

高密度体系光电离截面新表达式的应用*

马晓光[†] 孙卫国 程延松

(四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2004 年 2 月 2 日收到, 2004 年 7 月 13 日收到修改稿)

利用实验光谱学的 Beer-Lambert 定律和介质中的麦克斯韦方程组, 建立了精确的光吸收(光电离)截面表达式, 并通过一个随体系粒子数密度和宏观复介电常数而变化的变换函数, 将严格截面公式与 Fano 和 Cooper 1968 年建立的理想气体的光电离截面公式直接联系起来. 建议: 1) 当知道某密度下正确的体系宏观复介电常数 β, γ 时, 可直接由严格表达式求得高密度下非理想状态的正确光电离截面; 2) 当知道该体系的粒子微观极化率 η, ζ 和其理想气体的精确截面时, 用上述变换公式间接求得其他密度时的光电离截面. 对氩原子和氦原子的应用表明: 当缺乏 β, γ 时, 可由某一合理的宏观电极化率物理(例如克劳修斯-莫索缔)模型来计算 β, γ , 从而获得高密度体系的截面. 这样获得的结果符合被散射物质的光电离(光吸收)截面随体系粒子数密度增大而增加的客观散射现象. 而且, 考虑了高密度真实体系中粒子间相互作用的宏观电极化率模型越正确, 如此求得的散射截面的误差就越小.

关键词: 光电离截面, 光吸收截面, 介电常数, 极化率

PACC: 3280F, 3280, 3380E

1. 引言

对孤立原子或分子光电离截面的研究一直是实验和理论物理学家关心的重要领域之一. 对于惰性气体, 人们做了很多这方面的实验工作^[1]. 近几年来, 人们对聚合物与团簇的光电离截面进行了大量的研究^[2], 对液体光电离的动态过程^[3]和与温度有关的光电离研究^[4]也取得了一定的进展. 在实验上, 由于受技术和设备的限制, 人们对“孤立原子”的研究总是建立在对大量原子集体的研究之上, 所研究的原子不可避免地要受到周围原子的影响, 实验上我们得到的是“准原子”的行为. 特别是当物质处在液态或固态时, 周围原子对吸收原子的相互作用将更加明显. 例如光谱线的展宽和位移现象包含了原子或分子之间相互作用的信息. 这些多体问题也一直是实验与理论物理学家关心的课题. 大多数实验或理论研究的重点都集中在单个原子、分子或者分子的单链低聚物或小团簇上. 近几年发展了精确计算理想气体状况下孤立原子光电离截面的程序包, 在理论上已经能够得到理想气体的较精确的单个原子行为^[5]. 但是, 很多原子或分子的性质是从凝聚态

(在固态或溶液中)的实验中推证出来的. 很显然, 非理想体系中原子的光谱、光电离截面和极化率一般对其周围的物理“环境”非常敏感. 因此, 利用单个原子的精确量子力学计算结果或实验数据, 在物理上寻找一定的规律, 并用一定的表达式把这些精确的理想气体结果与实际的“环境”(物质处在高密度或高压气体、液态或固态)联系起来, 从而得到实验或真实环境下的原子或分子截面, 非常有必要. 本文基于光谱学的 Beer-Lambert 定律^[6], 推导出了数学上不近似的电离截面公式^[7], 据此不但可以计算理想气体孤立原子的光电离截面, 而且可以用此公式和合理的物理模型计算环境中其他原子对其作用后的真实体系的光电离截面, 从而把部分微观多体效应和许多重要的量子效应也间接地包含在本文的新截面公式中. 由于本文的推导严格建立在光谱学理论之上, 与计算中使用的具体量子力学方法无关, 所以易程序化、易计算, 并能得到真实体系的正确计算结果.

2. 光电离截面的严格表达式

在原子光电离的实验过程中, 光通过介质时的

* 国家自然科学基金(批准号: 10074048)和国家教育部科学基金资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: hsiaoguangma@163.com

吸收截面,光谱实验学家用 Beer-Lambert 定律^[6]定义为

$$\frac{I_0}{I} = \exp(Nl\sigma), \quad (1)$$

或表示为

$$\sigma = \frac{1}{Nl} \ln\left(\frac{I_0}{I}\right) = \frac{\mu}{N}, \quad (2)$$

式中 I_0 和 I 分别为入射光和出射光的强度, N 为粒子数密度, l 为吸收长度, σ 为光吸收截面, μ 为吸收系数. 物质对电场的吸收系数表示为^[8]

$$\mu(\omega) = \frac{2\omega}{c} \kappa = \frac{2\omega}{c} \operatorname{Im}(\varepsilon)^{1/2}, \quad (3)$$

式中 c 为光速, ω 为入射光的能量, κ 为复折射率 $n + i\kappa$ 的虚部, ε 为复介电常数, 两者的关系由麦克斯韦方程组可得

$$\varepsilon = \beta + i\gamma = (n + i\kappa)^2 = 1 + 4\pi\chi, \quad (4)$$

式中 β 为复介电常数的实部, γ 为复介电常数的虚部, n 为复折射率的实部, χ 为电极化率. 因此, 由(2)和(3)式可将单个原子或分子的光吸收截面表示为

$$\sigma = \frac{\mu}{N} = \frac{2\omega}{Nc} \kappa. \quad (5)$$

将(4)式的复介电常数表达式代入 $\varepsilon^{1/2}$, 即可将复折射率的虚部表示为

$$\kappa = \sqrt{\frac{\sqrt{\beta^2 + \gamma^2} - \beta}{2}}. \quad (6)$$

把(6)式代入(5)式, 光吸收截面便表达为复介电常数的实部和虚部的函数, 即

$$\alpha(\omega) = \frac{\sqrt{2}\omega}{Nc} \sqrt{\sqrt{\beta^2 + \gamma^2} - \beta}. \quad (7)$$

在从(1)式到(7)式的推导过程中, 没有使用任何数学上的近似和量子力学模型, 因此(7)式是严格的光吸收截面表达式. 根据附录 A 最后一部分引用的有关讨论^[9], 当光电离量子效率 $\delta = 1$ 时(7)式就是原子光电离截面的严格表达式. 由于(7)式是从(2)式严格推导出来的, 而(2)式是实验上测量光吸收截面所归纳验证出的正确定律, 因此用(7)式与用(2)式所得结果在理论上应该完全相同. 在(7)式的等号右边, 复介电常数表示的是物质的宏观性质之一——介电性质的统计平均, 包含了环境中其他原子对离子化原子的影响, 而左边是实验测得的“单个”原子的物理量. 通过(7)式, 将体系的宏观性质与原子的微观物理量内在地有机联系在一起, 从而在物理上可以得到“准原子”的行为. 为了尽可能地考虑“环境”

对原子的影响, 也为了尽可能与实验符合得好, 建议在理论计算和实验时都用此公式来处理数据.

在很多量子理论计算中, 所使用的光电离截面公式是 1968 年 Fano 和 Cooper^[8] 给出的理想气体 (ideal gas) 的表达式, 即

$$\sigma_i(\omega) = \frac{4\pi\omega}{c} \zeta = \frac{4\pi\omega}{c} \operatorname{Im}(\alpha), \quad (8)$$

式中 ζ 为原子极化率 $\alpha = \eta + i\zeta$ 的虚部. Fano 等人也是从 Beer-Lambert 定律出发, 但他们为了简便, 在推导中仅仅取了级数展开的一级近似. (8)式表征的是理想气体中孤立的单个原子的行为. 很多的理论计算^[10-14]都是用(8)式来计算截面的. 若被研究体系为理想气体, 且用某一量子理论方法获得的原子(分子)极化率 α 足够精确, 则(8)式得到的理论散射截面应等同于实验测量值. 为了把(7)和(8)式联系起来, 把(7)式的形式做如下变换:

$$\begin{aligned} \alpha(\omega) &= \frac{4\pi\omega}{c} \zeta \frac{1}{2\sqrt{2\pi N\zeta}} \sqrt{\sqrt{\beta^2 + \gamma^2} - \beta} \\ &= \sigma_i(\omega) f(N, \beta, \gamma; \zeta), \end{aligned} \quad (9)$$

式中

$$f(N, \beta, \gamma; \zeta) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi N\zeta}} \sqrt{\sqrt{\beta^2 + \gamma^2} - \beta}. \quad (10)$$

可见, 通过(9)式使(7)与(8)式建立了联系, 即被研究体系在某一粒子数密度 N 下的严格散射截面, 可经一个与密度密切相关的变换函数 $f(N, \beta, \gamma; \zeta)$ 对理想气体的截面 $\sigma_i(\omega)$ 进行变换而得到. 因(10)式是与密度相关的复介电常数 β, γ 的函数, 所以我们把这个影响截面的函数称为介电影响函数 (dielectric influence function, DIF). 由附录 A 知, 对于稀薄气体和理想气体, 由于数密度 N 很小, 原子之间基本没有相互作用, DIF 对截面的影响仅包含物质宏观介电性质对微观散射截面的高阶修正. DIF 在此状况下趋于 1, 所以(8)式所表示的理想气体光电离截面是精确的. 但是当研究体系的密度增大时, 物质宏观介电性质对截面的影响会越来越大. 在高密度气体、液体或固体情况下, 原子之间的相互作用不可忽略. 这时, DIF 不但包含物质宏观介电性质对微观散射截面的有效高阶修正, 而且还包含原子之间的相互作用对光电离截面的重要影响.

利用上述精确光电离截面公式我们曾计算了金属钡原子在不同条件下的光电离截面^[7]. 本文将分别以氫原子和氦原子为例, 利用 DIF 研究光电离截面在不同密度下的物理结果.

3. 应 用

利用(9)和(10)式,研究了氫原子和氫原子在不同粒子数密度下的 DIF 和光电离散射截面的变化规律.对于氫原子,实验的光电离截面数据取自 Marr 等人^[15]的推荐数据.根据前面对(8)式的讨论,可以根据这些实验值逆算得到氫原子理想气体的(有效)偶极极化率的虚部,即

$$\zeta = \frac{c}{4\pi\omega}\sigma(\omega). \quad (11)$$

原子极化率的实部 η 和虚部 ζ 可由下列两个关系式相互连接起来^[16]:

$$\eta(\omega) = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\xi\zeta(\xi)}{\xi^2 - \omega^2} d\xi, \quad (12)$$

$$\zeta(\omega) = -\frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega\eta(\xi)}{\xi^2 - \omega^2} d\xi. \quad (13)$$

这两个关系式由 Kramers 和 Kronig 于 1927 年首次推导出来,是因果性物理原理的直接结论.把用(11)式计算的原子极化率的虚部代入(12)式,可以求得原子极化率的实部.图 1 给出计算的氫原子极化率 $\alpha = \eta + i\zeta$ 的虚部和实部.

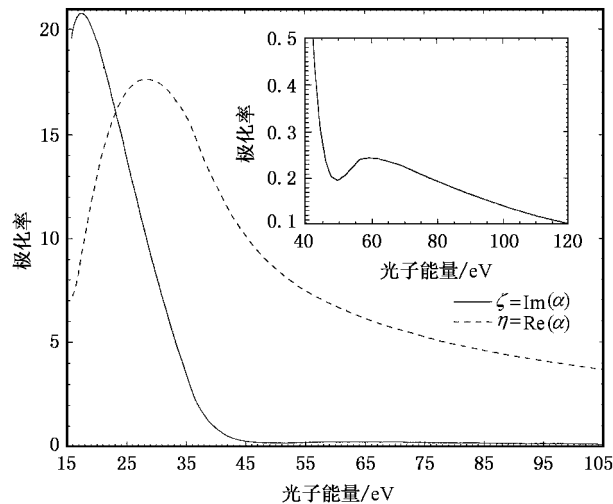


图 1 氫原子极化率的实部和虚部^[15]

图 2 给出在克劳修斯-莫索缔(CM)见附录 A)结构模型下包含理想气体在内的氫原子几种密度情况的 DIF,其中 f_d 是把附录中(A7)和(A8)式代入(10)式得到的稀薄气体的 DIF, f 是把(A3)和(A4)式代入(10)式得到的 DIF.当密度趋于无限小时,CM 模型转化成理想气体模型, DIF 在全能量区趋近于 1.这在图 2 中充分地体现了出来.在理想气体范围

内,如粒子数密度 N 为 $3.981 \times 10^{-6} a_0^{-3}$ (a_0 为玻尔半径)时, DIF 在两种模型下都几乎为 1.这说明在理想气体情况下, DIF 对截面的影响完全可以忽略.但随体系密度的增大 DIF 也逐渐变大.对一给定密度的非理想体系,在截面的峰值处 DIF 对截面的影响一般会很大.在 CM 模型下,这可以部分地解释为,当密度较大时,原子之间的相互作用随原子间距离的减小而越来越强,同时在较低的能量区间内光子与原子有效碰撞的频率越来越高,因而实验中出射光的强度也越来越弱,光子与原子碰撞的过渡复合体的寿命也越来越长,表现为原子的吸收截面相应地增大.而在稀薄气体模型下,随密度的增大, DIF 对截面的影响越来越大,特别是在峰值处影响更加显著.但与 CM 模型对截面的影响刚好相反, DIF f_d 却随粒子数密度的增加而减小, DIF 对氫原子截面的修正却使截面变小.附录 A 中对此进行了分析,说明此现象在物理上不合理.

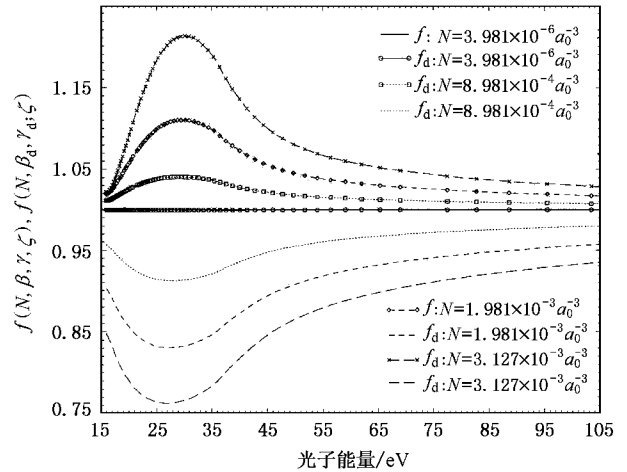


图 2 氫原子在几种密度下的 DIF f_d 和 f

图 3 给出当光电离量子效率 $\delta = 1$ 时,氫原子在几种密度下的光电离截面,其中 σ_i 为理想气体模型下由(8)式计算的结果, σ_d 是将(A7)和(A8)式代入(9)和(10)式得到的稀薄气体状态下原子间无相互作用时的结果, σ 是普遍使用的 CM 模型下将(A3)和(A4)式代入(9)和(10)式得到的考虑了原子间相互作用的截面; $N = 3.981 \times 10^{-6} a_0^{-3}$ 是氫在 20°C, 标准大气压下的理想气体的粒子数密度^[17], $N = 8.981 \times 10^{-4} a_0^{-3}$ 是稀薄气体的密度, $N = 1.981 \times 10^{-3} a_0^{-3}$ 是高密度气体的密度, $N = 3.127 \times 10^{-3} a_0^{-3}$ 是氫液体处在其沸点(-185.85°C)时的液体密

度^[18].当 $N = 8.981 \times 10^{-4} a_0^{-3}$ 时,由稀薄气体公式得到的截面 σ_d 反而比理想气体的结果小,附录 A 已说明它是不正确的.物理上较合理的结果应是此密度时恰当地考虑了粒子间相互作用的光电离截面 σ ,它在峰值区大于理想气体的截面 σ_i .随密度的增加,原子之间的相互作用越来越大,因而对截面的影

响也越来越大,特别是在峰值处使得截面 σ 较大地增大,在液体情况下,在峰值处的截面比理想气体大 5Mb 左右.另外,当获得了各密度下体系的复介电常数 β, γ 后,直接用(7)式也获得了与图 3 中三条非理想气体的光电离截面 σ 完全相同的结果.

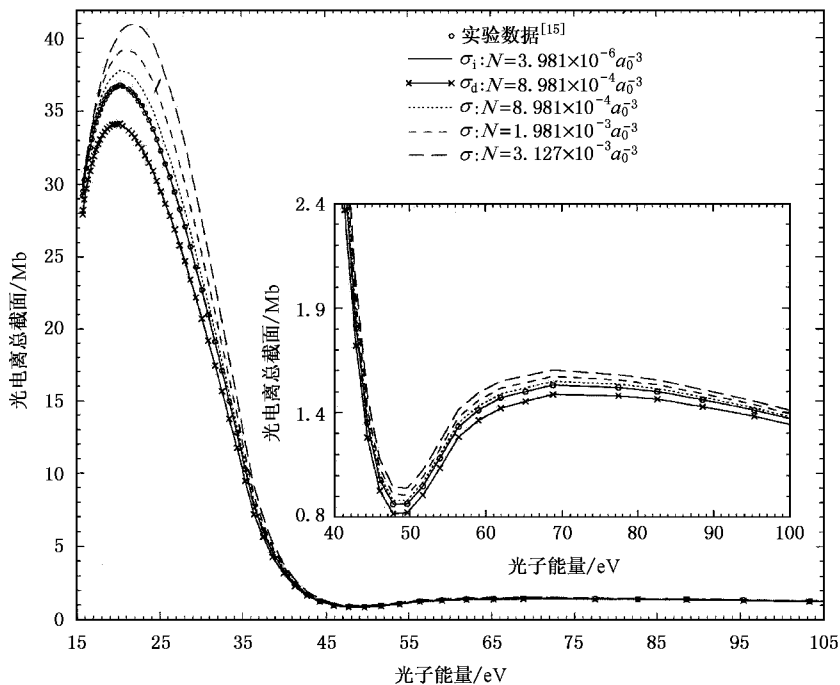


图 3 光电离量子效率 $\delta = 1$ 时, 氙原子处在不同物质密度下的光电离截面

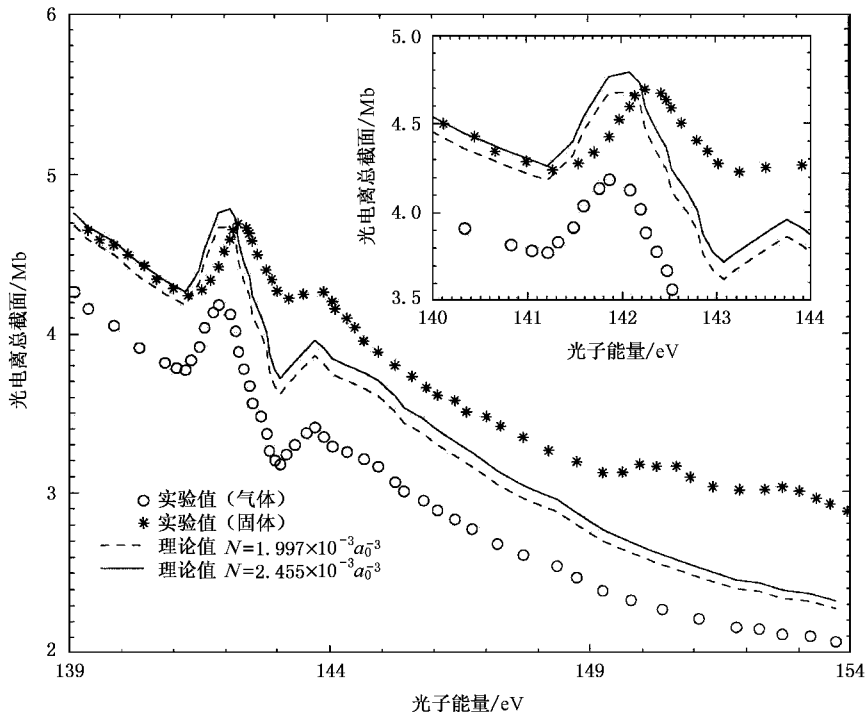


图 4 氙原子光电离截面的理论计算与实验比较

图 4 给出氦原子在理想气体状态和固体状态下的光电离截面的实验值^[19]. 由图 4 知, 在 139—154eV 之间, 固体的光电离截面在总体上比气体的光电离截面大, 且二者的散射结构基本类似. 据图 2 对 DIF 的分析可知, 理想气体的光电离截面实验值和孤立原子的光电离截面基本相等. 这样, 把气体实验截面代入(11)式, 并利用(12)式分别得到氦原子极化率的虚部和实部. 查到氦原子的液体密度 $N = 1.997 \times 10^{-3} a_0^{-3[18]}$, 固体密度 $N = 2.455 \times 10^{-3} a_0^{-3[20, 21]}$, 进而利用(A3)和(A4)式分别得到液体和固体介电常数的实部和虚部. 把上述物理量代入(9)和(10)式, 即可分别得到理论上考虑了物质的密度和介电效应后液体和固体的光电离截面. 将理论计算的截面值与气体和固体的实验结果进行比较可知, 在低能区, 理论计算和固体实验值符合较好, 这说明在这个能区内, 由 CM 模型给出的(A3)和(A4)式的确较好地反映了介电效应对截面的影响; 在较高能区, 理论计算的液体和固体结果均处在气体实验结果和固体实验结果之间, 这具有一定的合理性. 因为这个事实反映了被散射物质的光电离截面随体系粒子数密度 N 增大而增加的客观事实. 固体的理论和实验光电离截面在高能区的定性变化一致, 二者的差异在很大程度上来自于广泛使用的经典 CM 模型描述粒子间相互作用时的不足和该模型未能包含的部分重要量子效应.

4. 结 论

本文基于实验光谱学普遍使用的 Beer-Lambert 定律, 不用任何数学近似或其他物理模型, 获得了光与原子或分子碰撞时的、与体系密度直接相关的光吸收截面(或当光电离量子效率 $\delta = 1$ 时的光电离截面)的严格表达式((7)式). 此式给出了通过直接测量体系宏观复介电常数而获得微观截面的新方法. 本文进而定义了一个是粒子数密度函数的 DIF (10)式, 通过(9)式将(7)式与广泛使用多年的理想气体截面(8)式严格联系起来.(9)式的物理意义在于: 处于任何密度的一个真实光吸收(光电离)体系的微观散射截面 σ 可经一个表示物质宏观介电性质的变换函数——DIF($N, \beta, \gamma; \zeta$)对相同体系处于理想气体状态下的微观散射截面 σ_i 进行变换而得到. 该式表明: 只要具有被研究体系的单个粒子复极化率的虚部 ζ 和其复介电常数 β, γ , 就可以经(9)

式从容易获得的理想气体截面 $\sigma_i(\omega)$ 获得与 β, γ 相对应的高密度状态下的、可能较难测量的微观散射截面 $\sigma(\omega)$.

对于具有立方晶体结构的粒子体系, 当采用从实验归纳出的 CM 的电极化率 $\chi(\omega)$ 模型(A1)式]时, 可将体系的宏观复介电常数 β, γ 表示为单粒子微观极化率 η, ζ 的函数, 即(A3)和(A4)式, 从而用(9)式求得高密度体系的散射截面 σ . 因(9)式是严格的, 而(A3)和(A4)式是基于 CM 近似模型的结果, 所以带给 σ 的误差理论上将源自所用的计算宏观电极化率的具体模型, 以及微观复极化率 η, ζ 的精度. 不同的电极化率物理模型, 给出不同的宏观复介电常数 β, γ 的表达式和相应的散射截面 σ . 若有单粒子的精确复微观极化率 η, ζ , 并已知所研究体系的理想气体的正确截面 σ_i , 则可由(9)式和(A3), (A4)式间接获得某高密度下合理的光吸收截面; 若有实验测得的某高密度下的精确复介电常数 β, γ , 则可由(7)式直接得到该高密度体系正确的光吸收截面. 无论是哪一种情形, 若已知该体系的光电离量子效率 δ 和吸收截面, 则可由(A9)式得到该密度下的光电离截面.

对氦和氦原子体系的应用表明: 通过与被研究体系的粒子数密度没有密切关系的单粒子微观复极化率 η, ζ , 在宏观电极化率的一定物理模型(这里用 CM 模型)下, 间接地经过该体系在理想气体状态下的散射截面和(9)式, 求得的其他高密度状态下的散射截面, 在物理上是合理的. 而氦原子的例子实际演示了被散射物质体系的光电离(光吸收)截面 $\sigma(\omega)$ 随体系粒子数密度 N 的增大而增加的客观现象. 本文建议的方法给出了一条当没有体系的复介电常数 β, γ 时, 间接获得高密度体系散射截面的有效途径.

附录 A

1. 当极化原子或分子按照立方晶体结构排列, 根据 CM 模型, 物质的宏观电极化率可表示为^[22]

$$\chi(\omega) = \frac{N\alpha(\omega)}{1 - (4\pi/3)N\alpha(\omega)}, \quad (\text{A1})$$

式中 $-(4\pi/3)N\alpha$ 为立方晶体中极化粒子间的相互作用.(A1)式基于这样的事实: 立方晶体中的单个原子除了受到外加宏观电场 E^{mac} 的作用外, 还受到附近其他原子的感应偶极所产生的附加电场的作用. 因此, 作用在原子或分子 P 上的局域电场为^[22]

$$E_p^{\text{local}} = E^{\text{mac}} + \frac{4\pi\chi}{3} E^{\text{mac}}. \quad (\text{A2})$$

在这个模型下,将电极化率(A1)式代入(4)式,展开后利用单粒子的微观复极化率 $\alpha = \eta + i\zeta$,即可得到物质宏观复介电常数的实部 β 和虚部 γ :

$$\beta = \frac{(3 + 8\pi N\eta)(3 - 4\pi N\eta) - 3\zeta(\pi N\zeta)^2}{(3 - 4\pi N\eta)^2 + (4\pi N\zeta)^2}, \quad (A3)$$

$$\gamma = \frac{36\pi N\zeta}{(3 - 4\pi N\eta)^2 + (4\pi N\zeta)^2}. \quad (A4)$$

2. 对于密度略大于理想气体的稀薄气体,由于原子或分子相距较远,晶体中粒子间排列的立方结构不复存在,粒子极化后相互之间的作用可以忽略,体系的宏观电极化率可以认为是单个原子或分子极化率的简单和,从而CM模型的宏观电极化率转变为

$$\chi(\omega) = N\alpha(\omega). \quad (A5)$$

在这种情况下,作用在单个原子或分子 P 上的局域电场就是外加宏观电场:

$$E_p^{\text{local}} = E^{\text{mac}}. \quad (A6)$$

将(A5)式代入(4)式,即得稀薄气体(dilute gas)模型下,复介电常数的实部和虚部:

$$\beta_d = 1 + 4\pi N\eta, \quad (A7)$$

$$\gamma_d = 4\pi N\zeta. \quad (A8)$$

若已知单粒子的微观复极化率 η, ζ ,则可由(A3)和(A4)式得到体系的宏观复介电常数 β, γ ,将结果代入(7)式,以间接地求得固体或高密度体系的光电离截面;或由(A7)(A8)和(7)式,得到稀薄气体的截面.若将稀薄气体的电极化率(A5)式代入(3)和(5)式,并将结果对 $\epsilon^{1/2}$ 做级数展开后仅保留一阶项,即得到Fano和Cooper给出的(8)式所表述的理想气体光电离截面公式.

值得注意的是,当仅保留一阶项时,粒子数密度 N 很巧合地从所得的截面公式中抵消掉,因而在此近似下,Fano和Cooper的理想气体截面公式(8)与实验测得的理想气体状态下单个粒子的光电离截面恰好相一致.在理想气体状态下作此近似时所忽略掉的全部高阶项的总和和对截面给出负的贡献,因此,由于这些负贡献,使得包含了全部高阶项的稀薄气体截面反而小于理想气体的光电离截面.这

一现象违背了应有的客观物理事实:稀薄气体的密度大于理想气体的密度,因而入射光子与稀薄气体中粒子的碰撞频率应更高,一般而言,其碰撞截面应更大.造成这种现象的根源在于:当从包含粒子间相互作用的CM模型(A1)式忽略掉分母中的相互作用时,隐含在分子(N_a)中的粒子间相互作用仍然存在.尽管这种影响比分母中的粒子相互作用的贡献小,但这种片面地保留次要影响而忽略主要相互作用的物理近似就导致了上述不合理的稀薄气体截面反而更小的物理结果.所以,理论上除了计算理想气体的光电离截面可用(8)式外,计算包含理想气体、稀薄气体在内的各种密度体系的光电离截面都应该用(7)式,而只有(A3)和(A4)式才能给出(7)式中所用的各种密度下体系的宏观复介电常数 β, γ 在CM模型下的较合理结果,从而得到有物理意义的散射截面.需要强调的是(7)和(9)式是严格的结果,但若没有体系的宏观复介电常数 β, γ 的直接测量数据时,则只能使用一定的宏观电极化率物理模型(例如CM模型)间接地计算 β, γ ,从而间接地经过(7)或(9)式得到体系在高密度状态下的散射截面 σ .如此间接得到的 σ 的误差大小直接取决于计算宏观电极化率的物理模型.

3. 在光吸收的实验中,当一个分子吸收了一个其能量大于分子电离能的光子时,光电量子效率 $^{[9]}\delta$ 定义为产生的离子数目和吸收的光子数目之比,有可能小于1.在这种情况下,光的部分能量有可能通过荧光或光离解成中性分子碎片的方式消耗掉.尽管通过荧光衰减的概率很小,但是中性光离解截面在大于阈能几个电子伏的范围内有时具有不可忽略的贡献.在光吸收过程中,光吸收截面 σ_a 、光电离截面 σ 和中性光离解截面 σ_d 的关系为 $^{[9]}$

$$\sigma = \sigma_a \times \delta, \quad (A9)$$

$$\sigma_d = \sigma_a \times (1 - \delta) = \sigma_a - \sigma. \quad (A10)$$

在研究原子的光吸收实验中,荧光衰减的贡献有时非常小,同时因原子不存在离解问题, $\sigma_d = 0$,所以,光电量子效率 $\delta \rightarrow 1$,此时有

$$\sigma = \sigma_a. \quad (A11)$$

[1] Wannberg B, Veenhuizen H and Norell K E 1986 *J. Phys. B* **19** 2267
 [2] Angel R, Alonso J A and Blasé X 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 247
 [3] Jansen T C, Swart M and Jensen L 2002 *J. Chem. Phys.* **116** 3277
 [4] Zheng M *et al* 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 36 [in Chinese] 郑民等 1999 *物理学报* **48** 36
 [5] Cheng Y S, Liu J C and Sun W G 1998 *Acta Phys. Sin.* (Overseas Edition) **7** 161
 [6] Chan W F, Cooper G and Brion C E 1991 *Phys. Rev. A* **44** 186
 [7] Sun W G, Ma X G and Cheng Y S 2004 *Phys. Lett. A* **326** 243
 [8] Fano U and Cooper J W 1968 *Rev. Mod. Phys.* **40** 441
 [9] Kameta K, Muramatsu K and Machida S 1999 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **32** 2719
 [10] Sun W, Pitzer P M and McCurdy C W 1989 *Phys. Rev. A* **40** 3669
 [11] Lu P F, Liu J C, Yang X D and Ma X G 2003 *Chin. Phys.* **12** 159
 [12] Wu C Y and Gong Q H 2001 *Chin. Phys.* **10** 814
 [13] Wu J H and Yuan J M 2003 *Chin. Phys.* **12** 1390

[14] Ma X G, Sun W G and Cheng Y S 2005 *Commun. Theor. Phys.* **43** 169
 [15] Marr G V and West J B 1976 *Atom Data Nucl. Data Tables* **18** 497
 [16] Landau L D and Lifshitz E M 1958 *Statistical Physics* (Reading, MA: Addison-Wesley) p293
 [17] Dean J A *Lang's Handbook of Chemistry* (New York: McGraw-Hill) p2-4—2-123
 [18] Lide D R 1999 *CRC Handbook of Chemistry and Physics* 80th ed Boca Raton, FL (RC Press) p12—15
 [19] Henke B L, Gullikson E M and Davis J C 1993 *Atom. Data Nucl. Data Tables* **54** 181
 [20] Lide D R 1990 *CRC Handbook of Chemistry and Physics* The Chemical Rubber Co
 [21] Alfa Aesar Research Chemicals Metals and Materials A Johnson Matthey Company 1999-2000
 [22] Debye P 1929 *Polar Molecules Chemical Catalog* (New York) chap I

A new expression for photoionization cross sections and its application in high density system^{*}

Ma Xiao-Guang Sun Wei-Guo Cheng Yan-Song

(*Institute of Atomic and Molecular Physics ,Sichuan University ,Chengdu 610065 ,China*)

(Received 2 February 2004 ; revised manuscript received 13 July 2004)

Abstract

A new expression for photoionization cross section has been proposed based on the Beer-Lambert 's law and Maxwell equations for a material . And we also proposed a function varying with the number density of the system ,which includes the local field effect and the higher-order dielectric correction to the famous formula for photoionization cross section of isolated atoms , proposed by Fano and Cooper in 1968. The photoionization cross sections of solid xenon have been studied by using this alternative expression which couples the macroproperty and the quantum quantity of the photoionization system ,and which makes it possible for one to study the influence of induced dipoles on the photoionization. The dielectric behaviors of the matter in condensed state under several physical conditions(given the complex dielectric constants or the model of electric susceptibility of the system) are considered using our new expression for photoionization cross sections. The results show that it is reasonable in physics to calculate the cross sections of atoms in a real system by using the accurate expression. Furthermore ,the more correct the model of electric susceptibility for the real system ,the more accurate the cross section obtained from our formula will be .

Keywords : photoionization cross-section , photoabsorption cross-section , dielectric constant , polarizability

PACC : 3280F , 3280 , 3380E

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10074048) , and the Science Foundation from the Ministry of Education of China .