

# $F^{3+}$ 和 $Ne^{4+}$ 离子的光电离截面的理论计算\*

孙长平 王国利 周效信<sup>†</sup>

(西北师范大学物理与电子工程学院, 甘肃省原子分子物理与功能材料重点实验室, 兰州 730070)

(2010年7月8日收到; 2010年7月29日收到修改稿)

利用  $R$  矩阵方法计算了  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子的基态  $2s^2 2p^2 (^3P)$  和激发态  $2s^2 2p^2 (^1D, ^1S), 2s 2p^3 (^5S^o)$  的分波光电离截面、总光电离截面, 分析辨认出了这些离子在自光电离过程中出现的自电离共振对应的跃迁, 所得的总光电离截面的共振结构与最近的实验和其他的理论计算进行了比较, 计算结果与实验结果符合得很好.

**关键词:**  $F^{3+}$  离子和  $Ne^{4+}$  离子, 光电离, 自电离共振,  $R$  矩阵

**PACS:** 32.80.Fb, 32.80.Zb

## 1. 引言

原子和离子的光电离过程普遍存在于各种天体系统、高层大气和实验室等离子体中, 对光电离过程的研究, 对于人们了解天体系统和实验室等离子体的性质方面有重要意义<sup>[1,2]</sup>, 而且光电离截面数据对于其他的相关物理过程有着重要应用, 如通过光电离截面, 我们可以得到原子或离子里德伯系列的共振能量、宽度和振子强度等有用参数. 实际所用的大量光电离截面数据主要由理论计算提供, 如不透明度工程 (opacity project)<sup>[3]</sup> 和铁工程 (iron project)<sup>[4]</sup> 就是两个用来计算光电离截面等辐射数据的大型国际计算工程, 因此从理论上获得大量的精确的原子或离子光电离截面是十分必要的.

由于天体系统中富含 C, N, O, F, Fe 等元素以及它们的离子, 人们对这些原子(离子)光电离截面进行了大量研究. 对于 F 离子和 Ne 离子, 人们已利用多组态 Dirac-Fock (MCDF) 近似<sup>[5-7]</sup>、Breit-Pauli 近似方法<sup>[8]</sup>、库仑-玻恩计算<sup>[9]</sup>、 $R$  矩阵<sup>[10-13]</sup>、Hartree-Slater (H-S) 自洽场理论<sup>[14]</sup> 等方法对它们的光电离截面进行了理论研究. 近年来, 为了检验不透明度工程的精度, Bizau 等人<sup>[5]</sup> 利用并束 (merged-beam)

技术实验测量了  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  等离子体的光电离截面. 对于这些离子, 虽然此前已有大量的理论研究, 但与 Bizau 等人的实验结果相比, 理论与实验之间仍存在较大的差异, 而且此前的理论计算也仅给出了光电离总截面. 为了消除已有理论计算与实验结果之间的差异, 有必要对  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子的光电离的分波光电离截面和总光电离截面进行高精度的计算. 最近, 我们利用  $R$  矩阵方法对原子 Mg 的光电离过程进行了计算, 计算证实了实验结果中出现的一个较弱的共振系列<sup>[15]</sup>, 表明  $R$  矩阵方法对于原子的光电离过程的计算是有效的, 在本文中我们继续使用  $R$  矩阵方法对  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  的分波光电离截面和总光电离截面, 分析它们的自电离共振结构, 并与已有的一些结果进行比较.

## 2. 理论方法

$R$  矩阵方法<sup>[16]</sup> 的基本思想是用半径为  $a$  的球面将散射空间分为内外两个区域. 光电离电子和靶中的  $N$  个电子形成  $(N+1)$  电子体系. 在内区 ( $r < a$ ), 这  $(N+1)$  个电子间的交换及相关效应是重要的, 必须加以考虑; 而在外区 ( $r > a$ ), 忽略光电子与靶原子中电子之间的交换作用及相关效应, 可以认为光电子在靶原子的一个平均长程势场中运动, 这

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11044007, 11064013), 高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20096203110001), 西北师范大学创新项目 (批准号: NWNNU-KJXCXGC-03-62) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: zhoux@nwnu.edu.cn

个区域的解可以用渐近展开或微扰近似求出.

在内区,引入一组不依赖于能量的基矢  $\varphi_k$ ,

$$\varphi_k(x_1, \dots, x_{N+1}) = A \sum_{ij} c_{ijk} \bar{\Phi}_i(x_1, \dots, x_N; \hat{r}_{N+1} \sigma_{N+1}) \times \frac{1}{r_{N+1}} u_{ij}(r_{N+1}) + \sum_j d_{jk} \chi_j(x_1, \dots, x_{N+1}), \quad (1)$$

其中  $A$  为反对称算符,考虑了光电子与靶原子中其他电子间的交换作用.  $u_{ij}$  为光电子的连续轨道波函数.  $\bar{\Phi}_i$  为通道波函数,由靶态波函数  $\Phi$  与光电子的自旋和角向波函数耦合而成.  $\chi_j$  为  $(N+1)$  电子组态波函数,由束缚轨道形成. 系数  $c_{ijk}$  和  $d_{jk}$  通过对角化  $(N+1)$  电子的 Hamiltonian 得到.

(1) 式中所用的靶态波函数  $\Phi$  用组态波函数  $\phi_i$  展开:

$$\Phi(\text{LS}) = \sum_{i=1}^M a_i \phi_i(\alpha_i \text{LS}), \quad (2)$$

$\phi_i$  由单电子轨道波函数乘积反对称化得到,单电子的径向波函数用 Slater 型轨道展开:

$$P_{nl}(r) = \sum_{j=1}^M C_{jnl} r^{l+j} \exp(-\xi_{jnl} r), \quad (3)$$

在长度和速度规范下的微分光电离截面分别表示为

$$\frac{d\sigma_L}{d\hat{r}} = 8\pi^2 \alpha a_0^2 \omega \left| \langle \Psi_f(\hat{r}) \left| \sum_{j=1}^{N+1} z_j \right| \Psi_i \rangle \right|^2, \quad (4)$$

$$\frac{d\sigma_v}{d\hat{r}} = \frac{8\pi^2 \alpha a_0^2}{\omega} \left| \langle \Psi_f(\hat{r}) \left| \sum_{i=1}^{N+1} \frac{\partial}{\partial z_j} \right| \Psi_i \rangle \right|^2, \quad (5)$$

(4) 和 (5) 式中的  $\omega$  是入射光子的能量(原子单位),  $\alpha$  为精细结构常数,  $a_0$  为 Bohr 半径,  $\hat{k}$  为出射光电子的方向.  $\Psi_i, \Psi_f(\hat{k})$  分别代表初、末态波函数.

### 3. 计算结果与讨论

利用前面叙述的方法及相应的程序<sup>[17,18]</sup>,我们计算了  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子的基态  $2s^2 2p^2 3P$ , 激发态  $2s^2 2p^2 1D, 1S$  和  $2s 2p^3 5S^o$  的电离阈值附近的光电离截面. 在计算中包含了 8 个靶态,分别为  $1s^2 2s^2 2p^2 P^o, 1s^2 2s 2p^2 4P, 2D, 2S, 2P$  和  $1s^2 2p^3 4S^o, 2D^o, 2P^o$ . 我们使用 6 个单电子轨道  $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ . 其中  $1s, 2s, 2p$  波函数分别采用 Clementi 和 Roetti<sup>[19]</sup> 给出的  $F^{4+} (2s^2 2p^2 P^o)$  和  $Ne^{5+} (2s^2 2p^2 P^o)$  的 Hartree-Fock 波函数,  $3s, 3p, 3d$  波函数采用 CIV3<sup>[20]</sup> 分别优化能级  $2s^2 2p^2 P^o, 2s 2p^2 2P, 2s 2p^2 4P$  得到. 在计算中我们采用 LS 耦合,对连续电子的每个角动量采用 20 个基函数作为线性组合. 对  $F^{3+}$  和

$Ne^{4+}$  离子,  $R$  矩阵半径分别取为 3.8 a. u. 和 3.2 a. u., 能量步长为 0.0001 Ry.

表 1 和表 2 分别给出了本文计算得到的靶态能量及电离能,并与 NIST 值<sup>[21]</sup>作了比较. 可以看出,我们的计算结果与 NIST 值符合得很好,最大的误差来自于  $F^{3+}$  的  $2S$  靶态能量,约为 1.75%.

表 1  $F^{3+}, Ne^{4+}$  离子靶态能量(eV) 与 NIST 值<sup>[21]</sup> 的比较

态	$F^{3+}$			$Ne^{4+}$		
	本工作	NIST	误差/%	本工作	NIST	误差/%
$2s^2 2p^2 3P^o$	0.0000	0.0000	0.0	0.0000	0.0000	0.01
$2s 2p^2 4P$	10.6111	10.6238	0.12	12.2079	12.4081	0.16
$2s 2p^2 2D$	18.9887	18.8937	0.50	22.1147	22.0854	0.01
$2s 2p^2 2S$	24.9224	24.4936	1.75	28.8265	28.5139	0.19
$2s 2p^2 2P$	26.8797	26.6225	0.97	31.1422	31.8678	0.16
$2p^3 4S^o$	34.0983	34.2088	0.32	39.4476	39.7616	0.20
$2p^3 2D^o$	38.2677	38.0320	0.62	44.6229	44.4591	0.09
$2p^3 2P^o$	44.0024	43.0149	0.23	51.1578	50.2333	0.52

表 2  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子电离能(eV) 与 NIST 值<sup>[21]</sup> 的比较

态	$F^{3+}$			$Ne^{4+}$		
	本工作	NIST	误差/%	本工作	NIST	误差/%
$2s^2 2p^2 3P$	86.9319	87.0882	0.17	126.1066	126.1535	0.04
$2s^2 2p^2 1D$	89.8940	90.1657	0.30	129.9146	129.8157	0.08
$2s^2 2p^2 1S$	93.6952	93.6748	0.02	134.1102	133.9843	0.09
$2s 2p^3 5S^o$	95.8341	96.2535	0.44	137.0463	137.0147	0.07

图 1 给出了  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子基态  $2s^2 2p^2 3P$  的分波光电离截面. 从图中可以看出,  $3D^o, 3P^o, 3S^o$  的分光电离截面的强度依次减小, 截面中出现了许多共振峰. 通过理论分析可知, 可能主要的共振系列有  $2s 2p^2 (4P) np^3 P^o, 3D^o, 2s 2p^2 (2P) np^3 D^o, 3P^o, 3S^o$ .

图 2 为  $F^{3+}, Ne^{4+}$  离子的激发态  $2s^2 2p^2 1D$  的分光电离截面图. 从图中可以看出  $1F^o, 1D^o, 1P^o$  的光电离截面的强度依次减小, 截面中出现了  $2s 2p^2 (2D) np^1 P^o, 1D^o, 1F^o$  共振系列.

图 3, 图 4 分别给出了  $F^{3+}, Ne^{4+}$  离子激发态  $2s^2 2p^2 1S$  和  $2s 2p^3 5S^o$  的光电离截面. 从图中可以看出, 可能出现了  $2s 2p^2 (2D, 2S, 2P) np^1 P^o, 2p^3 (4S^o) np^5 P$  系列.

为了与实验比较,我们将计算得到的光电离截面作了如下形式的高斯卷积:

$$f_c(x) = \int_{x_A}^{x_B} \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(x' - x)^2}{2\sigma^2}\right\} f(x') dx',$$

其中  $\sigma = \Gamma / \sqrt{8 \ln 2}$ ,  $\Gamma$  为实验分辨率(在 Bizau 等

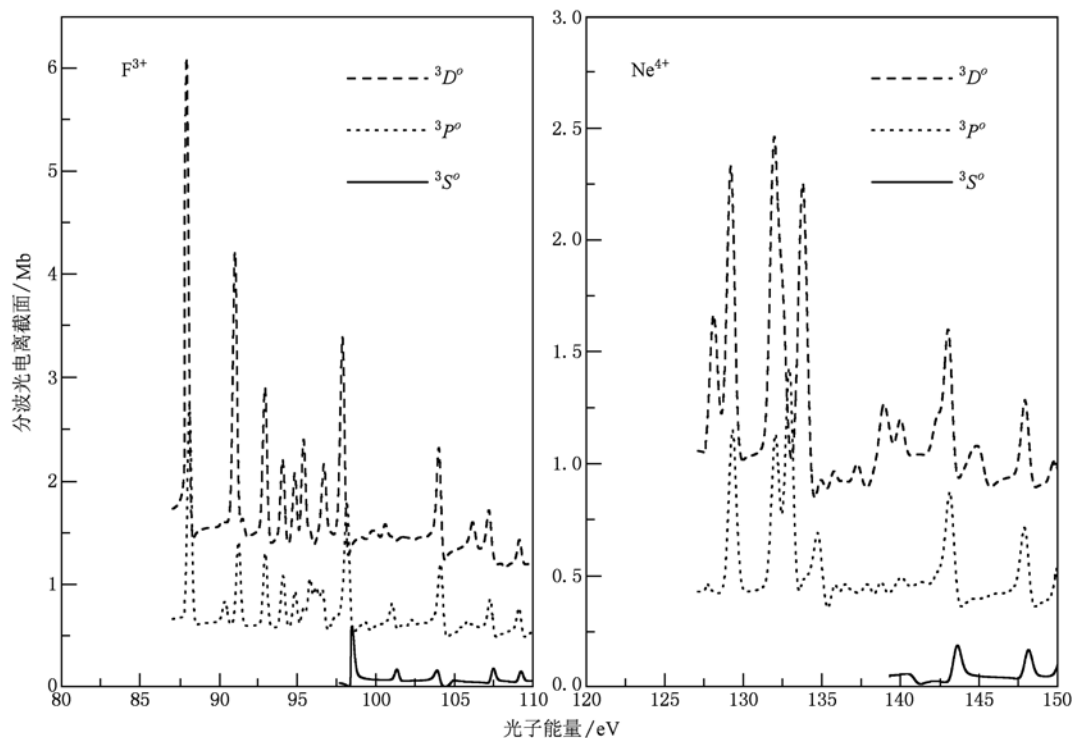


图1  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子基态  $2s^2 2p^3 P$  的分波光电离截面

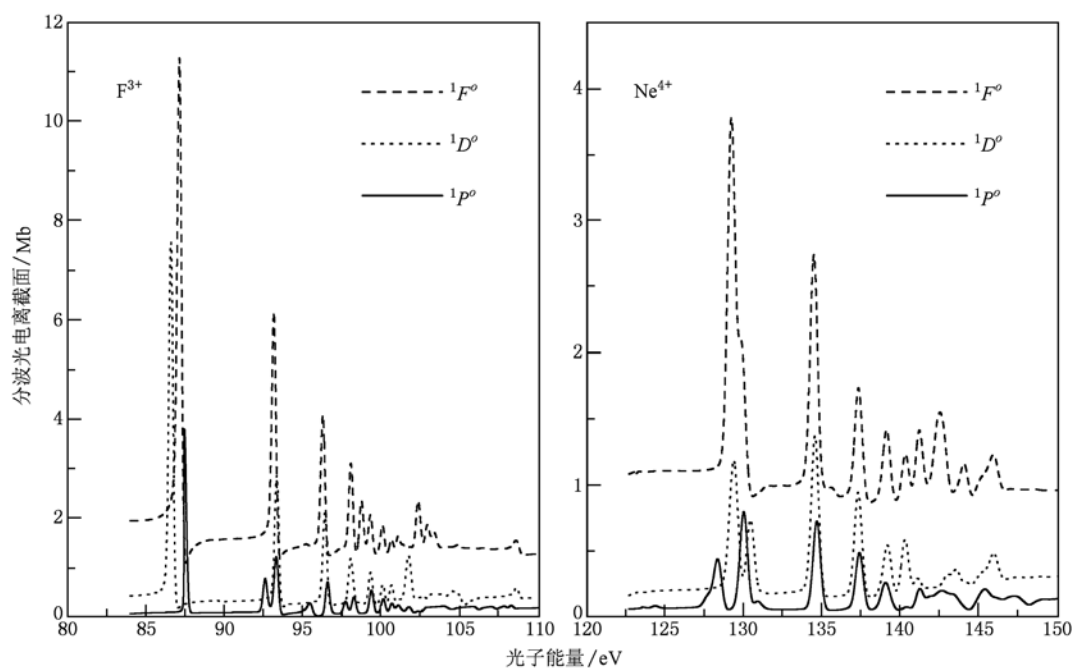


图2  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子激发态  $2s^2 2p^2 1D$  的分波光电离截面

人<sup>[5]</sup>的实验中,测量  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子截面的分辨率分别为 300, 550 meV.  $f(x')$ ,  $f(x)$  分别代表卷积前、后的截面. 因为在 Bizau 等人<sup>[5]</sup>的实验中,  $F^{3+}$ ,  $Ne^{4+}$  离子是基态和激发态离子的混合,我们将计算

得到的截面按照不同的丰度(对于  $F^{3+}$ ,  $Ne^{4+}$  离子,  $^3P: ^1D: ^1S: ^5S^o$  分别为 68: 30: 0: 2 和 56: 36: 6: 2) 进行求和得到了总光电离截面,如图 5 所示. 由于计算的  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子电离能与 NIST 的实验结果<sup>[21]</sup> 存

在一些差异(见表 2),为了与实验的结果更好的比较,计算中考虑了  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子的电离能与实验

值的差别而做了修正,同时也给出了其他的理论结果(均为卷积截面).

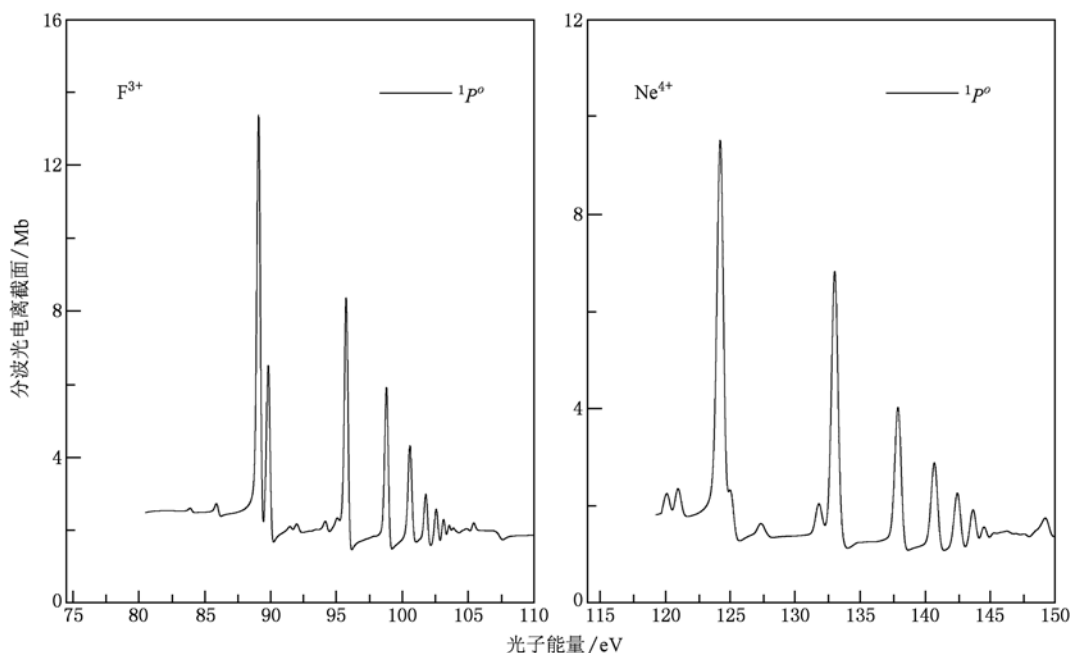


图 3  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子的激发态  $2s^2 2p^2 1S$  的光电离截面

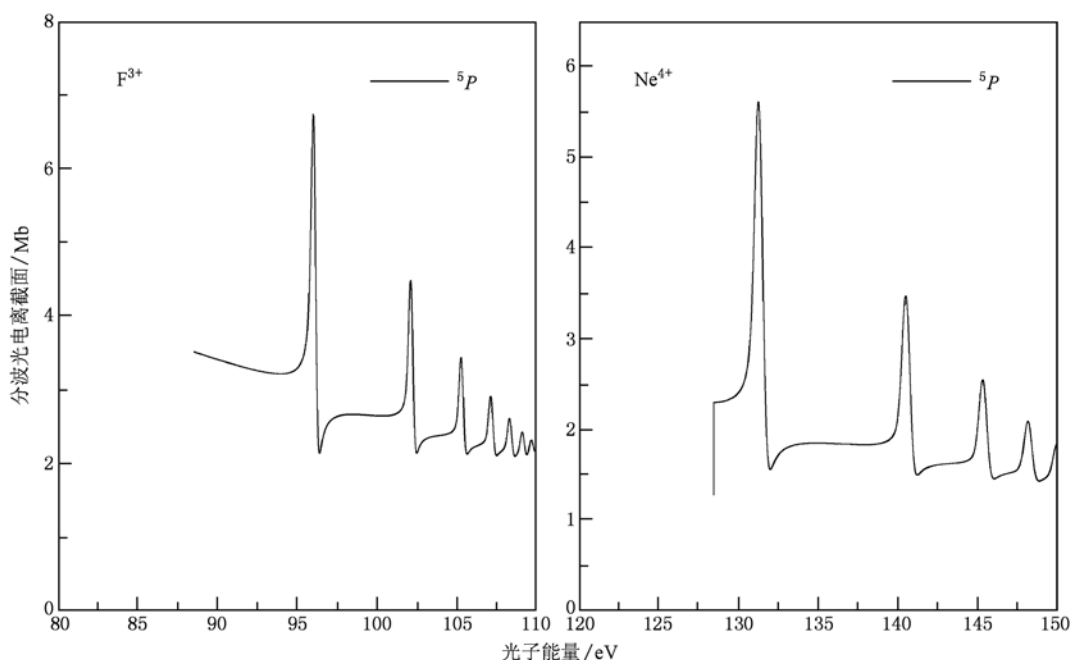


图 4  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子激发态  $2s 2p^3 5S^o$  的分波光电离截面

从图 5 中最上面的图可以看出,实验中出现的某些共振在我们的计算结果中消失,如图中第 1 和第 2 个峰( $F^{3+}$  离子:  $^5S^o \rightarrow (^4P)5d \ ^5P$  和  $^5S^o \rightarrow (^4P)6d \ ^5P$ ;  $Ne^{4+}$  离子:  $^5S^o \rightarrow (^4P)6d \ ^5P$  和  $^5S^o \rightarrow (^4P)7d \ ^5P$ ),

这是由于这些自电离共振都是在相对论效应下的跃迁,而非相对论的 LS 耦合不允许这些跃迁<sup>[5]</sup>. 图 5 中部的左图给出了 Nahar 等人<sup>[12]</sup> 和 Lou 等人<sup>[11]</sup> 用 R 矩阵计算的  $F^{3+}$  离子基态的光电离截面的结

果. Nahar 等人<sup>[12]</sup>仅考虑了原子实无激发的基组态, Lou 等人<sup>[11]</sup>在  $R$  矩阵计算中包含了 8 个靶态:  $1s^2 2s^2 2p^2 P^o$ ,  $1s^2 2s 2p^2 \ ^4P, \ ^2D, \ ^2S, \ ^2P$  和  $1s^2 2p^3 \ ^4S^o, \ ^2D^o, \ ^2P^o$ , 构造靶态的波函数中有 13 个组态:  $2s^2 2p, 2s 2p^2, 2p^3, 2s^2 3s, 2s^2 3p, 2s^2 3d, 2s 2p 3s, 2s 2p 3p, 2s 2p 3d, 2p^2 3s, 2p^2 3p, 2p^2 3d$  和  $2s 3d^2$ , 其中包含了原子实内壳层的激发, 对于图 5 中部右图的计算( $Ne^{4+}$ )也是如此. 在我们的计算中, 构造靶态的波函数中采用更多的组态, 其中包括靶态  $1s^2 2s^2 2p^2 P^o$  和  $1s^2 2s 2p^2 \ ^4P$  中  $2s$  轨道上的电子可以全部激发到更高的轨道, 也包括将  $1s$  轨道上的 1 个电子激发到更高轨道上的 5 个靶态. 由于在我们的计算中考虑了更多的组态相互作用, 且通过计算各分波光电离

截面来辨认出现的自电离共振系列, 因此我们计算的结果相对于其他的  $R$  矩阵计算有了很大的改进. 通过与 Lou 等人<sup>[11]</sup>、Nahar 等人<sup>[12]</sup>用  $R$  矩阵及 Bizau 等人<sup>[5]</sup>MCDF 的计算结果(对应图 5 左面的 3 个图)的比较, 可以看出我们计算  $F^{3+}$  总光电离截面的大小、形状及自电离系列的共振能量与实验符合得更好, 能很好地反映  $F^{3+}$  离子光电离的实际电离过程; 对于  $Ne^{4+}$  而言, 其总光电离截面与 Lou 等人<sup>[11]</sup>用  $R$  矩阵及 Bizau 等人<sup>[5]</sup>MCDF 的计算结果相符合(对应图 5 的右面的 3 个图), 比实验值略小, 但形状和共振位置与实验符合得很好. 虽然 Bizau 等人<sup>[5]</sup>使用 MCDF 方法计算的结果能给出好的光电离截面的共振结构, 但是不能准确地给出自电离共振的位置.

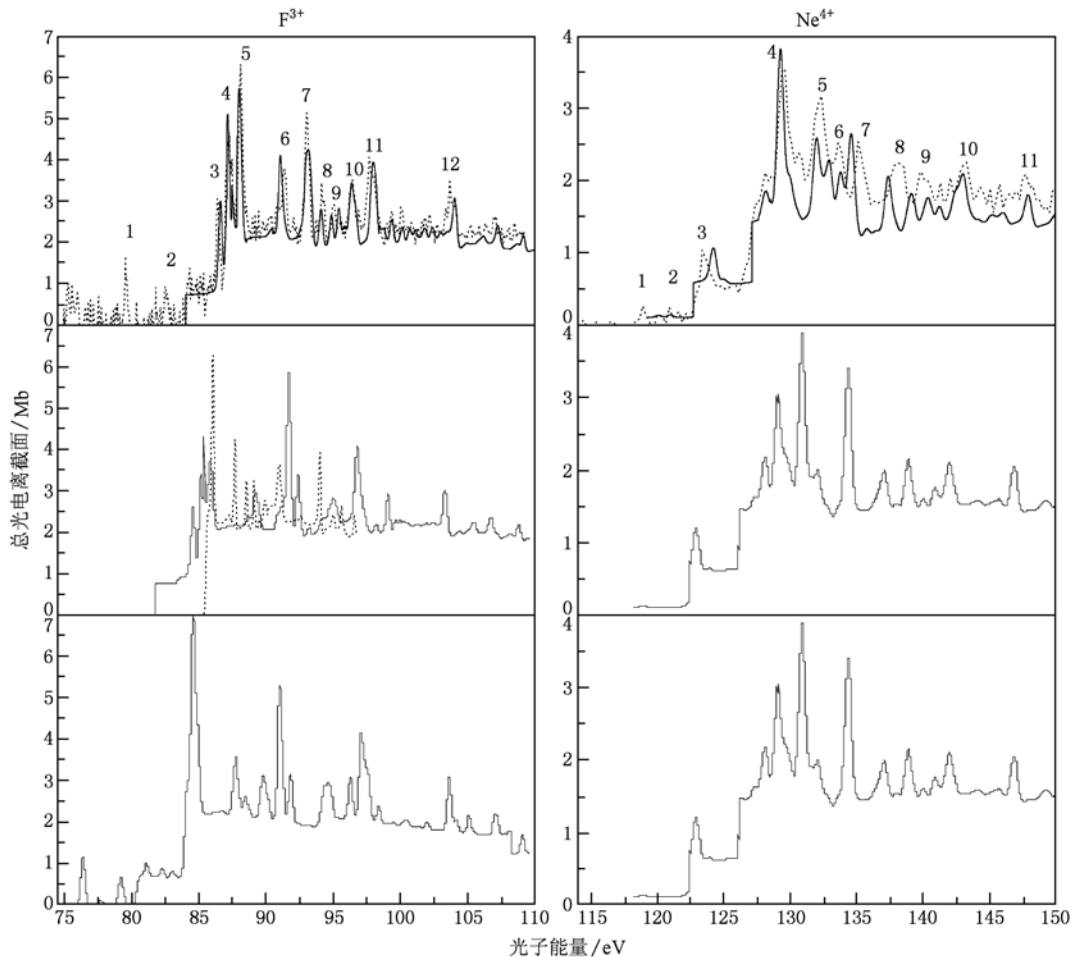


图 5  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  总光电离截面的比较(上图:实线是本文的计算结果, 虚线是 Bizau 等人<sup>[5]</sup>的实验结果; 中图:实线是 Lou 等人<sup>[11]</sup>用  $R$  矩阵计算的结果, 虚线是 Nahar 等人<sup>[12]</sup>用  $R$  矩阵计算的基态光电离截面的结果; 下图: Bizau 等人<sup>[5]</sup>用 MCDF 计算的结果)

最后, 我们在表 3 和表 4 中分别给出了  $F^{3+}$  和  $Ne^{4+}$  离子光电离截面中出现的各个共振峰的位置

和标记. 对于共振位置来说, 本文的计算结果与实验符合得很好. 通过分光电离截面可知, 实验结果

表3  $F^{3+}$  离子自电离共振系列的能量(eV)

峰	能量			跃迁		
	实验	本工作	MCDF	Bizau 等 <sup>[5]</sup>	本工作	
3	86.42	86.5986	86.1	$^1D \rightarrow (^2D)4p\ ^1D^o$	$^1D \rightarrow (^2D)4p\ ^1D^o$	
4	87.26	87.1374	86.6	$^1D \rightarrow (^2D)4p\ ^1F^o, ^1P^o$	$^1D \rightarrow (^2D)4p\ ^1F^o$	
		87.4504			$^1D \rightarrow (^2D)4p\ ^1P^o$	
5	88.10	87.9659	86.5	$^3P \rightarrow (^4P)5p\ ^3S^o, ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^4P)5p\ ^3P^o$	
		88.1523			$^3P \rightarrow (^4P)5p\ ^3D^o$	
6	91.35	91.0408	89.5	$^3P \rightarrow (^4P)6p\ ^3S^o, ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^4P)6p\ ^3P^o$	
		91.2653			$^3P \rightarrow (^4P)6p\ ^3D^o$	
7	93.04	93.1677	92.6	$^1D \rightarrow (^2D)5p\ ^1F^o, ^1P^o, ^1D^o$	$^1D \rightarrow (^2D)5p\ ^1F^o$	
		93.3511			$^3P \rightarrow (^4P)7p\ ^3S^o, ^3D^o, ^3P^o$	$^1D \rightarrow (^2D)5p\ ^1D^o$
		93.3227				$^1D \rightarrow (^2D)5p\ ^1P^o$
		92.9456				$^3P \rightarrow (^4P)7p\ ^3D^o$
		92.9687				$^3P \rightarrow (^4P)7p\ ^3P^o$
8	94.18	94.0939	92.6	$^3P \rightarrow (^4P)8p\ ^3S^o, ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^4P)8p\ ^3P^o$	
		94.0680			$^3P \rightarrow (^4P)8p\ ^3D^o$	
		94.8599			$^3P \rightarrow (^4P)9p\ ^3P^o$	
9	95.02	94.8436	93.3	$^3P \rightarrow (^4P)9p\ ^3S^o, ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^4P)9p\ ^3D^o$	
		96.2968			$^1D \rightarrow (^2D)6p\ ^1F^o, ^1P^o, ^1D^o$	$^1D \rightarrow (^2D)6p\ ^1F^o$
		96.4192				$^1D \rightarrow (^2D)6p\ ^1D^o$
10	96.39	96.5988	95.9	$^1D \rightarrow (^2D)6p\ ^1F^o, ^1P^o, ^1D^o$	$^1D \rightarrow (^2D)6p\ ^1P^o$	
		97.8695			$^3P \rightarrow (^2P)4p\ ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^2P)4p\ ^3D^o$
		98.1565				$^3P \rightarrow (^2P)4p\ ^3P^o$
		98.4801				$^3P \rightarrow (^2P)4p\ ^3S^o$
11	97.81	97.8695	98.3	$^3P \rightarrow (^2P)4p\ ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^2P)4p\ ^3D^o$	
		98.1565			$^3P \rightarrow (^2P)4p\ ^3P^o$	
		98.4801			$^3P \rightarrow (^2P)4p\ ^3S^o$	
12	103.72	103.9907	104.4	$^3P \rightarrow (^2P)4p\ ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^2P)5p\ ^3D^o$	
		104.0954			$^3P \rightarrow (^2P)5p\ ^3D^o$	
		103.8748			$^3P \rightarrow (^2P)5p\ ^3S^o$	

表4  $Ne^{4+}$  离子自电离共振系列的能量(eV)

峰	能量			跃迁		
	实验	本工作	MCDF	Bizau 等 <sup>[5]</sup>	本工作	
3	123.55	124.2086	125.41	$^1S \rightarrow (^2D, ^2P)5p\ ^1P^o$	$^1S \rightarrow (^2D, ^2P)5p\ ^1P^o$	
4	129.48	130.0394	130.4	$^1D \rightarrow (^2S)4p\ ^1P^o$	$^1D \rightarrow (^2S)4p\ ^1P^o$	
		129.2517			$^1D \rightarrow (^2D)5p\ ^1P^o, ^1D^o, ^1F^o$	$^1D \rightarrow (^2D)5p\ ^1F^o$
		129.4027				$^1D \rightarrow (^2D)5p\ ^1D^o$
		128.370				$^1D \rightarrow (^2D)5p\ ^1P^o$
		129.2080				$^3P \rightarrow (^4P)7p\ ^3D^o$
129.3182	$^3P \rightarrow (^4P)7p\ ^3P^o$					
5	132.22	131.9670	133.5	$^3P \rightarrow (^2P)4p\ ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^2P)4p\ ^3D^o$	
		132.0421			$^3P \rightarrow (^2P)4p\ ^3P^o$	
6	133.55	133.7754	133.3	$^3P \rightarrow (^2D)5p\ ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^2D)5p\ ^3D^o$	
		132.9196			$^3P \rightarrow (^4P)6p\ ^3P^o$	
7	135.20	134.5157	134.0	$^1D \rightarrow (^2D)6p\ ^1P^o, ^1D^o, ^1F^o$	$^1D \rightarrow (^2D)6p\ ^1F^o$	
		134.5865			$^1D \rightarrow (^2D)6p\ ^1D^o$	
		134.7008			$^1D \rightarrow (^2D)6p\ ^1P^o$	
		138.9325			$^3P \rightarrow (^2D)6p\ ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^2D)6p\ ^3P^o$
138.7530	$^3P \rightarrow (^4P)8p\ ^3D^o$					
8	138.10	138.9325	138.0	$^3P \rightarrow (^2D)6p\ ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^2D)6p\ ^3P^o$	
		140.3651			$^1D \rightarrow (^2S)6p\ ^1P^o$	$^1D \rightarrow (^2D)7p\ ^1F^o$
9	140.04	140.3365	140.2	$^1D \rightarrow (^2S)6p\ ^1P^o$		$^1D \rightarrow (^2D)7p\ ^1D^o$
		143.0061			$^3P \rightarrow (^2P)5p\ ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^4P)5p\ ^3P^o$
143.1109	$^3P \rightarrow (^4P)5p\ ^3D^o$					
143.6034	$^3P \rightarrow (^4P)5p\ ^3S^o$					
10	143.06	143.0061	142.9	$^3P \rightarrow (^2P)5p\ ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^4P)5p\ ^3P^o$	
		147.8878			$^3P \rightarrow (^2P)6p\ ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^2P)6p\ ^3P^o$
		147.8538				$^3P \rightarrow (^2P)6p\ ^3D^o$
11	147.8	148.1178	147.7	$^3P \rightarrow (^2P)6p\ ^3D^o, ^3P^o$	$^3P \rightarrow (^2P)6p\ ^3S^o$	

中标记的每个峰实际上都来自多个共振的贡献. 对于个别共振峰, 我们给出的标记和 Bizau 等人<sup>[5]</sup>的结果有所不同, 如  $\text{Ne}^{4+}$  离子的第 7, 9 个峰, 我们通过分波光电离截面分别辨认为  $^1D \rightarrow ({}^2D) 6p ({}^1F^o, {}^1D^o, {}^1P^o)$ ,  $^1D \rightarrow ({}^2D) 7p ({}^1F^o, {}^1D^o)$ , 而 Bizau 等人辨认为  $^1D \rightarrow ({}^2S) 5p {}^1P^o$ ,  $^1D \rightarrow ({}^2S) 6p {}^1P^o$ .

#### 4. 结 论

本文在 LS 耦合下, 利用 R 矩阵方法计算了  $\text{F}^{3+}$

和  $\text{Ne}^{4+}$  离子的基态和多个激发态的分波光电离截面、总光电离截面及多个自电离共振系列的共振位置, 与已有的一些理论结果和新近的实验结果进行了比较. 由于我们的计算相对于其他的 R 矩阵计算考虑了更多组态相互作用, 其中包含了原子实 L 壳层和 K 壳层的激发组态, 使得我们计算得到的总截面的大小、共振结构的位置都与实验符合得更好, 相对于没有考虑原子实内壳层激发组态有很大的改进, 这些计算表明原子实内壳层激发组态对光电离截面有重要贡献, 需要在 R 矩阵计算中加以考虑.

- [1] Kjeldsen H 2006 *J. Phys. B* **39** R325
- [2] West J B 2001 *J. Phys. B* **34** R45
- [3] Seaton M J. 1987 *J. Phys. B* **20** 6363
- [4] Hummer D G, Berrington K A, Eissner W, Pradhan A K, Saraph H E, Tully J A 1993 *Astron. Astrophys.* **279** 298
- [5] Bizau J M, Champeaux J P, Cubaynes D, Wuilleumier F, Folkmann F, Jacobsen T, Penet F, Blancard C, Kjeldsen H 2005 *Astron. Astrophys.* **439** 387
- [6] Oura M, Yamaoka H, Kawatsura K, Kimata J, Hayaishi T, Takahashi T, Koizumi T, Sekioka T, Terasawa M, Itoh Y, Awaya Y, Yokoya A, Agui A, Yoshigoe A, Saitoh Y 2000 *Phys. Rev. A* **63** 014704
- [7] Yamaoka H, Oura M, Kawatsura K 2001 *Phys. Rev. A* **65** 012709
- [8] Covington A M, Aguilar A, Covington I R, Gharaibeh M F, Hinojosa G, Shirley C A, Phaneuf R A 2002 *Phys. Rev. A* **66** 062710
- [9] Defrance P, Chantrenne S, Rachafit S, Belic D S, Jureta J, Gregory D, Brouillard F 1990 *J. Phys. B* **23** 2333
- [10] Aguilar A, Emmons E D, Gharaibeh M F, Covington A M, Bozek J D, Ackerman G, Canton S, Rude B, Schlachter A S, Hinojosa G, Alvarez I, Cisneros C, McLaughlin B M, Phaneuf R A 2005 *J. Phys. B* **38** 343
- [11] Luo D and Pradhan A K 1989 *J. Phys. B* **22** 3377
- [12] Nahar S N, Pradhan A K 1997 *APJS* **111** 339
- [13] Wang G L and Zhou X X 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3833
- [14] Wu Y J, and Li J M 1989 *Acta. Phys. Sin.* **38** 1056 (in Chinese) [巫英坚、李家明 1989 物理学报 **38** 1056]
- [15] Wang G L, Wan J J and Zhou X X 2010 *J. Phys. B* **43** 035001
- [16] Burke P G and Berrington K A 1993 *Atomic and molecular processes: an R-matrix approach* (Bristol: Institute of Physics Publishing)
- [17] Berrington K A, Burke P G, Butler K, Seaton M J, Storey P J, Taylor K T, Yan Y 1987 *J. Phys. B* **20** 6379
- [18] Berrington K A, Eissner W B and Norrington P N 1995 *Comput. Phys. Commun.* **92** 290
- [19] Clementi E, Roetti C 1974 *At Data Nucl Data Tables.* **14** 177
- [20] Hibbert A 1975 *Comput. Phys. Commun* **9** 141
- [21] [http:// physics.nist.gov/PhysRefData/contents.html](http://physics.nist.gov/PhysRefData/contents.html)

# Theoretical calculation of photoionization of $F^{3+}$ and $Ne^{4+}$ ions \*

Sun Chang-Ping Wang Guo-Li Zhou Xiao-Xin<sup>†</sup>

(Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics & Functional Materials of Gansu Province, College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

(Received 8 July 2010; revised manuscript received 29 July 2010)

## Abstract

We have calculated the partial and total photoionization cross sections for ground states  $2s^22p^2(^3P)$  and excited states  $2s^22p^2(^1D, ^1S)$ ,  $2s2p^3(^5S^o)$  of  $F^{3+}$  and  $Ne^{4+}$  ions and analyzed and identified the corresponding transitions of autoionization resonances for the ions in the photoionization processes. The obtained resonance structures of total photoionization cross sections are compared with the recent experimental ones and other theoretical calculations. It is shown that our results are in good agreement with the recent experimental ones.

**Keywords:**  $F^{3+}$  ion and  $Ne^{4+}$  ion, photoionization, autoionization resonances,  $R$ -matrix

**PACS:** 32.80.Fb, 32.80.Zb

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11044007, 11064013), the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20096203110001), and the Foundation of Northwest Normal University (Grant No. NWNNU-KJCXGC-03-62).

<sup>†</sup> Corresponding author; E-mail: zhouxx@nwnu.edu.cn