第 40 卷 第 12 期
1991 年 12 月

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 40, No. 12
Dec., 1991

原子体系近核区电子波函数振幅（I）*

离化态原子高能光电离过程

刘 磊 李家明
中国科学院物理研究所，北京，100080
1991 年 1 月 21 日收到

本文具体地阐述近核区波函数和高能光电离截面的关系．根据相对论自洽场理论，计算各种离化态铁原子和铀原子的近核区波函数和光电离截面．计算结果表明：光电离截面比值函数随着光子能量的增加规则平缓变化，在光子能量约大于 10^1keV 以后，其和相应的近核区波函数振幅平方比的精度在千分之几的范围内．

PACC: 3280F; 3130G

一、引 言

光电离过程是X射线在物质中输运的重要物理过程．有关光电离截面的研究一直是人们感兴趣的课题[1-3]．我们曾经对各种离化态铁原子的光电离截面进行了非相对论性和相对论性的理论计算，讨论了光电离过程的相对论效应；并阐明离化态铁原子的光电离截面随电离度变化的规律．研究结果表明，离化态原子各壳层光电离截面随光子能量有着丰富的变化，但有趣的是，不同电离度原子的同一壳层（无论占有的内壳层或占有的外壳层）光电离截面的比值却是光子能量的缓变函数，并且随着光子能量的增加而趋于常数值[3]．本文即着重讨论该常数值和近核区电子波函数振幅．根据独立电子的物理图象，原子中所有电子可认为是各自独立地在一个共同的原子自洽势中运动[4,5]．光电离过程就是原子中的电子吸收光子而从某占有的束缚态跃迁到连续态的物理过程[3,6]．在高能光电离过程中，动量转移很大，由测不准原理可知该过程发生在近核短程区域．根据非相对论性光电离理论，由于非相对论性能量-动量关系，动量转移随光子能量的增加而大于并趋于无穷，因此光电离矩阵元的主要积分区域随光子能量的增加而不断缩小，趋于核附近任意小的尺度内．于是，离化态原子某壳层的高能光电离截面 σ 应等于该壳层电子占有数 ω，约化归一因数 N 的平方和相应的类氢离子光电离截面 σ_c 的乘积，即 $\sigma=\omega N^2\sigma_c$[7]．（将在第二节作进一步阐明．）这里 σ_c 可解析计算．根据相对论性光电离理论，由于相对论能量-动量关系，动量转移随光子能量的增加而大于并趋于有限值 mc，因此光电离矩阵元的主要积分区域随光子能量的增加而趋于核附近电子康普顿波长 λ_0 尺度的有

* 国家自然科学基金和中国科学院与美国 NSF 项目（INT-8913043）资助的课题．

限区域(而不是 $r=0$). 因为对于高 Z 原子，原子尺度($\hbar^2/Zme^2=137\lambda_c/Z$) 已可与电子康普顿波长 λ_c 相比，因此，根据相对论性理论，需对非相对论的结果进行修正(该修正为相对论屏蔽修正因数 S)[7]，即 $\sigma=\omega N^2\sigma_c S$. 对于不同电离度 q 原子的某一占有壳层 i 其光电离截面 σ_i^q 与相应中性原子的光电离截面 σ_i^0 之比定义为该壳层光电离截面比值函数 R_i^q[3]. 在高能区域，1）根据非相对论性光电离理论，$R_i^q=(N_i^q/N_i^0)^2$；2）根据相对论性光电离理论，$R_i^q=(N_i^q/N_i^0)^2(S_i^q/S_i^0)$. 本文应用相对论自洽场理论方法，具体地计算各种离化态铁原子和铀原子占有壳层的约化归一因数和光电离截面，计算结果表明，高能光电离截面比值函数和相应的约化归一因数平方比精度在千分之几的范围内；说明 S_i^q/S_i^0 的修正量仅在千分之几以内. 因而明确了利用约化归一因数计算高能光电离截面比值函数的可行性和适用范围.

二、理论方法与计算结果

在独立电子的物理图象下，原子中的电子各自独立地在一个自洽场中运动，光电离过程就是原子吸收光子而使某个占有壳层上的电子跃迁到连续态的物理过程[1-3]. 根据微扰理论，如采用非相对论电偶极近似处理，光电离过程的矩阵元(在本文中除特别说明外均采用原子单位)为[8]

$$M=-(2\pi k)^{1/2}\int d\boldsymbol{r}\phi_f^*\mathbf{D}\cdot\epsilon\phi_i, \tag{1}$$

式中 k 和 ϵ 分别为光子的波矢和极化矢量，ϕ_i,ϕ_f 分别为非相对论性初、末态波函数，i 表示初态电子壳层. 光电离截面可由下式求出：

$$\sigma_i=(1/2\pi)^2\omega_i\int d\boldsymbol{p}|M|^2\delta(E), \tag{2}$$

式中 σ_i 为 i 壳层光电离截面，ω_i 为该壳层电子占有数. $\delta(E)$ 表示能量守恒定律，

$$E=p^2/2m-\hbar ck-\varepsilon\equiv p^2/2-k/\alpha-\varepsilon=0, \tag{3}$$

式中 p 为末态电子动量，k 为光子波矢，ε 为初态电子能量，α 为电子精细结构常数. 对于高能光电离过程，由于动量转移很大，根据测不准原理可知该过程发生在近核短程区域，即(1)式的主要积分区域在近核短程区. 由非相对论性能量-动量关系，动量转移 $|\boldsymbol{\Delta}|=|\mathbf{D}-\boldsymbol{k}|\geqslant|p-k|=|(2k/\alpha+2\varepsilon)^{1/2}-k|\to\infty(k\to\infty)$. 因此，高能光电离过程矩阵元的主要积分区域将随光子能量的增加而不断缩小；即在高能极限，光电离过程的矩阵元仅决定于初、末态波函数在核附近任意小尺度内的形式. 在这样的尺度内，原子屏蔽势表现为相应的库仑势(电荷数为其相应的原子序)，高能末态连续轨道波函数 ϕ_f 因为光电子能量高不随离化度变化，与相应的库仑波函数 ϕ_f^C 一致；初态波函数 ϕ_i 和相应壳层的库仑波函数 ϕ_i^C 具有相同的波形，即

$$\phi_i^q\to N_i^q\phi_i^C\qquad(r\to 0), \tag{4}$$

式中 q 表示原子的电离度，N_i^q 定义为 ϕ_i^q 的约化归一因数. 这里 ϕ_i^C 可解析计算，因此 N_i^q 代表离化态原子近核区电子波函数振幅. 根据(1)，(2)和(4)式，在高能区域有

$$\sigma_i^q=\omega_i^q(N_i^q)^2\sigma_i^C \tag{5}$$

式中 ω_i^q 为壳层 i 电子占有数，σ_i^q 和 σ_i^C 分别为离化态原子和相应的类氢原子的光电离截面。即，在采用非相对论电偶极近似处理的情况下，离化态原子的高能光电离截面等于该壳层电子占有数，约化归一因数的平方和相应的类氢离子光电离截面的乘积。

在相对论性的理论处理中，光电离过程的矩阵元为[6,7]

$$M = -(2\pi/k)^{1/2}\int d\boldsymbol{r}\phi_f^*\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\epsilon}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\phi_i, \tag{6}$$

式中 $\boldsymbol{\epsilon},\boldsymbol{k}$ 分别为光子的极化矢量和波矢，ϕ_i，ϕ_f 分别为相对论性束缚初态波函数和连续末态波函数(即旋量波函数)。根据相对论性能量-动量关系，能量守恒定律表示为

$$\begin{aligned} E &= (p^2c^2 + m^2c^4)^{1/2} - \hbar ck - \varepsilon \\ &= (p^2/\alpha^2 + 1/\alpha^4)^{1/2} - k/\alpha - \varepsilon = 0 \end{aligned} \tag{7}$$

式中初态电子能量 ε 包括电子的质能。此时动量转移 $|\boldsymbol{\Delta}| = |\boldsymbol{p} - \boldsymbol{k}| \geqslant |p - k| \to \alpha\varepsilon \approx 1/\alpha(k \to \infty)$。因此，在高能极限只有近核 α(au)(即电子康普顿波长 λ_e)的区域对光电离过程矩阵元的积分有贡献，即光电离矩阵元的主要积分区域随光子能量的增加而趋于核附近电子康普顿波长(λ_e)尺度的有限区域(而不是 $r = 0$)。由于原子的尺寸为 $\hbar^2/Zme^2 = \lambda_e/\alpha Z$，对高 Z 原子其已逐渐可与 λ_e 相比，因此在近核 λ_e 的尺度内，原子屏蔽势和相应的库仑势之间存在着很小但却不能忽视的差别。所以，根据相对论性理论，需对非相对论的结果进行修正(该修正为相对论屏蔽修正因数 S)[7]，即

$$\sigma_i^q = S_i^q\omega_i^q(N_i^q)^2\sigma_i^C. \tag{8}$$

相对论屏蔽修正因数 $S_i^q \gtrsim 1$，它可以应用解析微扰理论估算[7]，也可以利用已有的高能光电离截面的数值计算结果由(8)式反推估算。对中性原子 ns 和 np 壳层光电离截面的研究结果表明，对于原子序高电子数多的原子及外壳层，相对论屏蔽修正因数的修正量(即 $S_i^q - 1$)较大，可达百分之几；对于原子序低电子数少的原子及内壳层，相对论屏蔽修正因数的修正量较小，为千分之几[7]。这说明：外屏蔽作用不改变内壳层波函数的波形，对 S_i^q 起作用的主要是内屏蔽作用；原子序高相对论效应显著，电子数多屏蔽效应显著。具体地说，对于固定的原子序，复合量子数 κ 相同(即轨道角动量和总角动量相同)的壳层中，主量子数大的壳层感受到的内屏蔽作用较大，因而 S_i^q 较大；同样，主量子数相同的壳层中，总角动量大的壳层的 S_i^q 较大；主量子数和总角动量相同的壳层中，轨道角动量大的壳层的 S_i^q 较大。对于固定的壳层，ns($n \leqslant 5$) 和 $2p_{1/2}$ 壳层的 S_i^q 先随原子序的增大而增大，达到极值后随原子序的增大而减小；其它壳层的 S_i^q 随原子序的增大而增大，对于高 l 壳层和离化态原子还没有具体的结果，但从已有结果的趋势上看，高 l 壳层的相对论屏蔽修正因数的修正量应较大，因为其感受到的内屏蔽作用较大。对于 S_i^q 随电离度 q 的变化将在下面进行讨论。

根据以上讨论，定义离化态原子占有壳层的光电离截面比值函数为

$$R_i^q = (\sigma_i^q/\omega_i^q)/(\sigma_i^0/\omega_i^0), \tag{9}$$

其随着光子能量的增加而趋于常数值[3]。根据(5)和(8)式可知，该常数值为

$$R_i^q(\text{高能极限}) = R_{ni}^q\cdot R_{si}^q, \tag{10}$$

式中 $R_{ni}^q = (N_i^q/N_i^0)^2$；根据非相对论理论 $R_{si}^q = 1$；根据相对论理论则 $R_{si}^q = S_i^q/S_i^0$。根据下面的计算结果和讨论，$S_i^q/S_i^0 \approx 1$。也就是说，在(10)式中 R_{ni}^q 项占主导地位。因此，

可以利用约化归一因数方便地计算高能光电离截面比值函数，从而可在中性原子光电离截面的基础上，定量掌握离化态原子的光电离截面.

根据相对论自洽场理论方法[5]，计算离化态铁原子和铀原子各占有壳层的光电离截面[3]和约化归一因数. 结果列于表 1 和表 2. 对于中性原子，表中列出其单电子光电离截面 σ 和约化归一因数的平方 $(N_i^0)^2$. 对于离化态原子，则列出其光电离截面比值函数 R_i^q 和相应的约化归一因数的平方比 R_{ni}^q；离化态原子的单电子光电离截面可以简单地由比值函数乘以相应的中性原子的单电子光电离截面求出. 表中的 F_n 值由下式定义（Z 为原子序）:

$$F_n = \sigma/\sigma_0 = \sigma/(2\pi\alpha^7 Z^5/k), \tag{11}$$

而 F_p 为相应的高能极限值[6]. 由(8)式，

$$F_p = S_i^q (N_i^q)^2 \sigma_i^C(\text{渐近})/\sigma_0 = S_i^q (N_i^q)^2 \mathscr{N}_i^{C4} P_i^C, \tag{12}$$

式中 $\mathscr{N}_i^C$ 为 i 壳层库仑波函数在近核区的振幅. 对于复合量子数 $\kappa < 0$ 的壳层[9]，

$$\begin{aligned}\mathscr{N}_i^C = {} & [(2\alpha\lambda)^{\gamma+1/2}/\Gamma(2\gamma+1)][(Z/\alpha\lambda) - n - 2\kappa] \\ & \cdot \{[(1+\varepsilon\alpha^2)\Gamma(2\gamma+n+\kappa+1)]/[4(Z/\alpha\lambda) \\ & \cdot ((Z/\alpha\lambda) - \kappa)(n+\kappa)!]\}^{1/2}\end{aligned} \tag{13}$$

式中 $\lambda = (m^2c^4 - \varepsilon^2)^{1/2}$，$\gamma = (\kappa^2 - (Z\alpha)^2)^{1/2}$，而 ε 为 i 壳层电子能量. 对于 ns($\kappa = -1$) 壳层，P_i^C 对 $a = \alpha Z$ 的展开式为[7]

$$\begin{aligned}P_i^C = {} & [\exp(-\pi a)\alpha^{a\nu+1}/(4a^3)]\{1 - 4\pi a/15 + a^2[-139\pi^2/720 \\ & + 8(1-\alpha^2\varepsilon)/(3a^2) + 373729/150000] + \pi a^3[77\pi^2/720 \\ & - 296(1-\alpha^2\varepsilon)/(315a^2) - 310769/328125] + \cdots\}.\end{aligned} \tag{14}$$

而 S_i^q 对于 1s 壳层约等于 1.

表 1　中性铁原子单电子光电离截面 σ，约化归一因数平方 $(N_i^0)^2$，以及离化态铁原子光电离截面比值函数 R_i^q 和相应的约化归一因数平方比 R_{ni}^q(表中 $F_n = \sigma/(2\pi\alpha^7Z^5/k)$，$F_p$ 为相应的高能极限值[6](参见正文)，i,q,E 分别表示壳层，电离度和光子能量)

i	q	E(keV)	10	20	40	60	80	100	∞	R_{ni}^q	$(N_i^0)^2$
$1s_{1/2}$	0	σ(b)	6929.5	104.0	138.2	40.79	16.94	8.532			0.969
		F_n						99.40			
		F_p						0.495	0.495		
	15	R_i^q	1.0024	1.0011	1.0008	1.0008	1.0007	1.0007		1.0008	
	22	R_i^q	1.026	1.014	1.010	1.009	1.009	1.009		1.010	
$3s_{1/2}$	0	σ(mb)	72838.0	11816.0	1683.4	512.5	216.7	110.4			0.351
	8	R_i^q	1.209	1.210	1.210	2.211	2.211	1.211		1.211	
	11	R_i^q	1.349	1.349	1.349	1.350	1.350	1.350		1.351	
	15	R_i^q	1.525	1.524	1.525	1.526	1.526	1.527		1.529	
$3p_{1/2}$	0	σ(mb)	12979.0	117.0	94.30	21.06	7.260	3.184			0.233
	8	R_i^q	1.291	1.294	1.295	1.296	1.296	1.296		1.297	
	13	R_i^q	1.609	1.616	1.621	1.622	1.623	1.624		1.627	
$3d_{3/2}$	0	σ(μb)	170668.0	7702.0		50.27		5.045			0.0426
	5	R_i^q	1.439	1.441		1.442		1.441		1.445	
	7	R_i^q	1.777	1.785		1.787		1.787		1.791	

表 2 中性铀原子单电子光电离截面 σ，约化归一因数平方 $(N_i^0)^2$，以及离化态铀原子光电离截面比值函数 R_i^q 和相应的约化归一因数平方比 R_{ni}^q（见表 1 说明）

i	q	E(KeV)	50	100	200	300	400	500	∞	R_{ni}^q	$(N_i^0)^2$
$1s_{1/2}$	0	σ(b)			176.1	63.10	31.29	18.62			0.987
		F_n				3.966	2.626	1.954			
		F_p				0.198	0.198	0.198	0.198		
	74	R_i^q			1.0003	1.0003	1.0003	1.0003		1.0002	
	88	R_i^q			1.009	1.008	1.008	1.008		1.006	
$3s_{1/2}$	0	σ(b)	115.6	23.89	4.522	1.699	0.862	0.517			0.708
	74	R_i^q	1.147	1.142	1.141	1.141	1.140	1.141		1.143	
	79	R_i^q	1.190	1.182	1.180	1.180	1.180	1.180		1.184	
	81	R_i^q	1.206	1.197	1.194	1.194	1.194	1.194		1.199	
$3p_{1/2}$	0	σ(b)	104.5	16.38	2.425	0.807	0.379	0.216			0.641
	64	R_i^q	1.051	1.051	1.052	1.052	1.052	1.053		1.054	
	74	R_i^q	1.150	1.151	1.153	1.155	1.155	1.156		1.161	
	79	R_i^q	1.196	1.198	1.201	1.202	1.203	1.204		1.211	
$3d_{3/2}$	0	σ(mb)	10465.0	797.8	62.75	15.10	5.750	2.800			0.406
	64	R_i^q	1.094	1.096	1.098	1.098	1.099	1.099		1.102	
	73	R_i^q	1.268	1.274	1.279	1.281	1.283	1.284		1.296	
$4s_{1/2}$	0	σ(b)	32.62	6.475	1.224	0.465	0.233	0.140			0.468
	45	R_i^q	1.153	1.153	1.153	1.153	1.153	1.153		1.153	
	55	R_i^q	1.260	1.258	1.258	1.258	1.258	1.258		1.259	
	61	R_i^q	1.327	1.324	1.324	1.324	1.324	1.324		1.326	
	63	R_i^q	1.348	1.345	1.345	1.345	1.345	1.345		1.347	
$4p_{1/2}$	0	σ(b)	27.00	4.297	0.644	0.216	0.102	0.058			0.403
	55	R_i^q	1.283	1.285	1.287	1.288	1.288	1.288		1.292	
	61	R_i^q	1.357	1.359	1.362	1.363	1.363	1.364		1.367	
$4d_{3/2}$	0	σ(mb)	2885.0	23.05	18.60	4.525	1.735	0.845			0.205
	45	R_i^q	1.294	1.300	1.303	1.304	1.304	1.305		1.308	
	55	R_i^q	1.493	1.504	1.511	1.514	1.515	1.516		1.525	
$4f_{5/2}$	0	σ(mb)	65.33	2.847	0.136	0.0255		0.0035			0.0558
	36	R_i^q	1.259	1.262	1.264	1.265		1.265		1.267	
	45	R_i^q	1.629	1.643	1.648	1.649		1.654		1.658	

从表 1 和表 2 中可以看出，在光子能量为 100keV（对铁）和 500keV 时(对铀)，F_n 和 F_p 还存在着不小的差别，说明光电离截面还没有达到高能极限。然而，光电离截面比值函数精度已在千分之几的范围内趋于稳定的常数值，呈现高能极限行为，因此可由(10)式描述。有趣的是，对于所有占有壳层(包括外壳层)，在光子能量降到低能区时，光电离截面比值函数随光子能量的变化依然很平缓。因此能够在中性原子光电离截面的基础上，根据光电离截面比值函数，方便地定量地描述各种离化态原子的光电离截面。我们的计算结果表明，对于不同电离度的低 Z（铁）或高 Z（铀）原子，其各占有壳层的光电离截面比值函数 R_i^q 和相应的约化归一因数的平方比 R_{ni}^q 精度均在千分之几的范围内。说明(10)式中 R_{ni}^q 起决定作用，R_{ni}^q 的修正量仅在千分之几以内(虽然 S_i^q 本身的修正量可达

百分之几). 这是由于 S_i^q 只反映电子屏蔽作用对电子波函数在电子康普顿波长 λ_e 尺度内的波形修正;对于一个固定的壳层,随着电离度的增大,当剥离其外壳层电子时,将几乎不改变该壳层所感受到的内屏蔽作用,对其波函数的波形影响很小,所以其相对论屏蔽修正因数 S_i^q 约等于中性原子的 S_i^0, 即 $R_{S_i}^q = S_i^q/S_i^0 \approx 1$. 有趣的是,根据计算结果,当剥离其自身壳层电子时, S_i^q 仍约等于中性原子的 S_i^0. 因此,在千分之几的精度内, 可以忽略(10)式中的 $R_{S_i}^q$, 由约化归一因数计算各种离化态原子的光电离截面比值函数,从而根据中性原子光电离截面, 方便地定量描述各种离化态原子的光电离截面. 将另文报道约化归一因数随电子壳层、原子序和电离度的变化规律[9].

三、总　　结

我们以高能光电离过程为例, 阐述了近核区电子波函数振幅 (约化归一因数) 和高能光电离截面的关系. 根据计算结果, 高能光电离截面比值函数和相应的约化归一因数平方比精度在千分之几的范围内. 因而明确了利用约化归一因数计算高能光电离截面比值函数的可行性和适用范围. 对于约化归一因数的重要性, 再作一些补充说明. 由于离化态原子的约化归一因数定量地反映电子的屏蔽作用对近核区电子波函数的影响, 该约化归一因数不仅与离化态原子的高能光电离过程有密切关系, 而且对于所有其它近核区电子波函数起主要作用的原子物理过程(如电子俘获,内转换,同位素位移等)都是有关的物理量.

[1] U. Fano, J.W. Cooper, *Rev. Mod. Phys.* **40** (1968), 441.
[2] R. H. Pratt, A, Ron, H. K. Tseng, *Rev. Mod. Phys.*, **45**(1973), 273.
[3] 刘磊、全晓民、李家明,物理学报, **37**(1988),1800.
[4] 李家明、赵中新,物理学报, **30**(1981),105.
[5] 李家明、赵中新,物理学报, **31**(1982),97.
[6] R, H. Pratt, *Phys. Rev.*, **117**(1960), 1017; *ibid.*, **119**. (1960) 1619.
[7] R. Y. Yin, O. V. Gabriel and R. H. Pratt, *Phys. Rev.* **A36**, (1987), 1207.
[8] 例如: I. I. Sobel'man, Introduction to the Theory of Atomic Spectra Pergamon Press, New York, (1972).
[9] 刘磊,李家明,本刊本期.

AMPLITUDES OF ELECTRONIC WAVEFUNCTIONS AT NUCLEI FOR ATOMS (I)

HIGH ENERGY PHOTOIONIZATION PROCESSES OF ATOMIC IONS

LIU LEI LI JIA-MING

Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing, 100080

(Received 21 January 1991)

ABSTRACT

Based on the atomic self-consistent-field theory, we have performed relativistic calculations for reduced normalization factors and photoionization cross sections of occupied shells of various ionized iron and uranium atoms. For photoionization cross sections of a specific subshell of an atom with various degrees ionization, their ratios at photon energies above about 10^1keV agree with the squares of the ratios of the corresponding reduced normalization factors within 1%.

PACC: 3280F; 3130G