

# Ne 原子的 1s 光电离及其 Auger 衰变过程的理论研究\*

王向丽 董晨钟† 桑萃萃

(西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

(2008 年 10 月 12 日收到, 2009 年 3 月 11 日收到修改稿)

利用基于多组态 Dirac-Fock 理论方法的研究原子结构和性质的程序 GRASP92 和 RATIP 以及最新发展的研究光电离和辐射复合过程的程序 RERR06, 研究了光子能量为 947.9 eV 时 Ne 原子的 1s 光电子谱及其相应的 Auger 衰变过程. 所得结果与其他的理论结果和实验结果符合得很好. 通过分析光电离伴随态  $Ne^+ 1s^{-1} 2p^{-1} ({}^1P) 3p$  的 Auger 衰变过程可知:  $3p$  旁观的 Auger 跃迁是主要的衰变机制,  $Ne^+ 1s^{-1} 2p^{-1} ({}^1P) 3p$  的 Auger 强度整体上大于  $Ne^+ 1s^{-1} 2p^{-1} ({}^3P) 3p$  的 Auger 强度. 同时, 也预言了光电离伴随态  $Ne^+ 1s^{-1} 2p^{-1} ({}^1P) 3p$  产生的  $Ne^+$ ,  $Ne^{2+}$  和  $Ne^{3+}$  末电离态离子的相对丰度分别为 0.02, 0.58 和 0.41.

关键词: 光电离, Auger 衰变, 多组态 Dirac-Fock 方法

PACC: 3280F, 3280H, 3120

## 1. 引言

洞原子(或离子)是指内壳层失去电子而形成处于激发态的原子(或离子), 它可以通过 K 俘获、内变换、光电离、电子或离子与原子或离子的碰撞形成, 也可以在高离化离子以适当速度与金属表面碰撞时通过多电子俘获形成<sup>[1]</sup>. 洞原子(或离子)广泛存在实验室等离子体和天体等离子体中, 是等离子体物理学、天体物理学和固体表面物理学的研究对象之一. 由于洞原子(或离子)处于不稳定的激发态, 它将通过辐射跃迁或非辐射跃迁(Auger 跃迁和 Coster-Kronig 过程)衰变直至稳态<sup>[2]</sup>. 通过对其退激发过程及末电离态离子分布进行理论研究, 不仅能获得相关原子(或离子)的内壳层电子的结构信息及退激发过程的动力学规律, 而且能很好地解释相关实验结果和各种等离子体过程中的离子态布居<sup>[3]</sup>, 同时也为热高离化态离子的储存和大分子获得电子裂解的研究<sup>[4, 5]</sup>提供理论支持.

近年来, 对洞原子(或离子)退激发的实验和理

论研究都已取得了很大的进展. 在实验方面, 随着符合技术的不断完善, 人们对 Auger 衰变过程的研究越来越深入和广泛<sup>[6]</sup>. Turri 等<sup>[7]</sup>利用角分辨符合电子光谱技术研究了关联效应对  $Ne 1s^{-1} 3p$  激发态的 Auger 级联过程的影响; Brünken 等<sup>[8]</sup>利用光电子-离子符合技术对  $Ar^+ 2s^{-1} 2p^{-1}$  和  $Kr^+ 3p^{-1} 3d^{-1}$  洞态的退激发通道进行了研究; Tamenori 等<sup>[9]</sup>将单频同步辐射加速器和符合技术结合起来研究了 Kr 原子的 M 壳层光电离末态经一系列退激发过程产生各种离化态 Kr 离子的丰度; Viefhaus 等<sup>[10]</sup>用角定位的电子-电子符合技术研究了  $Ar^+ 2p^{-1}$  洞态退激发过程中的  $L_{2,3}$ -MMM 双 Auger 跃迁. 在理论方面, Kochur 等<sup>[11]</sup>利用单组态 Hartree-Fock 近似方法计算了内壳层电子被电离的 Ne, Ar, Kr 和 Xe 离子的各退激发通道的分支比和 Shake 过程的概率, 并且用 Hartree-Fock-Pauli 近似方法计算了相关的能级和跃迁能; Fritzsche<sup>[12]</sup>利用多组态 Dirac-Fock(MCDF)方法计算了 Ne 原子  $1s \rightarrow 3p$  共振 KLL Auger 谱的角分布、能量和相对强度; El-Shemi 等<sup>[2]</sup>利用蒙特卡罗方法研究了 Ne, Ar, Fe, Kr, Xe 等原子的 1s 光电离末态退

\* 国家自然科学基金(批准号: 10774122, 10876028), 高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20070736001), 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心基金和西北师范大学科技创新基金(批准号: NWNK-KJXGC-03-21)资助的课题.

† 通讯联系人, E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

激发产生的末电离态离子分布;另外,我们利用辐射-单俄歇级联退激发模型研究了  $L$  壳层双洞态 Ar 离子的退激发及其末电离态离子分布<sup>[13]</sup>,利用辐射-单俄歇-双俄歇级联退激发模型研究了洞态 Ar 离子和单、双洞态 Mg 离子的退激发及其末电离态离子分布<sup>[3,14]</sup>,利用 MCDF 方法对 Ne 原子  $1s2s$  内壳层双激发态的激发和衰变过程及  $Cs^{3+} 4d$  内壳层激发态的衰变过程进行了理论研究<sup>[15,16]</sup>.目前,有关洞原子(或离子)的实验和理论研究主要集中在一步产生的洞态的衰变上.由于实验和理论上的困难,对电子关联效应非常敏感的光电离伴随态的光电离及相关的 Auger 过程的研究比较缺乏.

近来,Hikosaka 等<sup>[17]</sup>在实验上测得了 947.9 eV 光子能量下 Ne 原子的  $1s$  光电子谱及光电离伴随态的 Auger 衰变特性.本文利用基于 MCDF 方法的研究原子结构和性质的程序 GRASP92<sup>[18]</sup>和 RATIP<sup>[19,20]</sup>以及我们最新发展的研究光电离和辐射复合过程的程序 RERR06,计算了 947.9 eV 光子能量下 Ne 原子的  $1s$  光电子谱及各谱峰的位置和线宽,通过理论模拟光电离末态  $Ne^+ 1s^{-1}$  和伴随态  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1S^o P)$   $3p$  的 Auger 衰变通道,细致地研究了这两个态的 Auger 衰变过程.

## 2. 理论方法

### 2.1. 波函数和能级的计算

文献[18,21—23]中已有 MCDF 理论方法的详细描述,这里仅作扼要介绍.在 MCDF 方法中,任一原子态  $\alpha$  的波函数  $|\alpha(PJM)\rangle$  由具有相同  $P, J$  和  $M$  量子数的组态波函数  $|\Gamma_r(PJM)\rangle$  线性组合而成,即

$$|\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) |\Gamma_r(PJM)\rangle, \quad (1)$$

其中  $n_c$  是组态波函数的个数,  $C_r(\alpha)$  为第  $r$  个组态的混合系数.具体计算中,我们通过活动空间方法逐步扩大  $n_c$ ,可以对组态相互作用予以很好地考虑.  $|\Gamma_r(PJM)\rangle$  由所有单电子自旋轨道波函数  $\psi_{\kappa m}$  构成的  $N$  阶 Slater 行列式波函数线性组合而成.在中心力场近似下单电子的旋轨波函数表示为

$$\psi_{\kappa m} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{\kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \phi) \\ i Q_{\kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi) \end{bmatrix}. \quad (2)$$

其中  $n$  为主量子数,  $\kappa$  为相对论角量子数,相应于

$l = j \pm 1/2$ ,  $\kappa = \pm(j + 1/2)$ ,  $m$  为总角动量  $j$  的分量,  $P_{\kappa}(r)$  和  $Q_{\kappa}(r)$  分别为径向波函数的大小分量,  $\chi_{\kappa m}(\theta, \phi)$  为自旋球谐函数.

通过对角化由原子态波函数(1)式构造的哈密顿矩阵,可得到相关原子态的能量和组态混合系数.对于其他的高阶效应,例如 Breit 相互作用<sup>[18,21]</sup>、主要的量子电动力学效应<sup>[18,21]</sup>和原子核的有限体积效应<sup>[23]</sup>本文都将作为微扰处理.

### 2.2. 光电离截面的计算

从初态  $i$  到末态  $f$  的光电离截面  $\sigma_{if}^{PI}$  可用下式来计算<sup>[24]</sup>

$$\sigma_{if}^{PI} = 4\pi^2 a_0^2 \alpha \frac{df_{if}}{d\epsilon}, \quad (3)$$

其中  $\alpha$  是精细结构常数,  $a_0$  是玻尔半径.  $df_{if}/d\epsilon$  是振子强度密度,它可以用下式来表示<sup>[20]</sup>

$$\frac{df_{if}}{d\epsilon} = \frac{\pi c}{(2L+1)\omega^2} \left| \alpha_f^{N-1}(P'_f J'_f M'_f) \epsilon \kappa ; \alpha_i^N(P_i J_i M_i) \parallel \hat{O}^{(L)} \parallel \alpha_i^N(P_i J_i M_i) \right|^2. \quad (4)$$

这里  $\omega$  和  $\epsilon$  分别是入射光子和处于里德伯态电子的能量,  $|\alpha_i^N(P_i J_i M_i)\rangle$  是光电离初态的原子态波函数,  $\alpha_f^{N-1}(P'_f J'_f M'_f) \epsilon \kappa ; \alpha_f^N(P_f J_f M_f)$  是光电离产生的离子和光电子所构成的光电离末态的原子态波函数,光电子的波函数可通过求解末离子态势场中具有特定能量的自由电子的 Dirac 方程得到<sup>[19,20]</sup>,  $\hat{O}^{(L)}$  是多极辐射场张量算符.

### 2.3. Auger 衰变概率的计算

从初态  $i$  到末态  $f$  的 Auger 衰变概率  $A_{if}^A$  可通过下式来计算<sup>[20]</sup>:

$$A_{if}^A = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \alpha_i(PJM) \right| \sum_{p < q} \frac{1}{r_{pq}} + V_{\text{Breit}} \left| \alpha_f(p' J' M') \right|^2, \quad (5)$$

其中  $|\alpha_i(PJM)\rangle$  是 Auger 衰变初态的原子态波函数,  $|\alpha_f(p' J' M')\rangle$  是由 Auger 衰变末态的离子和 Auger 电子构成的反对称化波函数,  $\frac{1}{r_{pq}}$  是  $p$  电子与  $q$  电子的库仑相互作用算符,  $V_{\text{Breit}}$  是 Breit 相互作用算符<sup>[23]</sup>.在具体计算中, Auger 电子的波函数可通过求解末离子态势场中具有特定能量的自由电子的 Dirac 方程得到<sup>[19,20]</sup>.

### 3. 结果与讨论

与光激发自电离过程相似<sup>[25]</sup>, 本文对于 Ne 原子的 1s 光电离及其末态和伴随态的自电离过程的处理也采用了两步模型, 将光电离过程和 Auger 衰变过程看作是相互独立的过程.

#### 3.1. Ne 原子的 1s 光电离及伴随的 2p 电子振激

Hikosaka 等<sup>[17]</sup>利用磁瓶多电子符合方法测得了光子能量为 947.9 eV 时 Ne 原子的 1s 光电子谱, 图 1(a) 为他们的实验结果. 为了从理论上分析其实验谱及 Ne 原子 1s 电子细致的光电离过程, 本文考虑了 Ne 原子基态、Ne 原子的 1s 光电离末态  $Ne^+ 1s^{-1}$  和伴随态  $Ne^+ 1s^{-1} 2p^{-1}(^1, ^3P)np$ , 计算了该光子能量下 Ne 原子的 1s 光电子谱及伴线结构, 如图 1(b) 所示. 为了便于本文计算结果与实验结果的比较, 在图 1(a) 中去除了实验背景, 并将本文的计算结果采用高斯线型进行了展开, 展宽宽度  $\Gamma$  为 2.5 eV. 从图 1 可以看出, Ne 原子的 1s 光电子谱由一个强度较大的主光电离谱峰和两个强度较小的振激谱峰构成. 根据本文的计算结果, 主光电离谱峰是 1s 电子电离形成的, 它产生光电离末态  $Ne^+ 1s^{-1}$ , 振激谱峰主要是在 1s 电子电离时, 伴随的 2p 电子振激到 3p 次壳层形成, 它产生光电离伴随态  $Ne^+ 1s^{-1} 2p^{-1}(^1, ^3P)3p$ , 2p 振激到 4p 的强度比 2p 振激到 3p 的强度小 1—3 个数量级, 2p 振激到其他更高  $n(n > 4)$  次壳层的强度更小, 因而这些振激过程可以忽略. 从图 1 可以看出, 本文的计算结果与文献 [17] 的实验结果符合得很好.

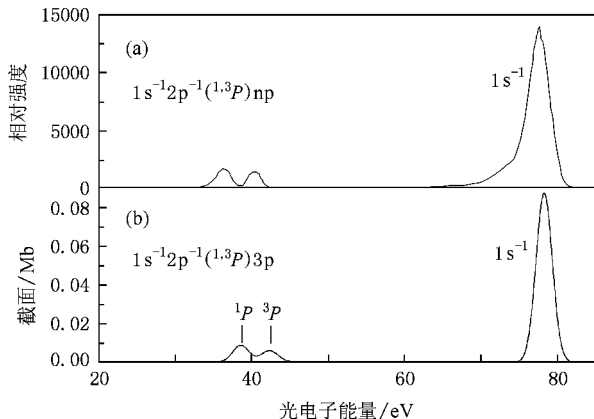


图 1 Ne 原子的 1s 光电子谱 (a) 文献 [17] 的实验结果, (b) 本文计算结果

表 1 列出了本文计算得到的 947.9 eV 光子能量下 Ne 原子的 1s 光电子谱峰的精确位置和光电离末态及伴随态的线宽, 并与实验结果进行了比较. 表 1 中的光电离末态及伴随态的线宽是利用 Auger 跃迁概率根据不确定度原理计算得到的,  $Ne^+ 1s^{-1}$  的位置是指光电子的能量位置,  $Ne^+ 1s^{-1} 2p^{-1}(^1, ^3P)3p$  的位置是指相对于  $Ne^+ 1s^{-1}$  的位置. 从表 1 可以看出, 本文计算的光电子谱峰的位置和光电离末态及伴随态的线宽与实验结果符合很好, 这说明了本文计算的光电离末态及伴随态的 Auger 跃迁概率是可靠的.

表 1 Ne 原子的 1s 光电离末态的位置和线宽

态	位置/eV		线宽/eV	
	实验值 <sup>[17, 26]</sup>	本文计算值	实验值 <sup>[26, 27]</sup>	本文计算值
$1s^{-1}$	77.81	78.31	0.27	0.27
$1s^{-1} 2p^{-1} 3p$	—	—	0.30(5)	0.25
$1s^{-1} 2p^{-1}(^3P)3p$	37.30(2)	35.98	—	0.26
$1s^{-1} 2p^{-1}(^1P)3p$	40.71(2)	39.73	—	0.23

#### 3.2. $Ne^+ 1s^{-1}$ 的 Auger 衰变

光电离末态  $Ne^+ 1s^{-1}$  是不稳定的, 它将进一步发生 Auger 衰变, 产生 Auger 末态  $Ne^{2+} 2s^{-2}$ ,  $Ne^{2+} 2s^{-1} 2p^{-1}$  和  $Ne^{2+} 2p^{-2}$ , 图 2 给出了  $Ne^+ 1s^{-1}$  的 Auger 电子谱, 其中图 2(b) 中的实线是本文的计算结果, 虚线是 Aksela 等<sup>[28]</sup>的理论结果. 从图 2 可以看出,  $Ne^+ 1s^{-1}$  的 Auger 谱由 5 个峰构成, 除峰 1 外, 本文结果与实验结果符合都很好. 为了进一步分析  $Ne^+ 1s^{-1}$  细致的 Auger 衰变过程, 表 2 给出了本文得到的  $Ne^+ 1s^{-1}$  的 Auger 跃迁能和 Auger 跃迁概率, 并与其他理论结果和实验结果作了比较. 从表 2 可

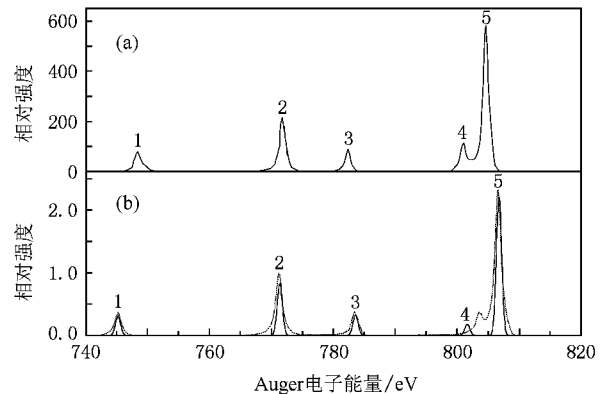


图 2  $Ne^+ 1s^{-1}$  的 Auger 电子谱 (a) 文献 [28] 的实验结果 (b) 理论计算结果 ( $\Gamma = 1.0$  eV)

表 2  $\text{Ne}^+ 1s^{-1}$  的 Auger 跃迁能及 Auger 跃迁概率

峰	末态	跃迁能/eV			$A_{ij}^A/10^{-3}$ a. u.			
		实验值 <sup>[28]</sup>	理论值 <sup>[28]</sup>	本文结果	实验值 <sup>[30]</sup>	实验值 <sup>[29]</sup>	理论值 <sup>[31]</sup>	本文结果
1	$2s^{-2} \ ^1S_0$	748.38	745.30	745.25	$0.35 \pm 0.07$	0.60	0.814	0.78
2	$2s^{-1}2p^{-1} \ ^1P_1$	771.76	771.22	771.37	$0.96 \pm 0.19$	1.74	2.136	2.11
3	$2s^{-1}2p^{-1} \ ^3P$	782.36	783.43	783.60	$0.35 \pm 0.07$	0.63	0.360	0.36
4	$2p^{-2} \ ^1S_0$	801.05	803.51	801.65	$0.55 \pm 0.11$	0.89	0.645	0.46
5	$2p^{-2} \ ^1D_2$	804.64	806.51	806.77	$3.28 \pm 0.066$	6.04	5.113	5.69

可以看出,对于跃迁能,本文计算结果中峰 1 比实验值低了 3.13 eV,峰 3 和峰 5 分别比实验值高了 1.24 和 2.13 eV,对于峰 2 和峰 4,本文结果与实验结果符合得很好.若进一步比较本文结果与 Aksela 等<sup>[28]</sup>的理论结果,除峰 4 外,两者基本一致.对于 Auger 跃迁概率,实验上不容易精确测得,相关的实验数据比较缺乏,而仅有的数据间偏差也比较大.在本文计算结果中,峰 1 和峰 5 的相关结果与文献<sup>[29]</sup>符合较好,峰 2、峰 3 和峰 4 的相关结果与文献<sup>[30]</sup>符合较好.另外,本文结果与 Bruneau<sup>[31]</sup>用微扰方法计算的结果也有较好的一致性.

### 3.3. Ne 原子 $1s$ 光电离伴随态 $\text{Ne}^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1^3P)$ $3p$ 的 Auger 衰变

Ne 原子  $1s$  光电离伴随态  $\text{Ne}^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1^3P)3p$  有 18 个能级,由于这 18 个能级的光电离截面不同,本文在研究该伴随态的 Auger 衰变特性时考虑了这 18 个能级的初始布局.图 3 给出了 Ne 原子  $1s$  光电离伴随态  $\text{Ne}^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1^3P)3p$  的 Auger 衰变通道.从图 3 可以看出,它主要有 5 条产生  $\text{Ne}^{2+}$  的 Auger

通道,其中  $\text{Ne}^{2+} 2s^{-1}2p^{-2}3p$  和  $\text{Ne}^{2+} 2s^{-2}2p^{-1}3p$  还可以进一步 Auger 衰变产生  $\text{Ne}^{3+}$  末离子态,这是 Hikosaka 等<sup>[17]</sup>实验上测得的  $\text{Ne}^{3+}$  的主要来源,而  $\text{Ne}^{2+} 2p^{-3}3p$ ,  $\text{Ne}^{2+} 2s^{-1}2p^{-1}$  和  $\text{Ne}^{2+} 2p^{-2}$  只能进一步发生辐射跃迁,产生  $\text{Ne}^{2+}$  末离子态.本文只考虑了  $\text{Ne}^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1^3P)3p$  的 5 条产生  $\text{Ne}^{2+}$  的 Auger 衰变通道,对其进行了细致的研究.

表 3 详细列出了本文所得的 5 条 Auger 通道中 Auger 强度(这里用它来描述 Auger 跃迁的强弱,它等于 Auger 跃迁概率乘以  $\text{Ne}^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1^3P)3p$  的初始能级布居)相对较大的跃迁的初末态、跃迁能和 Auger 跃迁概率.从表 3 可以看出,  $\text{Ne}^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p^2S_{1/2} \rightarrow \text{Ne}^{2+} 2p^{-3}(^2D_3)3p^1P_1$  的 Auger 跃迁概率最大.目前没有可供对比的实验结果和理论结果,希望此表的数据能够给相关实验提供一定的参考.

Hikosaka 等<sup>[17]</sup>通过比较 Ne 原子  $1s$  光电离伴随态  $\text{Ne}^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  的所有 5 个 Auger 跃迁通道产生的 Auger 电子谱轮廓和向  $\text{Ne}^{2+} 2s^{-1}2p^{-2}3p$  及  $\text{Ne}^{2+} 2s^{-2}2p^{-1}3p$  跃迁产生的 Auger 电子谱轮廓,考

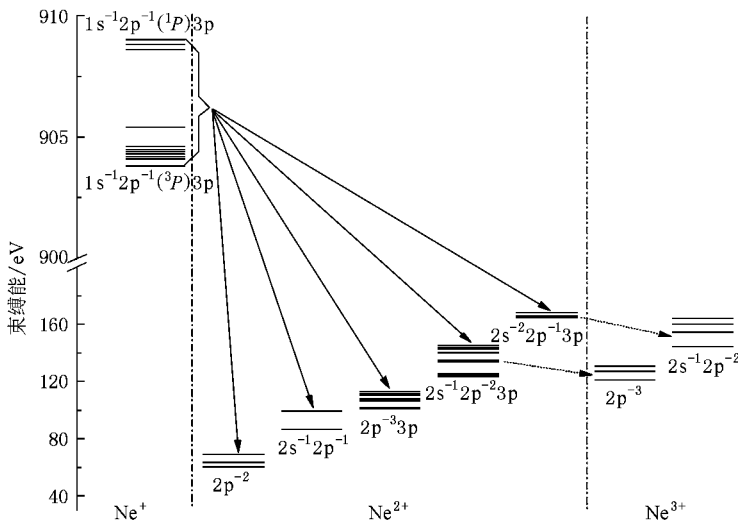
图 3  $\text{Ne}^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1^3P)3p$  的 Auger 衰变通道

表 3  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  的 Auger 跃迁能和 Auger 跃迁概率

初 态	末 态	跃迁 能/eV	$A_{ij}^A/$ $10^{13} s^{-1}$
$1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2s^{-2}2p^{-1}3p\ ^1S_0$	736.97	1.94
$1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2s^{-2}2p^{-1}3p\ ^1S_0$	740.56	2.01
$1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p\ ^3S_{1/2}$	$2s^{-2}2p^{-1}3p\ ^3S_1$	740.92	1.96
$1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2s^{-2}2p^{-1}3p\ ^3S_1$	744.51	1.93
$1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2s^{-1}2p^{-2}(^2P)3p\ ^1P_1$	760.03	2.54
$1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2s^{-1}2p^{-2}(^2P)3p\ ^3P_1$	762.12	0.73
	$2s^{-1}2p^{-2}(^2P)3p\ ^3P_2$	762.15	1.27
$1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2s^{-1}2p^{-2}(^2P)3p\ ^1P_1$	763.61	4.03
$1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2s^{-1}2p^{-2}(^4P)3p\ ^5D_0$	765.69	0.65
	$2s^{-1}2p^{-2}(^2P)3p\ ^3P_1$	765.71	1.90
	$2s^{-1}2p^{-2}(^2P)3p\ ^3P_2$	765.74	2.99
$1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2s^{-1}2p^{-2}(^2D)3p\ ^3P_1$	770.52	0.68
	$2s^{-1}2p^{-2}(^2D)3p\ ^3P_2$	770.53	1.06
	$2s^{-1}2p^{-2}(^2D)3p\ ^1P_1$	770.56	3.10
$1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2s^{-1}2p^{-2}(^2P)3p\ ^3D_1$	779.72	0.53
	$2s^{-1}2p^{-2}(^4P)3p\ ^3P_2$	779.75	1.02
$1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2p^{-3}(^2P_1)3p\ ^1S_0$	792.37	0.77
$1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2p^{-3}(^2P_1)3p\ ^1D_2$	794.06	4.30
$1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2p^{-3}(^2P_1)3p\ ^3D_3$	794.94	0.91
	$2p^{-3}(^2P_1)3p\ ^3D_2$	794.94	0.63
	$2p^{-3}(^2P_1)3p\ ^3S_1$	795.08	0.79
$1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2p^{-3}(^2P_1)3p\ ^1S_0$	795.95	0.79
$1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2p^{-3}(^2D_3)3p\ ^1D_2$	796.80	5.39
$1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2p^{-3}(^2P_1)3p\ ^1D_2$	797.65	4.40
$1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2p^{-3}(^2P_1)3p\ ^3D_3$	798.52	0.83
	$2p^{-3}(^2P_1)3p\ ^3D_2$	798.53	0.60
	$2p^{-3}(^2P_1)3p\ ^3S_1$	798.66	0.77
$1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2p^{-3}(^2D_3)3p\ ^3D_1$	798.78	1.01
	$2p^{-3}(^2D_3)3p\ ^3D_3$	798.78	3.79
	$2p^{-3}(^2D_3)3p\ ^3D_2$	798.79	2.60
	$2p^{-3}(^2D_3)3p\ ^1P_1$	798.82	6.55
$1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2p^{-3}(^2D_3)3p\ ^1D_2$	800.39	5.57
$1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p\ ^2S_{1/2}$	$2p^{-3}(^2D_3)3p\ ^3D_1$	802.37	1.14
	$2p^{-3}(^2D_3)3p\ ^3D_3$	802.37	3.59
	$2p^{-3}(^2D_3)3p\ ^3D_2$	802.37	2.63

虑仪器探测  $Ne^{2+} 2s^{-1}2p^{-2}3p$  和  $Ne^{2+} 2s^{-2}2p^{-1}3p$  进一步 Auger 跃迁产生的 Auger 电子的效率(65%)后,得到光电离伴随态  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  产生的  $Ne^{3+}$  的

相对丰度为 0.54. 本文也计算了这两种 Auger 电子谱,并与实验观测谱进行了比较. 结果示于图 4. 图 4(a)为 Hikosaka 等<sup>[17]</sup>关于  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  的实验结果,图 4(b)为本文计算得到的  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  的结果. 比较图 4(a)与(b)可以看出:对于  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  的所有 5 个 Auger 跃迁通道产生的 Auger 电子谱轮廓,目前的计算结果与实验测量结果符合很好;而对于  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  向  $Ne^{2+} 2s^{-1}2p^{-2}3p$  和  $Ne^{2+} 2s^{-2}2p^{-1}3p$  跃迁产生的 Auger 电子谱轮廓,本文计算结果大于实验结果. 如考虑实验上的电子探测效率后,我们的结果略小于实验结果. 从而预计我们得到的  $Ne^{3+}$  的相对丰度也将小于 Hikosaka 等<sup>[17]</sup>的实验结果. 这两方面的原因:一方面是由于本文忽略了 Auger 过程中所伴随的振激和振退等过程;另一方面是由于没有考虑  $Ne^+$  直接产生  $Ne^{3+}$  的双 Auger 和 Shake-off 等衰变过程. 另外,本文也计算了  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p$  的相关结果,如图 4(c)所示. 比较图 4(b)与(c)可以发现,  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p$  的 Auger 强度整体上大于  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  的 Auger 强度.

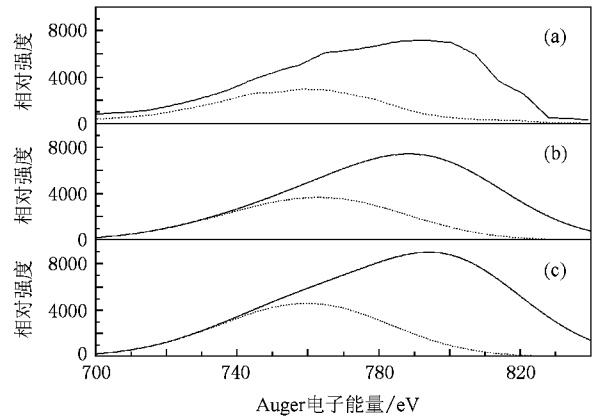


图 4  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  的所有 5 个 Auger 跃迁通道产生的 Auger 电子谱轮廓(用实线表示)与向  $Ne^{2+} 2s^{-1}2p^{-2}3p$  和  $Ne^{2+} 2s^{-2}2p^{-1}3p$  跃迁产生的 Auger 电子谱轮廓(用虚线表示)(a)文献<sup>[17]</sup>的实验结果(b)本文计算得到  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  的相关结果(c)本文计算得到  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p$  的相关结果

表 4 给出了本文计算得到的 Ne 原子 1s 光电离伴随态  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  的 5 个 Auger 跃迁通道的组态平均 Auger 强度和分支比. 从表 4 可以看出,对于 Ne 原子 1s 光电离伴随态  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  电子作为旁观电子跃迁到  $Ne^{2+} 2p^{-3}3p$ ,  $Ne^{2+} 2s^{-1}2p^{-2}3p$  和  $Ne^{2+} 2s^{-2}2p^{-1}3p$  的旁观 Auger 跃

迁是主要的衰变机制,它决定了 Auger 谱的主要特征.同时,考虑 Ne 原子  $1s$  光电离伴随态  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p$  跃迁到  $Ne^+ 2p^{-2}3p$ ,  $Ne^+ 2p^{-1}$  和  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}3s$  的辐射跃迁过程,结合表 4 中的组态平均 Auger 强度,我们得到了此光电离伴随态经一系列衰变过程产生  $Ne^+$ ,  $Ne^{2+}$  和  $Ne^{3+}$  未电离态离子的相对丰度分别为 0.02, 0.58 和 0.41. 而对于  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$ , 产生  $Ne^+$ ,  $Ne^{2+}$  和  $Ne^{3+}$  未电离态离子的相对丰度分别为 0.01, 0.56 和 0.43. 本文计算得到  $Ne^{3+}$  的相对丰度小于 Hikosaka 等<sup>[17]</sup>的实验结果,这与图 4 所得的结论一致.

表 4  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p$  的 5 个  $Ne^{2+}$  Auger 末态、组态平均 Auger 强度和分支比

Auger 组态	组态平均 Auger 强度/ $10^{14}s^{-1}$	分支比
$2s^{-2}2p^{-1}3p$	0.39	0.10
$2s^{-1}2p^{-2}3p$	1.19	0.32
$2p^{-3}3p$	2.13	0.57
$2s^{-1}2p^{-1}$	0.01	0.00
$2p^{-2}$	0.05	0.01

## 4. 结 论

本文利用基于 MCDF 理论方法开发的研究原子结构和性质的程序 GRASP92 和 RATIP 以及我们最新发展的研究光电离和辐射复合过程的程序 RERR06, 计算了光子能量为 947.9 eV 时 Ne 原子的  $1s$  光电子谱及伴线结构, 细致研究了光电离末态  $Ne^+ 1s^{-1}$  和伴随态  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p$  的 Auger 衰变特性. 研究结果表明, 对于 Ne 原子的  $1s$  光电子谱及伴线结构和光电离末态  $Ne^+ 1s^{-1}$  的 Auger 衰变特性, 本文结果与其他理论结果及实验结果总体上符合较好. 对光电离伴随态  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p$  的 Auger 衰变的研究表明, 旁观 Auger 跃迁是主要的衰变机制,  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p$  的 Auger 强度整体上大于  $Ne^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p$  的 Auger 强度, 此光电离伴随态产生  $Ne^+$ ,  $Ne^{2+}$  和  $Ne^{3+}$  未电离态离子的相对丰度分别为 0.02, 0.58 和 0.41. 希望本文的工作能够为进一步的高精度实验研究提供一定的参考, 同时也期望所得结果能够在实验上得到验证.

- [1] Winter H, Aumayr F 1999 *J. Phys. B* **32** R39
- [2] El-Shemi A M, Iofly Y A 2005 *Eur. Phys. J. D* **32** 277
- [3] Hu H W, Dong C Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6326 (in Chinese) [胡宏伟、董晨钟 2006 物理学报 **55** 6326]
- [4] Church D A, Kravis S D, Sellin I A, O C S, Levin J C, Short R T, Meron M, Johnson B M, Jones K W 1987 *Phys. Rev. A* **36** 2487
- [5] Ueda K, Shigemasa E, Sato Y, Yagashita A, Sasaki T, Hayaishi T 1989 *Rev. Sci. Instrum.* **60** 2193
- [6] Penent F, Lablanquie P, Hall R I, Palaudoux J, Ito K, Hikosaka Y, Aoto T, Eland J H D 2005 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144—147** 7
- [7] Turri G, Battera G, Avaldi L, Camilloni R, Coreno M, Ruocco A, Colle R, Simonucci S, Stefani G 2001 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **114—116** 199
- [8] Brünken S, Gerth C, Kanngießner B, Luhmann T, Richter M, Zimmermann P 2002 *Phys. Rev. A* **65** 042708
- [9] Tamenori Y, Okada K, Tanimoto S, Ibuki T, Nagaoka S, Fujii A, Haga Y, Suzuki I H 2004 *J. Phys. B* **37** 117
- [10] Viefhaus J, Cvejanović S, Langer B, Lischke T, Prümper G, Rolles D, Golovin A V, Grum-Grzhimailo A N, Kabachnik N M, Becker U 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 083001
- [11] Kochur A G, Sukhorukov V L, Dudenko A I, Demekhin P V 1995 *J. Phys. B* **28** 387
- [12] Fritzsche S 1995 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **72** 249
- [13] Wang X L, Hu H W, Dong C Z 2008 *J. At. Mol. Phys.* **25** 493 (in Chinese) [王向丽、胡宏伟、董晨钟 2008 原子与分子物理学报 **25** 493]
- [14] Hu H W, Dong C Z, Shi Y L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3887 (in Chinese) [胡宏伟、董晨钟、师应龙 2007 物理学报 **56** 3887]
- [15] Ding X B, Dong C Z, Koike F, Kato T, Fritzsche S 2008 *Chin. Phys. B* **17** 592
- [16] Ding X B, Dong C Z, Fritzsche S 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2490 (in Chinese) [丁晓彬、董晨钟、Fritzsche S 2004 物理学报 **53** 2490]
- [17] Hikosaka Y, Aoto T, Lablanquie P, Penent F, Shigemasa E, Ito K 2006 *J. Phys. B* **39** 3457
- [18] Parpia F A, Fischer C F, Grant I P 1996 *Comput. Phys. Commun.* **94** 249
- [19] Fritzsche S 2001 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **114—116** 1155
- [20] Fritzsche S, Aksela H, Dong C Z, Heinämäki S, Sienkiewicz J E 2003 *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **205** 93
- [21] Grant I P, McKenzie B J, Norrington P H 1980 *Comput. Phys. Commun.* **21** 207
- [22] Grant I P 1974 *J. Phys. B* **7** 1458
- [23] Dyall K G, Grant I P, Johnson C T, Parpia F A, Plummer E P 1989 *Comput. Phys. Commun.* **55** 425

- [ 24 ] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* ( Berkeley , Los Angeles , London : University of California Press ) p525
- [ 25 ] Ding X B , Dong C Z , Fritzsche S 2008 *Chin. Phys. B* **17** 2033
- [ 26 ] Gelius U , Asplund L , Basilier E , Hedman S , Helenelund K , Siegbahn K 1984 *Nucl. Instrum. Meth. B* **1** 85
- [ 27 ] Mårtensson N , Svensson S , Gelius U 1987 *J. Phys. B* **20** 6243
- [ 28 ] Aksela H , Aksela S , Tulkki J , Åberg T , Bancroft G M , Tan K H 1989 *Phys. Rev. A* **39** 3401
- [ 29 ] Howat G , Åberg T , Goscinski O 1978 *J. Phys. B* **11** 1575
- [ 30 ] Kelly H P 1975 *Phys. Rev. A* **11** 556
- [ 31 ] Bruneau J 1987 *J. Phys. B* **20** 71

## Theoretical study on Ne 1s photoionization and corresponding Auger decay processes<sup>\*</sup>

Wang Xiang-Li Dong Chen-Zhong<sup>†</sup> Sang Cui-Cui

( College of Physics and Electronic Engineering , Northwest Normal University , Lanzhou 730070 , China )

( Received 12 October 2008 ; revised manuscript received 11 March 2009 )

### Abstract

In this paper , the Ne 1s photoelectron spectrum and the corresponding Auger decay processes have been investigated theoretically by using the GRASP92 , RATIP and the recently developed RERR06 codes based on the multi-configuration Dirac-Fock method. Good overall agreement was found between the present calculations and the previous theoretical and experimental results. By analyzing the Auger decay processes of the photoionization satellite state  $\text{Ne}^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1\ ^3P)\ \mathfrak{B}p$  , it was found that the spectator Auger decay is the dominant decay mode and the Auger intensity of the  $\text{Ne}^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1P)\ \mathfrak{B}p$  is greater than that of the  $\text{Ne}^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^3P)\ \mathfrak{B}p$  as a whole. Meanwhile , the relative populations of the final ions  $\text{Ne}^+$  ,  $\text{Ne}^{2+}$  and  $\text{Ne}^{3+}$  produced by the photoionization satellite state  $\text{Ne}^+ 1s^{-1}2p^{-1}(^1\ ^3P)\ \mathfrak{B}p$  were predicted to be 0.02 , 0.58 and 0.41 , respectively.

**Keywords** : photoionization , Auger decay , multi-configuration Dirac-Fock method

**PACC** : 3280F , 3280H , 3120

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10774122 , 10876028 ) , the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education , China ( Grant No. 20070736001 ) , the Foundation of Center of Theoretical Nuclear Physics of National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou , China and the Science and Technology Innovation Foundation of Northwest Normal University , China ( Grant No. NWNU-KJCXGC-03-21 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : [dongcz@nwnu.edu.cn](mailto:dongcz@nwnu.edu.cn)