

原子内壳层光电过程的电子关联作用*

巫英坚 李家明

中国科学院物理研究所

1988年9月28日收到

从 Hartree-Slater(H-S) 自洽场理论出发, 考虑了 H-S 自洽场理论所忽略的残余作用. 以 Ne 原子和 Ne^+ 离子 K 壳层近阈光电离截面及其比值的计算为例, 讨论了残余作用的影响, 并和实验进行了比较.

一、引 言

原子光电离截面的研究, 可以提供原子内多体相互作用的信息, 因而不论是实验或理论的研究, 均引起人们极大的兴趣. 60 年代末 Fano 等人已总结了中性原子光电离截面的特性^[1]. 随着激光技术和核聚变研究的发展, 人们也开始了激发态和离化态原子光电离截面的研究, 比如中性原子及其不同离化度离子系列的内壳层光电离截面的计算等^[2,3].

由于原子或离子的最外层电子被剥去以后, 近核的内壳层电子波函数变化不大, 因此中性原子及其不同离化度离子系列的内壳层光电离截面具有很相似的随光子能量变化的曲线^[2-4], 中性原子和其各离化度离子的截面之比是随光子能量缓变的函数 (或几乎为常数)^[4]. 了解这种比值的变化有助于我们从中性原子内壳层光电离截面的特性, 探索各离化度离子内壳层光电离截面的规律, 具有很大的实用价值.

对于光电离截面的计算, 自洽场理论以其计算量较小, 并能在一定的精度内描述原子光电离时大多数的多体相互作用效应等优点而得到广泛的应用. 对于高能光电子, H-S 自洽场理论^[5,6]是很好的近似, 可以在较大的光子能量变化区域内系统地探索光电离截面的变化规律^[4]. 但当光子能量接近阈值区域时, H-S 自洽场理论所忽略的残余作用的影响将越来越明显. 其中一个重要的效应就是中性原子及其不同离化度离子系列内壳层光电离截面的比值在阈值附近出现振荡结构, 其原因是自洽势在库仑尾部修正的连接处^[6]导数不连续. Kuang 等人^[7]曾对自洽势进行了修正 (包括将连接处的导数不连续抹平, 或采用在远程自动趋于库仑尾部的内壳层空穴势, 即内壳层电子电离以后的相应离子组态的自洽势), 使截面之比的振荡结构基本消失. 我们工作的主要兴趣是建立超越自洽场理论的计算方法, 在计算中考虑残余作用的影响, 使之适用于残余作用不可忽略的区域, 从而根据不同的计算目的形成自洽场-超越自洽场的计算体系. 在自洽场-超越自洽场计算框架下, 当考虑了残余作用的影响以后, 原子的相互作用势将趋于严谨. 这时从理论上

* 国家自然科学基金和中国科学院院长基金资助的课题.

来说光电离截面的比值不应该再有振荡结构出现,因而为在阈值附近光电离截面比值的计算提供了一个检验超越自洽场计算的实例.

我们以 Ne 原子和 Ne^+ 离子 K 壳层电子光电离截面的计算为例,探索了连续态超越自洽场的计算. 我们首先从 H-S 自洽场近似出发,计算了 Ne 原子和 Ne^+ 离子 K 壳层电子光电离截面及其比值,发现比值存在振荡结构. 残余作用的另一影响是末态 K 壳层空穴对于连续电子的吸引作用. 这部份残余作用的影响在 H-S 自洽场近似中不能体现,其结果是自洽场计算的光电离截面在阈值附近出现一个极大值结构. 在计算中考虑了连续态的超越自洽场以后,该极大值结构消失,光电离截面之比的振荡结构基本抹平. 我们将计算结果与现有的实验进行了比较,并作了相应的讨论.

二、理论计算方法

本文的计算在非相对论层次下,自旋无关的非相对论原子的总哈密顿量为(采用原子单位):

$$H_a = \sum_i (p_i^2/2 - Z/r_i) + \sum_{i < j} 1/r_{ij}. \quad (1)$$

遵循我们的自洽场-超越自洽场计算体系,我们可以把原子的总哈密顿量写为

$$H_a = H_{H-S} + V. \quad (2)$$

其中

$$H_{H-S} = \sum_i (p_i^2/2 + V_{scf}) \quad (3)$$

为 H-S 自洽场近似的原子总哈密顿量^[5,6].

$$V = \sum_i - (V_{scf} + Z/r_i) + \sum_{i < j} 1/r_{ij} \quad (4)$$

为残余作用算符. 它由两部份组成,即等号右端第一项的单电子算符和第二项的双电子算符,为非相对论原子总相互作用和 H-S 自洽势之差. 由于残余作用算符含有双电子算符,因而残余作用势为非局域势. 又因 H-S 自洽场近似中的库仑尾部修正,使残余作用势为短程势. 短程势对于高能电子的影响将趋于零,故残余作用矩阵元为能量的缓变函数且随能量的增加而趋于零.

在得到残余作用 V 以后,可以采用组态相互作用理论探索束缚态^[9]和连续态的超越自洽场计算. 这里简要介绍连续态的超越自洽场计算. 在原子的一组相同总角动量 LS 和宇称构成的对称块中,高度激发的价电子和剩余离子实电子之间可以具有不同的偶合方式. 这些不同的偶合方式构成了不同的分解通道^[9,10]. 例如 Ne 原子 K 壳层光电离末态的电子偶合为 $1s2s^22p^6(^1S)\epsilon p^1P$, 为单通道问题. 对于单通道情况,精确的原子连续态波函数可写为相应单通道组态波函数的线性组合

$$\Psi_E = \oint a_E' \Phi_E' dE'. \quad (5)$$

其中包括对于束缚态的求和. 由文献[1,11,12]可知,展开系数可以用矩阵来描述

$$a_{E'} = \left\{ \frac{P}{E - E'} \langle E' | K | E \rangle + \delta(E - E') \right\} / [1 + (\pi K_{EE})^2]^{1/2}. \quad (6)$$

其中 P 表示主值积分. 本文中称矩阵 $\langle E' | K | E \rangle$ 为 K 矩阵. 它是一个实矩阵, 且满足方程

$$\langle E' | K | E \rangle = P \int dE'' \frac{\langle E' | V | E'' \rangle \langle E'' | K | E \rangle}{E - E''} + \langle E' | V | E \rangle. \quad (7)$$

而连续态的波函数

$$\psi_E = \left\{ P \int dE' \Phi_{E'} \frac{1}{E - E'} \langle E' | K | E \rangle + \Phi_E \right\} / [1 + (\pi K_{EE})^2]^{1/2}. \quad (8)$$

其中 $K_{EE} = \langle E | K | E \rangle$, ψ_E 中连续态电子的能量归一径向波函数 $P_E(r)$ 的渐近行为^[22]

$$P_E(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{2/\pi k} \times \sin(kr + \eta \ln 2kr - \pi l/2 + \sigma^C + \pi \mu_{scf} + \Delta), \quad (9)$$

其中 $k = (2e)^{1/2}$, e 为连续态电子轨道能, $\eta = Z_i/k$ ($Z_i = Z - N + 1$), $\sigma^C = \text{Arg} \Gamma(l + 1 - iZ_i/k)$ 为库仑相移, $\pi \mu_{scf}$ 为 H-S 自洽场计算的短程相移. 而 $\Delta = -\tan^{-1} \times$

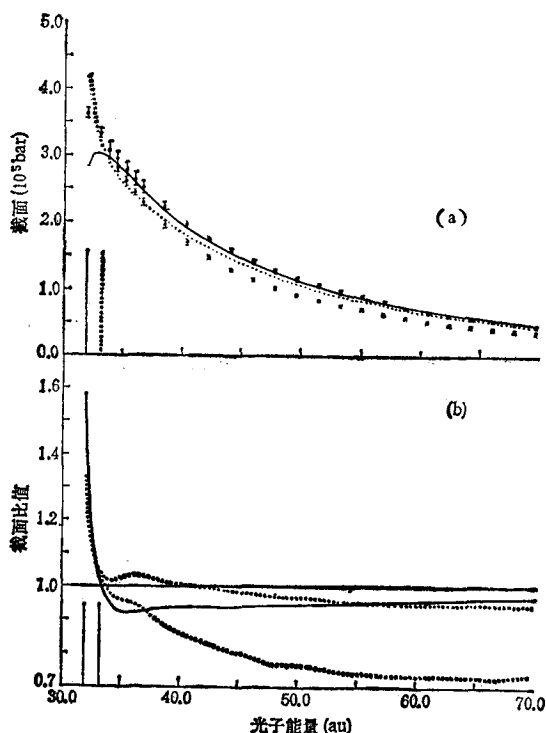


图1 Ne 原子K壳层光电离截面 两竖线分别代表 Ne 原子K壳层电离阈值(较低的)和K壳层相关震激和震离过程的阈值. (a)中实线为自洽场计算结果,虚线为超越自洽场计算结果,点为实验结果,上行为K壳层总截面(含震激和震离),下行为K壳层单电子光电离截面,在震激和震离阈值以下两线重合; (b)中实线为超越自洽场计算结果/自洽场计算结果,虚线为K壳层总截面(含震激和震离)/自洽场计算结果(上行),以及K壳层单电子光电离截面/自洽场计算结果(下行)

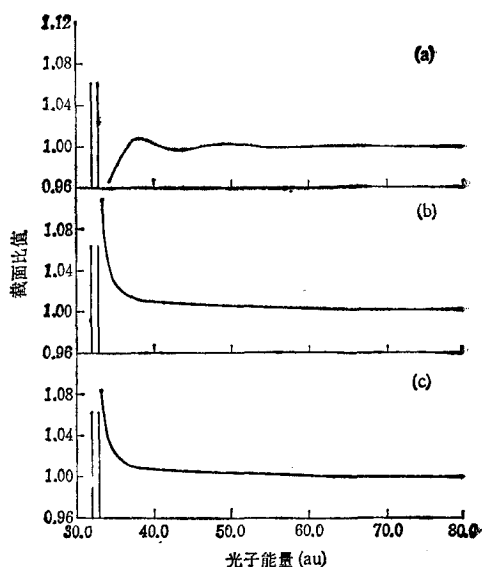


图2 Ne 原子和 Ne⁺ 离子K壳层近阈光电离截面的比值 (Ne⁺/Ne) 两竖线代表电离阈值,较低的为 Ne 原子. (a) 为自洽场近似计算结果; (b) 为初态超越自洽场计算结果; (c) 为末态超越自洽场计算结果

(πK_{EE}), Δ 反映了 K 矩阵的物理意义, 说明残余作用对于连续态波函数的影响是使其相移产生修正, 修正量和 K 矩阵在能壳上的值有关, 而 K 矩阵在能壳外的值反映了组态之间的混合程度. 上述理论计算方法也可方便地推广到多通道的计算.

在偶极近似下, 长度规范的原子光电离截面为

$$\sigma = (2\pi)^2 \alpha \omega_k \frac{1}{3g_A} \sum_{L_B} |\langle A || r || B \rangle|^2. \quad (10)$$

其中 α 为精细结构常数. 末态原子波函数采用能量归一. 考虑初态平均末态求和, $g_A = 2L_A + 1$ 为统计权重因子, ω_k 为光子能量, $|A\rangle$, $|B\rangle$ 分别为初末态的原子波函数. 将不同层次的原子波函数代入(10)式, 即可得不同近似层次下, 原子光电离截面的计算公式.

对于原子连续态的超越自洽, 原子分成激发的价电子和剩余离子实(在本文计算中为 K 壳层空穴离子实)的相互作用系统, 其残余作用矩阵元包括以下几个部分:

$$\text{离子实} \cdot \text{离子实} + \text{离子实} \cdot \text{价电子} + \text{离子实} \cdot \text{价电子}$$

其中第一项反映了剩余离子实电子体系的超越自洽. 它的影响将改善价电子电离阈值的计算结果. 我们可以近似忽略第一项的贡献, 而以实验的电离阈值代入计算. 相应的剩余离子实体系的波函数则近似地以剩余离子实电子体系的单组态波函数表示, 即冻结态近似. 这时初末态的剩余离子实波函数相同, 为单通道情形, 没有考虑剩余离子实激发通道的影响, 如震激和震离. 所以, 我们的计算为单通道层次的超越自洽场计算.

图 1 表示 Ne 原子 K 壳层光电离截面的单通道理论计算结果. 此结果并和实验^[13,14]进行了比较, 在高能区域, 自洽场和超越自洽场的计算结果均与实验的总光电离截面相符合, 而在阈值附近, 自洽场计算的光电离截面存在一极大结构, 超越自洽场的计算结果则和实验符合较好. 下面我们将对单通道理论计算结果作进一步的讨论.

三、计算结果与讨论

我们应用单通道理论分别计算了 Ne 原子和 Ne^+ 离子 K 壳层光电离截面. 图 2 示出 Ne 原子和 Ne^+ 离子 K 壳层光电离截面的比值. 从图 2(a) 可以看出自洽场计算的比值在靠近阈值区域存在振荡. 考虑了末态超越自洽场以后, 其比值则不存在振荡(见图 2(b)). 在接近阈值时, 由于超越自洽场计算的电离截面增大, 使得比值也出现增大. 图 2(c) 为同时采用超越自洽场初末态波函数的计算结果, 目的是想探索初态电子关联作用对于光电离截面计算的影响. 结果表明, 初态电子关联作用, 使 K 壳层光电离截面在阈值附近的增大值略有减小, 相应截面比值的上升也略缓了一些. 本文计算表明, 对于 Ne 原子和 Ne^+ 离子的光电离截面的影响, 主要是由于残余作用对末态的连续波函数产生校正而形成的.

我们进一步讨论 Ne 原子 K 壳层光电离截面的单通道理论计算结果, 即当入射光子能量在 K 空穴离子实的激发阈值以下时, 单通道理论计算的电离截面即实际的 Ne 原子 K 壳层光电离截面. 图 1 显示出实验光电离截面与超越自洽场的计算结果符合较好. 而

自洽场计算结果在阈值处产生极大的原因是由于K壳层光电离末态空穴对于价电子的吸引。该吸引在能量接近阈值时有很大的影响,但自洽场近似的基础是独立电子模型,不能反映这种吸引,所以在阈值附近自洽场计算的轨道波函数相对实际情况要向外推一些,使光电离截面的极大值向高能移动到阈值以上。末态超越自洽场的计算包含了K空穴的吸引作用,因而使自洽场计算的光电离截面的极大消失。在入射光子能量足够高使突变近似可以适用的能域,我们的理论计算结果对应实际的K壳层总光电离截面,即包括震激和震离的截面^[15]。同时,在高能区域残余作用的影响较小。所以在图1的高能区域,自洽场和超越自洽场的计算结果与实验K壳层总光电离截面基本重合,而且实验值更接近超越自洽场的计算结果。从Ne原子的实验结果可以发现,在K壳层相关的震激和震离阈值以上,多电子过程(震激和震离)的截面占总电离截面的百分之二十几,这时相应理论计算应该考虑震激和震离通道以及其它通道的影响。因而我们目前的单通道计算结果在此能域内还不能直接和实验比较。关于应用多通道相互作用理论计算该能域的光电离截面,还有待于进一步的工作。

本工作还部分地得到了中国科学院与美国 NSF 协作项目 (INT-8617461) 的资助。作者感谢 Pittsburgh 大学 Pratt 教授在计算上提供的方便和有益的讨论。

- [1] U. Fano and J. W. Cooper, *Rev. Mod. Phys.*, **40**(1968), 441.
- [2] D. J. Botto, J. McEnman and R. H. Pratt, *Phys. Rev.*, **A18**(1978), 580.
- [3] R. F. Reilman and S. T. Manson, *Phys. Rev.*, **A18**(1978), 2124.
- [4] 刘 磊、全晓民、李家明, *物理学报*, **37**, (1988), 1800.
- [5] F. Herman and S. Skillman, *Atomic Structure Calculations*, (Prentice-Hall Inc. Englewood Cliffs. N. Y. 1963).
- [6] 李家明、赵中新, *物理学报*, **30**(1981), 105.
- [7] Y. Kuang, R. Pratt, Y. Wu, I. Stein, I. Goldberg and A. Ron, "Problems with IPA Latter Tail Potentials in Neutral and Ionic Photoeffect Calculation", to be published in *J. De Physique. Proceedings of the 14th International Conference on X-Ray and Inner-Shell Processes*, Paris, France, Sep. (1987), p. 14.
- [8] 赵中新、李家明, *物理学报*, **34**(1985), 1469.
- [9] 李家明, *物理学报*, **29**, (1980) 419.
- [10] 李家明, *物理学报*, **32**, (1983), 84.
- [11] A. F. Starace, *Phys. Rev.*, **A2**(1970), 118.
- [12] C. D. Lin, *Phys. Rev.*, **A9**(1974), 171.
- [13] F. Wuilleumier and M. O. Krause, *Phys. Rev.*, **A10**(1974), 242.
- [14] F. Wuilleumier, *Adv. X-Ray Anal.*, **16**(1973), 63.
- [15] C. S. Fadley, *Chem. Phys. Lett.*, **A25**(1974), 225.

CORRELATION INTERACTION IN ATOMIC INNER SHELL PHOTOELECTRIC EFFECT

WU YING-JIAN LI JIA-MING

Institute of Physics, Academia Sinica

(Received 28 September 1988)

ABSTRACT

Based on the Hartree-Slater self-consistent field theory, we consider the residual interaction which is omitted in obtaining the Hartree-Slater self-consistent field in previous calculation. We calculate the near threshold photoionization cross sections of K-shell of atomic Ne and Ne^+ ion and the cross section ratios as examples. We discuss the effects of residual interaction and compare our results with experiments.