部分:1) 准备,主要是安计算程序要求的格式准备评价核衰变数据库、原子电子结合能数据库和内转换系数数据库;2) 计算,首先要计算所需的内转换系数和总的内转换系数以及  $\gamma$  射线绝对强度,然后计算内转换电子能量及其绝对强度;3) 输出,将计算结果按所要求的格式列出计算数表并绘制纲图。

### 3 应用

这里以  $^{232}\text{Th} (T_{1/2} = 14.05 \times 10^9 \text{ a})$  的衰变数据为例,说明其具体应用。

表 2 给出了  $^{232}\text{Th}$  的衰变  $\gamma$  射线数据<sup>[3]</sup>,图 2 给出了  $^{232}\text{Th}$  的衰变纲图。

表 2  $^{232}\text{Th}$  的衰变  $\gamma$  射线数据

$E_\gamma/\text{keV}$	$E_L/\text{keV}$	$I_\gamma^*$	$\gamma$ 多极性	内转换系数				
				$\alpha_K$	$\alpha_M$	$\alpha_N$	$\alpha_{\text{total}}$	$\alpha_{\text{total}}^*$
$63.81 \pm 0.01$	63.82	$0.263 \pm 0.013$	E2		59.92	16.22	5.824	82.0
$140.88 \pm 0.01$	204.69	$0.021 \pm 0.004$	E2	0.287	1.47	0.399	0.145	2.30

$a$  绝对强度, + 母核 100 次衰变的绝对  $\gamma$  强度乘以 1.0。

表 3  $^{232}\text{Th}$  衰变的  $\alpha, \gamma$  射线及其内转换电子的能量和绝对强度数据

辐射类型	能量/keV	绝对强度(%)	辐射类型	能量/keV	绝对强度(%)
$\alpha_1$	$3830 \pm 10$	$0.063 \pm 0.010$	$e\text{Ce}_{1N+}$	$62.602 \pm 0.010$	$1.53 \pm 0.09$
$\alpha_2$	$3950 \pm 8$	$21.7 \pm 1.3$	$\gamma_2$	$140.880 \pm 0.010$	$0.021 \pm 0.004$
$\alpha_3$	$4012.3 \pm 1.4$	$78.2 \pm 1.3$	$e\text{Ce}_{2K}$	$36.958 \pm 0.013$	$0.0060 \pm 0.0012$
$\gamma_1$	$63.81 \pm 0.01$	$0.263 \pm 0.013$	$e\text{Ce}_{2L}$	$121.643 \pm 0.010$	$0.031 \pm 0.006$
$e\text{Ce}_{1L}^*$	$44.573 \pm 0.010$	$15.8 \pm 1.0$	$e\text{Ce}_{2M}$	$136.058 \pm 0.010$	$0.0084 \pm 0.0017$
$e\text{Ce}_{1M}$	$58.988 \pm 0.010$	$4.27 \pm 0.25$	$e\text{Ce}_{2N+}$	$139.672 \pm 0.010$	$0.0030 \pm 0.0006$

\*  $e\text{Ce}_{1L}$  表示  $\gamma_1$  射线从第 L 层发射的电子。

由表 2 可知,  $^{232}\text{Th}$  衰变的相对  $\gamma$  射线强度的归一化因子为 1.0,并给出了  $\gamma$  射线的其它相关数据。其中,内转换系数数据是用 HSICC 程序计算的。

表3给出了 $^{232}\text{Th}$ 衰变的 $\alpha, \gamma$ 射线及其内转换电子的能量和绝对强度数据. 从表3可以看出, 对于重核 $^{232}\text{Th}$ 的衰变, 其内转换系数比较大, 因此, 内转换电子的辐射强度也比较大. 在图2中, 给出了 $\gamma$ 射线的能量、多极性、 $\gamma$ 发射几率和总的内转换电子发射几率. 从衰变能量平衡即实际应用来看, 其内转换电子的计算是相当重要的.

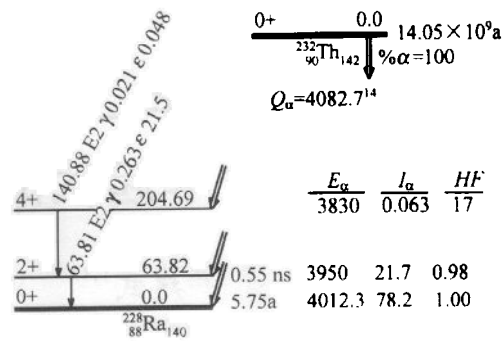


图2  $^{232}\text{Th}$ 衰变纲图

$\gamma$  0.263 表示  $\gamma$  射线强度为 0.263,  $\epsilon$  21.5 表示其内转换电子总强度为 21.5.

## 4 问题与讨论

本文只给出了计算 $\gamma$ 跃迁的内转换电子能量及其绝对强度的方法, 未给出其不确定度的计算方法. 对于数据评价来说, 不确定度的计算是相当重要的. 通常情况下, 多数采用误差传递的方法来计算其不确定度. 表3数据的不确定度就是采用这种方法计算的.

此外, 用HSICC程序计算内转换系数时, 必须知道跃迁 $\gamma$ 射线的能量及其跃迁的多极性与混合比 $\delta$ 值. 如果未给出这些数据该程序是不能进行计算的. 对于低能 $\gamma$ 跃迁和中、重核素来说, 内转换数据的计算是相当重要的, 不可忽略.

## 参考文献 (References)

- 1 Firestone F B, Shirley V S, Baglin C M et al. Table of Isotopes (Eighth edition 1996). Atomic-Electron Binding Energies P. F.37—F.39
- 2 Firestone F B, Shirley V S, Baglin C M et al. Table of Isotopes (Eighth edition 1996). Theoretical Internal Conversion Coefficients P. F.1—F.32
- 3 Artna-Cohen A. Nucl. Data Sheets., 1997, 80:723

## Internal Conversion Electron Energies and Their Absolute Intensities Calculation

ZHOU Chun-Mei HUANG Xiao-Long WU Zhen-Dong

(China Nuclear Data Center, China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China)

**Abstract** Calculation methods of internal conversion electron energies and their absolute intensities are briefly introduced on the basis of electronic binding energies of different shells, gamma-ray energies, internal conversion coefficients of different shells, total internal conversion coefficient and gamma-ray intensity. The application is also given by using  $^{232}\text{Th}$  decay as example in the text.

**Key words** internal conversion electron, radiation energy, absolute intensity

Received 15 February 2001