

原子双光子电离截面的理论计算

巫英坚 李家明

(中国科学院物理研究所)

1984年6月11日收到

提 要

我们在 Hartree-Slater 自洽场理论的基础上,以 Cs, Xe 原子为例,具体计算了其双光子电离截面. 本文的理论方法可容易地应用于其它双光子过程的计算,同时还可推广到更多光子过程的计算. 将计算结果和相应的实验以及其它理论结果作了比较和讨论. 明确了本文理论计算的精确程度,对碱金属元素(例如 Cs)本文的理论值与最近的精确实验符合得较好.

一、引 言

随着激光光谱技术的发展,各种多光子过程的研究引起人们的极大兴趣,同时这方面的研究也具有很大的实用价值,例如可以利用多光子过程来扩展光源的波段、产生强相干光辐射^[1]等. 另一方面在强光与物质相互作用的基础研究中,多光子电离现象也是人们所感兴趣的课题之一. 在微扰理论适用的条件下(对于基态原子其条件为 $E \ll 10^9 \text{V/cm}$)可以应用 N 阶含时微扰计算 N 光子跃迁几率,其主要的困难是计算中包含有对非微扰原子本征态的无穷项求和,针对这个困难近年来主要采用的计算方法可以归结为三类: (1) 有限项近似方法,它只考虑有限个共振或近共振能级对于跃迁几率的贡献,忽略其余项的作用,它主要适用于共振区域内多光子跃迁几率的计算^[2]. (2) 格林函数方法,它将原子本征态的无穷项求和变换为格林函数所满足的非齐次薛定谔方程. 这种方法主要适用于非共振区域^[3]. (3) 有限项近似和格林函数相结合的方法^[4].

我们采用第三种计算方法,在原子体系的 Hartree-Slater 自洽场近似的基础上,建立了双光子电离截面的计算程序,这个程序可以计算其它的双光子过程,也可以推广到更多光子过程的计算. 我们具体讨论了跃迁几率的性质,说明它可以分为动力部分和几何部分,几何部分反映了光的传播方向、偏振类型以及原子空间取向等实验安排条件的影响,对于不同几何条件,动力部分不变. 因此动力部分只需计算一次,而几何部分是可以解析计算的. 作为计算精度的检验,我们计算了氢原子的双光子电离截面,得到了满意的结果. 然后分别计算了 Cs, Xe 原子的双光子电离截面,关于 Cs 原子最近有精确的双光子电离截面的实验^[5],并且前人也作过一些计算^[6-8],而我们计算结果与精确的实验测量得到较好的符合. 在高功率准分子激光器件研究的发展中,惰性气体(如 Xe)的双光子电离截面数据引起了人们较大的兴趣. 利用 ArF 激光 (193 nm),人们测量了 Xe 原子双光子电离截面^[9,10],然而不同的测量结果相差两个数量级. Xe 原子在 193nm 波长下的

双光子电离过程所激发的末态处于自电离能域, 目前还没有合适的理论方法计算该能域的双光子电离截面. 本文的理论计算值相应于自电离共振的平均值. 本文也与他人的计算值^[11] 和最近的实验值^[10] 进行了比较, 得到了一致的结果.

二、双光子跃迁几率的理论分析

原子和辐射场相互作用体系的哈密顿量可以写为

$$H = H_A + H_R + V. \quad (1)$$

这里 H_A 是自由原子的哈密顿量, 在我们的讨论中, 这一部分采用 Hartree-Slater 平均自洽场近似^[12]. 原子中各个电子可以用各种单电子轨道波函数来描述:

$$\varphi_{nlm}(\mathbf{r}) = (P_{nl}(r)/r) Y_{lm}(\Omega), \quad (2)$$

其中 n, l, m 分别代表主量子数、轨道角量子数和磁量子数. 原子系统的多电子波函数则由这些单电子轨道波函数和自旋波函数的反对称乘积组成, 即组态波函数. 这些单电子波函数的耦合使原子系统具有一定的总轨道角动量 L , 总自旋 S 及其投影 M_L, M_S (即 L - S 耦合).

H_R 为自由辐射场的哈密顿算符, 这里采用二次量子化形式

$$H_R = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left(a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{\mathbf{k}}, \quad (3)$$

式中 $a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger, a_{\mathbf{k}\lambda}$ 分别代表光子产生算符和湮灭算符, $\mathbf{k}$ 为光子波矢, $\omega_{\mathbf{k}}$ 为相应的频率, λ 标志光子的不同偏振.

关于原子和辐射场的相互作用 V , 由 Aharonov 等人的讨论可知^[13], 在偶极近似下, 对于 Hartree-Slater 近似下的原子哈密顿量, 相互作用可采用以下形式:

$$V = e \mathbf{r} \cdot \mathbf{E},$$

$$\mathbf{E} = i(2\pi\hbar/L^3)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\omega_{\mathbf{k}}} \cdot [a_{\mathbf{k}\lambda} \hat{\epsilon}_\lambda - a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{\epsilon}_\lambda^*], \quad (4)$$

式中 L^3 为归一化体积, $\hat{\epsilon}_\lambda$ 为单位偏振矢量, 在 $\mathbf{k}$ 一定以后, 只可能有两个线性独立的偏振方向, 我们可定义“光子坐标系”即以 $\mathbf{k}$ 方向作为该坐标系的 z 轴. 则对于左右旋圆偏振光的偏振基矢为

$$\hat{\epsilon}_\pm = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\epsilon}_1 \pm i \hat{\epsilon}_2). \quad (5)$$

这时一般的偏振矢量可以写为 $\hat{\epsilon} = c_+ \hat{\epsilon}_+ + c_- \hat{\epsilon}_-$, 而 $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$. 展开系数和光子偏振的密度矩阵相联系, 并可以由光偏振的斯托克斯参量 (S_0, S_1, S_2, S_3) 决定^[16]

$$(\rho_{\lambda\lambda'}) = \begin{pmatrix} c_+^\dagger c_+ & c_+^\dagger c_- \\ c_-^\dagger c_+ & c_-^\dagger c_- \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - S_3/S_0 & -S_1/S_0 - iS_2/S_0 \\ -S_1/S_0 + iS_2/S_0 & 1 + S_3/S_0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

因此它们可由实验决定.

当相互作用 V 可视为微扰时, 可将 $H_0 = H_A + H_R$ 作为非微扰哈密顿量: $H_0|A\rangle = \epsilon_A|A\rangle$, 而 $|A\rangle = |a \otimes \{n_{\mathbf{k}\lambda}\}\rangle$, $\epsilon_A = \epsilon_a + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left(n_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{\mathbf{k}}$. 在本文中大写字母标

志 H_0 的本征态和能量, 而以小写字母标志原子的本征态, 以 $\{n_{k\lambda}\}$ 标志辐射场 H_R 的本征态, $n_{k\lambda}$ 为 $k\lambda$ 模式光子的占据数. 由含时微扰论可知: 体系由初态 A 通过双光子跃迁过程跃迁到末态 B 的跃迁几率为

$$P_{BA}^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| - \sum_J \frac{\langle B | V | J \rangle \langle J | V | A \rangle}{\varepsilon_J - \varepsilon_A} \right|^2 \delta(\varepsilon_B - \varepsilon_A). \quad (7)$$

考虑由单束入射光产生的双光子吸收过程, 由上式可得原子从初态 a 跃迁到末态 b 的双光子跃迁几率为

$$\begin{aligned} P^{(2)} &= (2\pi)^3 \alpha^2 (\hbar\omega)^2 \frac{\langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \rangle c^2}{(L^2)^2} \\ &\quad \cdot \frac{1}{g_a} \sum_{\{a\}} \sum_{\{b\}} |T^{(2)}|^2 \delta(\omega_{ba} - 2\omega), \\ T^{(2)} &= \sum_j \frac{\langle b | \hat{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} | j \rangle \langle j | \hat{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} | a \rangle}{\varepsilon_j - \varepsilon_a - \omega\hbar}. \end{aligned} \quad (8)$$

由于初态原子是非极化的, 因而式中包含对原子所有简并初态的平均 $\frac{1}{g_a} \sum_{\{a\}} g_a$ 为初态简并度, 对于 L - S 耦合, 考虑在跃迁过程中自旋部分不变, 则 $g_a = 2L_a + 1$, 而 $\sum_{\{b\}}$ 表示对相应的简并未态求和. 在 $T^{(2)}$ 中, 对 j 的求和包括了参与跃迁电子所有可能的能态, 但由于泡利原理的限制, 它不包括已被填满的能态.

为了具体分析跃迁矩阵元 $T^{(2)}$ 的性质, 我们需要先讨论偶极矩阵元的性质, 由于任意偏振总可以在一定基矢上展开, 所以我们总可以选择比较方便的坐标系来讨论偶极矩阵元的偏振性质, 如光子坐标系或以线偏振方向为 z 方向以传播方向为 x 方向的线偏振坐标系, 当原子波函数所处的实验室坐标系就是以上的方便坐标系时, 由 Wigner-Eckart 定理可得

$$\langle j | \mathbf{r} \cdot \hat{\varepsilon}_\lambda | a \rangle = \bar{\mathcal{D}}_{ja} (-1)^{\lambda-M_a} \begin{pmatrix} L_j & 1 & L_a \\ -M_j & \lambda & M_a \end{pmatrix} \quad \lambda = 0, \pm 1, \quad (9)$$

其中 $\lambda = \pm 1$ 分别对应于左、右旋圆偏振光, 即取光子坐标系, 而 $\lambda = 0$ 对应于线偏振光, 为线偏振坐标系. 式中 $\bar{\mathcal{D}}_{ba}$ 为约化矩阵元, 我们把它称为跃迁矩阵元的动力部分, 对于碱金属和惰性气体的情况, 其表达式为

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{D}}_{ja} &= \sqrt{N} \cdot \mathcal{D}_{ja} \sqrt{(2L_a + 1)(2L_j + 1)} (-1)^{L_1} \begin{Bmatrix} L_j & 1 & L_a \\ l_a & L_1 & l_j \end{Bmatrix}, \\ \mathcal{D}_{ja} &= \int p_{n_j l_j} r p_{n_a l_a} dr \cdot \sqrt{(2l_a + 1)(2l_j + 1)} \begin{pmatrix} l_j & 1 & l_a \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (10)$$

式中 N 为初态参与跃迁电子所在次壳层的等价电子个数, $\mathcal{D}_{ja}$ 为单电子轨道波函数之间的约化矩阵元. (9) 式中, 除 $\bar{\mathcal{D}}_{ja}$ 以外的部分我们称为几何部分, 它反映了原子空间取向, 光的传播方向以及偏振性质对于跃迁矩阵元的影响, 当实验室坐标系和以上方便坐标系不重合时, 对应 $\hat{\varepsilon}_\lambda (\lambda = 0, \pm 1)$ 偏振的偶极矩阵元的几何部分变为

$$(-1)^{\lambda-M_q} \begin{pmatrix} L_j & 1 & L_a \\ -M_j & M_j - M_a & M_a \end{pmatrix} D_{-\lambda, M_a - M_j}^1(\alpha, \beta, \gamma), \quad (11)$$

式中 (α, β, γ) 为欧拉角, $D_{-\lambda, M_a - M_j}^{L_j}(\alpha, \beta, \gamma)$ 为实验室坐标系向方便的坐标系旋转的旋转矩阵元, 而偶极矩阵元的动力部分不变.

对于(8)式的双光子跃迁矩阵元, 可以选择对应的方便坐标系, 因此只讨论(9)式对应的三种情况:

$$\begin{aligned} T^{(2)} &= \sum_{L_j} \left[\sum_{l_j n_j} \frac{\bar{\mathcal{D}}_{b j} \bar{\mathcal{D}}_{j a}}{\epsilon_j - \epsilon_a - \omega \hbar} \right] (-1)^{\lambda_2} \begin{pmatrix} L_b & 1 & L_j \\ -M_a - \lambda_1 - \lambda_2 & \lambda_2 & M_a + \lambda_1 \end{pmatrix} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} L_j & 1 & L_a \\ -M_a - \lambda_1 & \lambda_1 & M_a \end{pmatrix} \\ &= \sum_{L_j} T(b, L_j) G(L_b, L_j, \lambda_1, \lambda_2, M_a) \quad \lambda_1 = \lambda_2 = 0, \pm 1. \end{aligned} \quad (12)$$

可见, 对于每一固定的中间态轨道角动量 L_j , 矩阵元仍可分为动力部分

$$T(b, L_j) = \sum_{l_j n_j} \frac{\bar{\mathcal{D}}_{b j} \bar{\mathcal{D}}_{j a}}{\epsilon_j - \epsilon_a - \omega \hbar}$$

和其余的几何部分 $G(L_b, L_j, \lambda_1, \lambda_2, M_a)$, 有关动力部分的计算将在下面讨论, 而几何部分在入射光为任意偏振时, 应该考虑任意偏振 ϵ 在 $\epsilon_{\pm}$ 基矢上的展开, 即

$$\sum_{\lambda_1 = \pm 1} \sum_{\lambda_2 = \pm 1} c_{\lambda_1} c_{\lambda_2} G(L_b, L_j, \lambda_1, \lambda_2, M_a), \quad (13)$$

其中 c_{λ} 为展开系数, 由(6)式可得

$$\begin{aligned} |T^{(2)}|^2 &= \sum_{L_j L'_j} T(b, L'_j) T(b, L_j) \\ &\quad \cdot \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} G(L_b, L'_j, \lambda'_1, \lambda'_2, M_a) G(L_b, L_j, \lambda_1, \lambda_2, M_a) \rho_{\lambda'_1 \lambda'_2} \rho_{\lambda_1 \lambda_2}. \end{aligned} \quad (14)$$

对于双光子电离过程, 末态是连续态, 末态电子可能具有不同的轨道角动量. 当采用满足外向边界条件的能量归一的末态电子波函数^[13]时, 双光子电离的总跃迁几率为

$$\begin{aligned} P^{(2)} &= (2\pi)^3 \hbar (\alpha \hbar \omega)^2 \frac{\langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \rangle c^2}{(L^3)^2} \frac{1}{g_a} \sum_{L_b L'_b} \sum_{M_a} |T^{(2)}|^2 \\ &= k \cdot \frac{1}{g_a} \sum_{L_b} \sum_{L'_b} \sum_{M_a} \cdot \left\{ \sum_{L'_j} \sum_{L_j} T(b, L'_j) T(b, L_j) \right. \\ &\quad \cdot G(L_b, L_j, \lambda'_1, \lambda'_2, M_a) G(L_b, L_j, \lambda_1, \lambda_2, M_a) \Big\} \\ &\quad \lambda_1 = \lambda_2 = \lambda'_1 = \lambda'_2 = 0, \pm 1. \end{aligned} \quad (15)$$

如果入射光的偏振是任意的, 跃迁矩阵元的平方应取(14)式.

当入射光的光子流强为 F 时 ($F \equiv \langle a^+ a \rangle c / L^3$), 可定义双光子电离截面为

$$\begin{aligned} \sigma^{(2)} &\equiv P^{(2)} / F^2 = \left[P^{(2)} \cdot \left(\frac{(L^3)^2}{\langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \rangle c^2} \right) \right] \cdot \frac{\langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \rangle}{(\langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle)^2} \\ &= \sigma_{\text{th}}^{(2)} \cdot G(2, M), \end{aligned} \quad (16)$$

$G(2, M) \equiv \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \rangle / (\langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle)^2$ 为光源统计因子(二阶关联函数), 它是入射光源的模式 M 以及每个模式对应的二阶时空分布的函数. 如果所有模式皆为具有相同平均强度的

高斯模, 则该统计因子为^[12] $G(2, M) = 2! M^2 (M-1)! / (2+M-1)!$, 当 $M \rightarrow \infty$ 时, $G(2, M) \rightarrow 2!$.

在计算中我们采用原子单位, 因此

$$\sigma_{\text{th}}^{(2)} = A \cdot \left\{ (2\pi)^3 \alpha^2 \frac{\omega^2}{2L_a + 1} \sum_{L_a} \sum_{l_a} \sum_{M_a} |T^{(2)}|^2 \right\}, \quad (17)$$

式中 $A = 2.5054694 \cdot 10^{-52}$, $\sigma_{\text{th}}^{(2)}$ 的量纲为 $\text{cm}^4 \cdot \text{s}$.

现在讨论动力部分的计算, 由 (12) 式可知 (在以下计算中我们采用原子单位)

$$T(b, L_i) = \sum_{l_i} \left(\sum_{n_j} \frac{\int P_b r P_i dr \cdot \int P_i r P_a dr}{\omega_j - \omega_a - \omega} \right) \cdot (\text{角动量耦合因子}). \quad (18)$$

角动量耦合因子包括一系列 $3j, 6j$ 系数, 所以关键是求对 n_j 求和的径向积分部分, n_j 表示在固定 l_i 以后所有可能的参与跃迁电子的中间能态, 包括连续态. 这一部分可改写为

$$\sum_{n_j} \frac{\int P_b r P_i dr \cdot \int P_i r P_a dr}{\omega_j - \omega_a - \omega} = \int P_b r P(r) dr, \quad (19)$$

$P(r)$ 满足下列非齐次薛定谔方程:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} - 2V_{\text{scf}} + 2\omega_p \right) P(r) \\ & = -2 \left[rP(r) - \sum_{n_j=n_i}^{n_2} P_j(r) \int P_i(r) r P_a(r) dr \right] \equiv G(r), \end{aligned} \quad (20)$$

式中 $\omega_p = \omega_a + \omega$, V_{scf} 为 Hartree-Slater 自洽势, 非齐次项中的求和表示需要除去的有限个已经完全填充的内壳层的态 (即泡利原理禁止的态的贡献). 另外, 在这一项中还可以除去有限个共振或近共振中间态的贡献. 方程 (20) 的解为

$$\begin{aligned} P(r) &= \left[\int_r^\infty \frac{G(x)g(x)}{W[f, g]} dx \right] f(r) + \left[\int_0^r \frac{G(x)f(x)}{W[f, g]} dx \right] g(r), \\ W[f, g] &= f(r)g'(r) - f'(r)g(r) = \frac{2}{\pi}, \end{aligned} \quad (21)$$

$f(r), g(r)$ 为 (20) 式相应齐次方程的正则和非正则解, 它们满足

$$f(r) = 0 \quad r = 0; \quad g(r) = 0 \quad r = \infty.$$

如果在 (20) 式中除去有限共振或近共振态的贡献, 则相应方程的解记为 $\bar{P}(r)$, 而径向积分

$$\sum_{n_j} \frac{\int P_b r P_i dr \cdot \int P_i r P_a dr}{\omega_j - \omega_a - \omega} = \int P_b r \bar{P}(r) dr + \sum_{n_j=n'_1}^{n'_2} \frac{\int P_b r P_i dr \cdot \int P_i r P_a dr}{\omega_j - \omega_a - \omega}. \quad (22)$$

右边第二项是方程 (20) 中除去的共振或近共振项的贡献, 它们的 ω_a, ω_j 可以用实验值代替, 从而使计算更精确. 另外, 由于 $\int P_b r \bar{P}(r) dr$ 以及 $\int P_b r P_i dr$ 随 ω 的变化缓慢, 因而我们可以在计算中采用内插方法, 这样也减少了平均每点的计算时间.

有关双光子跃迁几率的计算方法可以方便地推广到计算更多光子的过程, 这里不再详述.

三、理论计算结果与讨论

由于氢原子是可以精确求解的, 因而曾有许多人采用各种方法对氢原子双光子吸收作过计算^[17,18], 这些计算结果可以用来作为检验计算精度的判据. 为了检验我们的计算方法的精度, 也作了氢原子 $1s-2s$ 双光子跃迁以及双光子电离的计算, 我们计算的结果与别人的计算吻合得很好.

在此基础上, 我们计算了 Cs 原子在光子波长为 460—540 nm 范围内的双光子电离截面, 在这个频率范围内 Morellec 等人曾精确测量了其双光子电离截面^[5], 在实验上第一次观察到这个范围内双光子电离截面的极小值, 实验采用红宝石激光倍频泵浦染料激光器. 频率在 460—540 nm 范围连续可调. 出射激光为多纵模线偏振. 光强范围在 $10^8-2 \times 10^{10} \text{ W/cm}^2$ 之间, 考虑激光统计因子的影响, 实验数据已除 $2!$. 我们的计算中 $6p$, $7p$ 中间态和初态的能量差采用了光谱实验的数据^[19]. 考虑了这两个能级的自旋-轨道分裂. 图 1 为计算结果和实验值以及其它理论计算结果的比较, 可以看出我们的计算和实验符合较好. 但极小值的位置仍存在一定的差别, 这是由于我们目前的计算仅取 Hartree-Slater 近似. 如果进一步考虑这种近似忽略掉的残余作用, 采用组态相互作用理论, 可望使精度进一步提高.

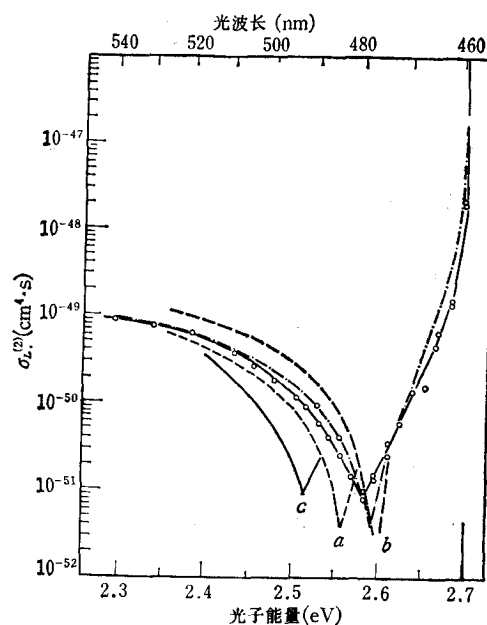


图 1 Cs 原子双光子电离截面 —○— 为实验值^[5]; — — — 为本文计算值; a, b, c 分别为 Bebb^[6], Teague^[7], Rachman^[8] 的理论计算

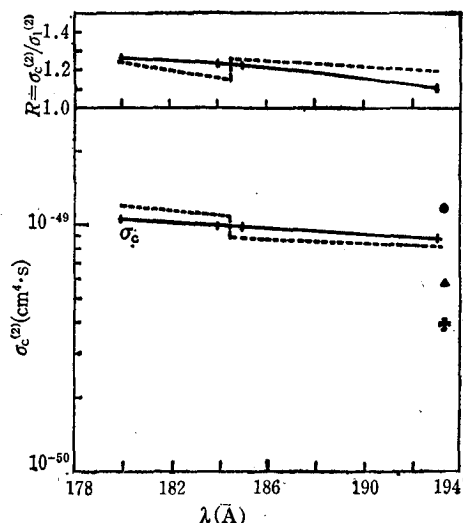
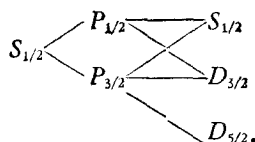


图 2 Xe 原子双光子电离截面和圆偏振与线偏振电离截面之比 $R = \sigma_c^{(2)}/\sigma_l^{(2)}$, 虚线为 McGuire 计算值^[11]; 实线为本文计算值; + 为实验值^[10]; Δ 为本文计算的 $\sigma_c^{(2)}_{\text{自然}}$; $\circ$ 为 $2! \cdot \sigma_c^{(2)}_{\text{自然}}$

在图 1 中电离截面的极小值并不为零。这是因为对线偏振光, 在跃迁过程中原子角动量的变化为



对于这三个不同的末态角动量, 跃迁几率之间不发生干涉, 相应总截面是对应各个不同末态角动量的分截面的迭加:

$$\sigma_{\text{th}}^{(2)} = \sigma_{S_{1/2}}^{(2)} + \sigma_{D_{3/2}}^{(2)} + \sigma_{D_{5/2}}^{(2)}.$$

对于每个分截面, 在跃迁矩阵元的变号点, 其值为零(即透明窗口)。但各分截面对应的跃迁矩阵元变号点不重合。因此它们迭加的结果使总截面的极小值不为零。

由于近年来准分子激光器的发展使得 Xe 原子双光子电离实验成为可能。同时在研究准分子激光时对于 Xe 原子双光子电离截面的数据也很感兴趣。McCown 等人采用 ArF 激光器测量了 193 nm 光子波长下 Xe 原子双光子电离截面^[10], 实验中光强范围在 20—146 MW/cm² 之间, 自然偏振, 线宽 0.52 nm。测得电离截面为 $4 \times 10^{-50} \text{ cm}^4 \cdot \text{s}$ 。而在此之前 Hodges 等人的测量结果为 $5 \times 10^{-52} \text{ cm}^4 \cdot \text{s}$ 。另外, McGuire 采用格林函数方法也曾计算了 Xe 原子双光子电离截面。作为计算比较复杂体系的尝试, 我们也计算了 Xe 原子双光子电离截面, 在我们的和 McGuire 的计算中, 对于理论计算能级位置和实验值的差别, 都采用平移光子能量的近似。在我们的计算中以第一电离阈值作为能量基准, 而在 McGuire 的计算中则分别采用第一、第二电离阈值作为能量基准。因此在他的计算中对应第二电离阈值出现一个阶梯(参见图 2)。为了和实验比较, 我们还计算了自然偏振光的双光子电离截面, 得出的结果为 $6 \times 10^{-50} \text{ cm}^4 \cdot \text{s}$, 但如果考虑统计因子的影响, 理论值应该乘以 2!, 则对应的电离截面为 $12 \times 10^{-50} \text{ cm}^4 \cdot \text{s}$, 理论值大于实验值。这是由于在 193 nm 附近双光子吸收的末态电子处于自电离能域, 因而要受自电离共振结构的影响。但我们的计算中没有考虑自电离共振结构, 因此计算值相当于自电离共振结构的平均, 利用实验的能级数据^[19] 通过简单分析可得知在 193 nm 附近入射激光线宽范围处于自电离共振态旁边的窗口处(即靠近极小值的位置), 相应其电离截面应该小于平均值, 所以计算值大于实验值是可以理解的。如果要使计算结果可以直接和实验值比较, 需采用多通道量子数亏损理论来分析自电离共振结构^[13], 这是我们进一步打算探索的工作。

感谢本所计算技术应用组、中国科学院计算中心的同志们在工作上给予的帮助, 以及梁晓玲同志提供的有关矩阵元的数据。

参 考 文 献

- [1] J. E. Rothenberg, J. F. Young and S. E. Harris, *Opt. Lett.*, **6**(1981), 363.
- [2] 如: S. N. Dixit, P. Lambropoulos, *Phys. Rev.*, **A27**(1983), 861.
- [3] 如: A. Declémy, A. Rachman, M. Jaouen, G. Laplanche, *Phys. Rev.*, **A23** (1981), 1823.
- [4] T. N. Chang, R. T. Poe, *Phys. Rev.*, **A16**(1977), 606; (M. S. Pindzola, A. B. Chen and B. Ritchie, *J. Phys.*, **B14**(1981), 209.

- [5] J. Morellec, D. Normand, G. Mainfray and C. Manus, *Phys. Rev. Lett.*, **44**(1980), 1394.
- [6] H. B. bebb, *Phys. Rev.*, **149**(1961), 25.
- [7] M. R. Teague, P. Lambropoulos, D. Goodmanson and D. W. Morcross, *Phys. Rev.*, **A 14**(1976), 1057.
- [8] A. Rachman, G. Laplanche and M. Jaouen, *Phys. Lett.*, **68 A**(1978), 433.
- [9] R. V. Hodges, L. C. Lee and J. T. Moseley, *Int. J. Mass Spectrom. Ion. Phys.*, **39**(1981), 133.
- [10] A. W. McCown, M. N. Ediger and J. G. Eden, *Phys. Rev.*, **A 26** (1982), 3318.
- [11] E. J. McGuire, *Phys. Rev.*, **A 24**(1981), 835.
- [12] F. Sanchez, *Nouvo Cimento*, **B 27**(1975), 305.
- [13] 李家明, 物理学报, **32**(1983), 845.
- [14] 李家明, 赵中新, 物理学报, **30**(1981), 105.
- [15] Y. Aharonov, C. K. Au, *Phys. Rev.*, **A 20**(1979), 1553.
- [16] M. 玻恩, E. 沃耳夫, 光学原理, (中译本), 科学出版社, (1978), § 10. 8. 3.
- [17] F. Bassani, J. J. Forney, A. Quattropani, *Phys. Rev. Lett.*, **39**(1977), 1070.
- [18] G. Laplanche, A. Durrieu, Y. Flank, M. Jaouen, A. Rachman, *J. Phys.* **B 9** (1976), 1263.
- [19] C. E. Moore, Atomic Energy Levels, Natl. Bur. Stand. (U. S.), (1958), Vol. III.

THEORETICAL CALCULATIONS OF ATOMIC TWO- PHOTON IONIZATION PROCESSES

WU YING-JIAN LI JIA-MING

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

Based on a Hartree-Slater self-consistent theory, we calculate two-photon ionization cross-sections of Cs and Xe as illustrative examples. Our theoretical method can easily be applied to calculate other types of two-photon transitions and can also be extended to calculate higherorder multiphoton ionization processes. Comparing our theoretical results with available experimental data and other theoretical results, we can discuss the validity of our theoretical method. For two-photon ionization processes of alkali atoms (e.g. Cs), our results are in good agreement with recent accurate experimental measurements.