

等离子体环境中相对论效应对类氢离子 光电离过程的影响*

戈迪¹⁾ 赵国鹏^{1)2)†} 祁月盈^{1)‡} 陈晨¹⁾ 高俊文²⁾ 侯红生²⁾

1) (嘉兴大学数据科学学院, 嘉兴 314001)

2) (杭州师范大学物理学院, 杭州 311121)

(2024年1月3日收到; 2024年1月20日收到修改稿)

本文在偶极近似下计算了 Debye 等离子体环境中 C^{5+} , Al^{12+} 和 W^{73+} 离子的光电离截面, 重点研究了相对论效应对势形共振、Cooper 极小和虚态效应的影响. 研究表明, 相对论效应随核电荷数的增大而增大, 使得精细结构劈裂越来越显著, 在光电离截面中出现了双共振结构的现象, 并且共振峰的大小、宽度和位置的差异都随着核电荷数的增加而越来越大; 分截面出现 Cooper 极小位置的差异也越来越大, 在总截面中叠加的极小值越来越浅; 出现虚态效应的等离子体屏蔽长度以及低能区光电离截面虚态增强的截面值也存在明显差异.

关键词: 光电离, 相对论效应, 势形共振, Cooper 极小

PACS: 32.80.Fb, 52.20.-j

DOI: 10.7498/aps.73.20240016

1 引言

光电离过程对原子结构有着非常敏感的依赖关系, 对其研究可以用来理解惯性约束聚变、激光和天体等离子体环境中的物理现象. 关于等离子体环境中的光电离过程, 已经有大量的理论研究工作, 对于经典的高温弱耦合等离子体环境可以采用 Debye 势^[1]

$$V(r, \lambda_D) = -\frac{Ze^2}{r} \exp(-r/\lambda_D) \quad (1)$$

描述粒子间相互作用, 其中 $\lambda_D = [k_B T_e / (4\pi e^2 n_e)]^{1/2}$ 是 Debye 屏蔽长度, Z 是离子的核电荷数, k_B 是玻尔兹曼常数, T_e 和 n_e 分别是等离子体的电子温度和密度. Debye 势 (1) 适用于库仑耦合参数 $\Gamma = (4\pi e^6 n_e / 3)^{1/3} / (k_B T_e) < 1$ 的情况. 早在 1975 年, 文献 [2] 就讨论了光电离截面中出现势形共振和虚态

效应的物理机制, 但是没有给出与束缚态进入连续态的临界屏蔽强度的关系, 文献 [1, 3] 不仅给出上述关系, 还讨论了等离子体屏蔽效应对 Cooper 极小^[4,5] 和 Combet-Farnoux 极小^[6] 的影响. 文献 [7–9] 采用复坐标旋转方法结合 Debye 势 (1) 分别讨论了类 Li 离子和考虑四极跃迁的光电离截面中出现的 Cooper 极小. 文献 [10, 11] 通过求解 Dirac 方程得到束缚和连续态波函数, 给出了考虑相对论效应的光电离截面, 发现与非相对论情况相比, 相对论效应对共振结构的影响主要体现在 Debye 屏蔽势 (1) 式中束缚态能级的精细结构劈裂.

对于温度低于电子费米温度以及电子德布罗意波长接近或大于平均粒子间距的低温稠密等离子体, 研究者们分别采用 cos-Debye 势^[12,13]、离子球模型势^[14–18] 和解析的 b-potential^[19,20] 研究了这种库仑耦合参数 $\Gamma > 1$ 的强耦合等离子体环境中类 H 离子^[13–15,20]、类 Li 离子^[14]、类 O 离子^[16] 以

* 国家自然科学基金 (批准号: 12105119) 和浙江省清洁能源与碳中和重点实验室开放基金 (批准号: 204022023006A) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: guopengzhao@zjxu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: yying_qi@zjxu.edu.cn

及 Si^{10+} - Si^{13+} 离子^[18] 的光电离过程. 由于 \cos -Debye 势的形式包含振荡结构, 研究发现这种屏蔽势中能够存在 s 波的势形共振^[13,21]. 对于耦合参数介于弱耦合和强耦合等离子体之间的温稠密等离子体, 人们采用一种考虑了电子简并、密度梯度修正和交换关联的屏蔽势^[22] 研究了其中的光电离过程^[23-25]. 文献^[25] 通过将这种屏蔽势的结果与 Debye 势 (1) 对比, 发现不同耦合强度的等离子体环境中的关联效应可以通过共振结构的差异体现出来. 除了上述等离子体环境, 最近研究者们还采用源自 Bogolyubov 方程的赝势^[26] 研究了非理想经典等离子体环境中 He 原子^[27] 和类氢 S 离子^[28] 的光电离过程.

综上所述, 关于不同等离子体环境效应对光电离过程的影响已经开展了大量的研究工作, 虽然其中一些工作给出了相对论的光电离截面, 但是缺少系统的讨论相对论效应, 尤其是核电荷数对等离子体环境中光电离过程的影响. 研究者们已经研究了相对论效应对等离子体环境中原子结构的影响^[29,30], 而光电离过程又对原子结构有非常敏感的依赖关系, 可以将这些影响显著地体现出来.

本文将以 C^{5+} , Al^{12+} 和 W^{73+} 离子为例, 结合 Debye 势 (1) 式研究偶极近似下相对论效应对等离子体环境中类氢离子光电离过程的影响. 计算中将选取接近临界屏蔽强度的等离子体参数, 对比 3 种离子的光电离截面, 重点讨论相对论效应对势形共振、Cooper 极小和虚态效应的影响. 除了光电离过程, 其他涉及连续态电子的原子过程, 如韧致辐射^[31,32]、电子弹性散射^[33,34]、电子碰撞电离^[35,36] 等也能够出现 Cooper 极小或势形共振结构, 因此本工作的结果可以为与这些原子过程相关的后续研究工作提供理论支持. C 离子、Al 离子和 W 离

子分别存在于惯性约束聚变等离子体^[23]、激光等离子体^[37] 和磁约束聚变等离子体环境^[38] 中, 本文的计算结果还能在这些领域提供数据支持. 本文如果不特别提及将采用原子单位.

2 计算方法

Debye 等离子体环境中类氢离子的狄拉克哈密顿量可以表示为^[10]

$$H = c\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{p} + (\beta - 1)c^2 + V(r, \lambda_D), \quad (2)$$

其中 c 是光速, $\boldsymbol{\kappa}$ 和 β 是狄拉克矩阵, \boldsymbol{p} 是动量算符. 束缚或连续电子狄拉克态的形式为

$$\begin{aligned} \psi_{g\kappa m}(Z, \lambda_D; r, \theta, \varphi) \\ = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{g\kappa}(Z, \lambda_D; r) \chi_{\kappa m}(\theta, \varphi) \\ iQ_{g\kappa}(Z, \lambda_D; r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}, \quad (3) \end{aligned}$$

其中 $P_{g\kappa}(Z, \lambda_D; r)$ 和 $Q_{g\kappa}(Z, \lambda_D; r)$ 分别是径向波函数的大分量和小分量, 在束缚态和连续态情况下 g 分别等于主量子数 n 和连续态电子的动能 ε . $\chi_{\kappa m}(\theta, \varphi)$ 是角自旋函数, 其形式为

$$\begin{aligned} \chi_{\kappa m}(\theta, \varphi) \\ = \sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}} \left\langle lm - \sigma \frac{1}{2} \sigma \left| l \frac{1}{2} jm \right\rangle Y_l^{m-\sigma}(\theta, \varphi) \phi^\sigma, \quad (4) \end{aligned}$$

其中 $\left\langle lm - \sigma \frac{1}{2} \sigma \left| l \frac{1}{2} jm \right\rangle$ 是 Clebsch-Gordan 系数, $Y_l^{m-\sigma}(\theta, \varphi)$ 是球谐函数, ϕ^σ 是自旋基函数.

通过标度变换:

$$\rho = Zr, \quad \delta = Z\lambda_D, \quad \zeta = Z/c, \quad \varepsilon_{g\kappa} = E_{g\kappa}/Z^2, \quad (5)$$

可以将类氢离子束缚和连续态径向波函数满足的狄拉克耦合方程:

$$\begin{pmatrix} V(r, \lambda_D) - E_{g\kappa}(Z, \lambda_D) & c \left(\frac{\kappa}{r} - \frac{d}{dr} \right) \\ c \left(\frac{\kappa}{r} + \frac{d}{dr} \right) & V(r, \lambda_D) - 2c^2 - E_{g\kappa}(Z, \lambda_D) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{g\kappa}(Z, \lambda_D; r) \\ Q_{g\kappa}(Z, \lambda_D; r) \end{pmatrix} = 0 \quad (6)$$

化为标度形式:

$$\begin{pmatrix} V(\rho, \delta) - \varepsilon_{g\kappa}(\zeta, \delta) & \frac{1}{\zeta} \left(\frac{\kappa}{\rho} - \frac{d}{d\rho} \right) \\ \frac{1}{\zeta} \left(\frac{\kappa}{\rho} + \frac{d}{d\rho} \right) & V(\rho, \delta) - \frac{2}{\zeta^2} - \varepsilon_{g\kappa}(\zeta, \delta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{g\kappa}(\delta; \rho) \\ Q_{g\kappa}(\delta; \rho) \end{pmatrix} = 0. \quad (7)$$

对于束缚态, $P_{n\kappa}(\delta; \rho) = P_{n\kappa}(Z, \lambda_D; r)/\sqrt{Z}$, $Q_{n\kappa}(\delta; \rho) = Q_{n\kappa}(Z, \lambda_D; r)/\sqrt{Z}$, 对于连续态, $P_{\varepsilon\kappa}(\delta; \rho) = \sqrt{Z}P_{\varepsilon\kappa}(Z, \lambda_D; r)$, $Q_{\varepsilon\kappa}(\delta; \rho) = \sqrt{Z}Q_{\varepsilon\kappa}(Z, \lambda_D; r)$. 束缚态和连续态径向波函数分别满足对角化条件:

$$\int_0^\infty d\rho [P_{nk}(\delta; \rho) P_{n'k}(\delta; \rho) + Q_{nk}(\delta; \rho) Q_{n'k}(\delta; \rho)] = \delta_{nn'}, \quad (8)$$

$$\int_0^\infty d\rho [P_{\varepsilon k}(\delta; \rho) P_{\varepsilon'k}(\delta; \rho) + Q_{\varepsilon k}(\delta; \rho) Q_{\varepsilon'k}(\delta; \rho)] = \delta(\varepsilon - \varepsilon'), \quad (9)$$

其中 $\delta_{nn'}$ 和 $\delta(\varepsilon - \varepsilon')$ 是 Kronecker delta.

类氢离子从总角动量为 j_a 的初束缚态 a 到末连续态 b 的总光电离截面可以表示为

$$\sigma_{ab}^{\text{Ph}}(\omega) = 2\pi^2 \alpha \frac{df_{ab}}{d\varepsilon}, \quad (10)$$

其中 α 是精细结构常数, $df_{ab}/d\varepsilon$ 是振子强度密度, 形式为

$$\frac{df_{ab}}{d\varepsilon} = \frac{\pi c}{(2j_a + 1)(2L + 1)\omega^2} |\langle \psi_{n\kappa} | \hat{O}^{(L)} | \psi_{\varepsilon\kappa'} \rangle|^2, \quad (11)$$

式中, ω 是光子能量, $\psi_{n\kappa}$ 和 $\psi_{\varepsilon\kappa'}$ 分别是初末态电子波函数, $\hat{O}^{(L)}$ 是 L 阶的多极辐射场算符, 对于 $L = 1$ 的电偶极跃迁, 跃迁矩阵元的形式为

$$\langle \psi_{n\kappa} | \hat{O}^{(L)} | \psi_{\varepsilon\kappa'} \rangle = \left(\frac{(2j_b + 1)\omega}{\pi c} \right)^{1/2} (-1)^{j_a - 1/2} \times \begin{pmatrix} j_a & L & j_b \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \bar{M}_{ab}(\omega, G_L), \quad (12)$$

其中 $\bar{M}_{ab}(\omega, G_L)$ 是跃迁积分^[39,40]. 标度化的光电离截面的形式为

$$\sigma_{ab}(\varepsilon, \delta_D) = Z^2 \sigma_{ab}^{\text{Ph}}(E, \lambda_D). \quad (13)$$

本工作分别采用修正的 GRASP2K 程序^[41] 和 CONTWVSA 程序^[42] 计算考虑相对论效应的束缚和连续态波函数, 采用 WKB 方法^[43] 对连续态波函数进行归一化. 需要说明的是, (5) 式中的标度变换依赖于 Z/c , 不再能将氢原子的结果完全拓展到所有类氢体系^[10], 但是不同类氢体系标度后的结果之间的差异正是来自于相对论效应, 因此, 通过对比标度变换后的结果, 可以将相对论效应的影响显著地体现出来.

3 计算结果与分析

3.1 临界屏蔽长度

Debye 势随 r 的增大, 其衰减速度快于 $-1/r^2$, 这种屏蔽势在屏蔽长度 λ_D 取有限值时仅能支持有限数量的束缚态^[44]. 因此, 逐渐减小屏蔽势的屏

蔽长度 λ_D 时, 某个 nlj 态的束缚能将逐渐减小, 在达到临界屏蔽长度时恰好减小到零. 表 1 给出了 C^{5+} , Al^{12+} 和 W^{73+} 离子 $n \leq 3$ 标度后 nlj 态的临界屏蔽长度 δ_{nlj}^c , 从表 1 可以看出, 对于相同的离子, 满足 $\delta_{nlj}^c < \delta_{n+1,lj}^c$, $\delta_{nlj}^c < \delta_{n,l+1,j}^c$, $\delta_{nlj}^c < \delta_{nl,j+1}^c$, 并且这些差异随主量子数 n 的增大变得更加明显. 对比 3 种不同离子标度的临界屏蔽长度, 可发现 $\delta_{nlj}^c(W^{74+}) < \delta_{nlj}^c(Al^{12+}) < \delta_{nlj}^c(C^{5+})$, 并且核电荷数越大, 对应 $\delta_{nl,j+1}^c$ 与 δ_{nlj}^c 之间的差异也越大, 这是由于相对论效应变得更加显著. 接下来, 将选取表 1 中临界值附近的标度屏蔽长度, 对比分析 C^{5+} , Al^{12+} 和 W^{73+} 离子对应光电离截面的差异, 讨论相对论效应对共振结构和 Cooper 极小的影响.

表 1 C^{5+} , Al^{12+} 和 W^{73+} 离子 $n \leq 3$ 的临界标度屏蔽长度 δ_{nlj}^c

Table 1. Values of critical scaled screening lengths δ_{nlj}^c for C^{5+} , Al^{12+} , and W^{73+} ions for $n \leq 3$.

n		$s_{1/2}$	$p_{1/2}$	$p_{3/2}$	$d_{3/2}$	$d_{5/2}$
	C^{5+}	0.8397				
1	Al^{12+}	0.8389				
	W^{73+}	0.8035				
	C^{5+}	3.2222	4.5391	4.5406		
2	Al^{12+}	3.2167	4.5324	4.5395		
	W^{73+}	2.9810	4.2398	4.4945		
	C^{5+}	7.1681	8.8690	8.8714	10.9464	10.9472
3	Al^{12+}	7.1573	8.8570	8.8680	10.9425	10.9460
	W^{73+}	6.6887	8.3325	8.7293	10.7822	10.8983

3.2 光电离截面

图 1 给出了 C^{5+} , Al^{12+} 和 W^{73+} 离子初态为 $1s_{1/2}$ 的标度的总光电离截面随标度的光电子能量的变化关系, 总截面是跃迁 $1s_{1/2} \rightarrow \varepsilon p_{1/2}$ 和 $1s_{1/2} \rightarrow \varepsilon p_{3/2}$ 贡献的分截面叠加后的结果. 从图 1 可以看出, 标度屏蔽长度取某些特定值时, 对应的标度光电离截面在低能区域出现了共振结构, 其峰值与非屏蔽情况相比大了几个数量级. 并且, C^{5+} , Al^{12+} 和 W^{73+} 离子出现共振结构的标度屏蔽长度不同, 分别为 $\delta = 4.53, 4.54, 8.85, 8.86$, $\delta = 4.53, 8.85, 8.86$ 和 $\delta = 4.23, 8.33$, 对比表 1 可以发现, 这些标度屏蔽长度均略小于对应 $3p_{1/2, 3/2}$ 态或 $2p_{1/2, 3/2}$ 态的临界标度屏蔽长度. 上述共振结构即势形共振, 源于标度屏蔽长度略小于对应束缚态 ($3p_{1/2, 3/2}$ 态或 $2p_{1/2, 3/2}$ 态) 的临界值时, $l > 0$ 的有效势中

存在离心势垒^[1,3,45], 能够暂时束缚连续态电子, 使得对应相同角动量的连续态 ($\epsilon p_{1/2, 3/2}$ 态) 波函数振幅出现反常增大, 与初始束缚态 ($1s_{1/2}$) 的耦合矩阵元也变得非常大, 从而导致共振峰的出现.

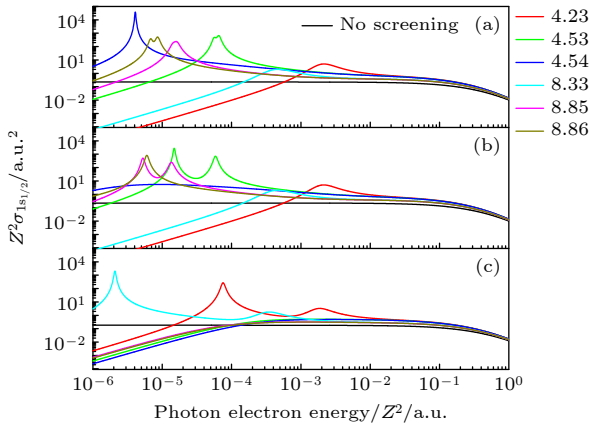


图 1 (a) C^{5+} , (b) Al^{12+} 和 (c) W^{73+} 离子初态为 $1s_{1/2}$ 的总标度光电离截面随标度的光电子能量的变化关系, 不同颜色的曲线对应不同的标度屏蔽长度
Fig. 1. Behavior of the total $1s_{1/2}$ scaled photoionization cross sections of (a) C^{5+} , (b) Al^{12+} and (c) W^{73+} ion as a function of scaled photoelectron energy. The colors of the lines are for different scaled screening lengths.

在图 1 还能看到一些标度屏蔽长度对应的标度光电离截面中出现了“双共振”的现象, 并且 3 种离子的双共振结构差异明显, 为了清楚阐明这一现象, 在图 2 中以 W^{73+} 离子为例, 给出了 $\delta_{2p_{1/2}}^c$ 和 $\delta_{2p_{3/2}}^c$ 附近的一系列标度屏蔽长度对应的初态为 $1s_{1/2}$ 的

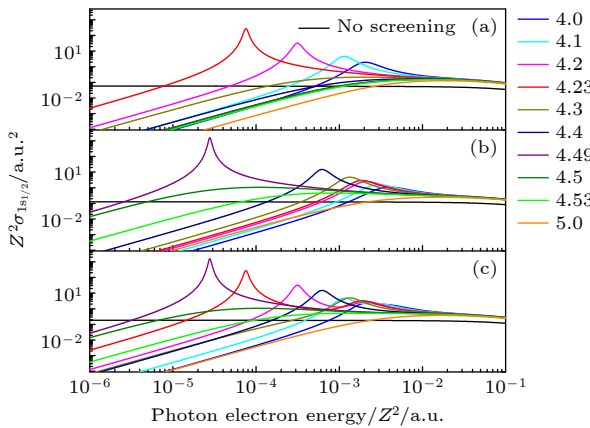


图 2 W^{73+} 离子初态为 $1s_{1/2}$ 的跃迁 (a) $1s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{1/2}$, (b) $1s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{3/2}$ 贡献的标度的分截面和 (c) 总光电离截面随标度的光电子能量的变化关系, 不同颜色的曲线对应不同的标度的屏蔽长度
Fig. 2. Behavior of scaled partial (a) $1s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{1/2}$, (b) $1s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{3/2}$ and (c) total $1s_{1/2}$ photoionization cross sections of W^{73+} ion as a function of scaled photoelectron energy. The colors of the lines are for different scaled screening lengths.

标度的总光电离截面和跃迁 $1s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{1/2}$, $1s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{3/2}$ 贡献的分截面随标度的光电子能量的变化关系. 图 2(a), (b) 分别在 $\delta = 4.0, 4.1, 4.2, 4.23$ 即 $\delta < \delta_{2p_{1/2}}^c$ 和 $\delta = 4.0, 4.1, 4.2, 4.23, 4.3, 4.4, 4.49$ 即 $\delta < \delta_{2p_{3/2}}^c$ 时存在共振峰, 总截面中的双共振峰是两个分截面的贡献叠加后的结果. 并且, δ 与 $\delta_{2p_{1/2}}^c$ 或 $\delta_{2p_{3/2}}^c$ 的差异越大, 共振峰的峰值越小, 分布越宽, 对应的光电子能量越高. 因此, 图 1 中从 C^{5+} 到 Al^{12+} 再到 W^{73+} 离子对应标度光电离截面中出现双共振结构的两峰值大小、宽度和位置的差异都越来越大, 正是由于表 1 所示的精细结构劈裂对应的临界值的差异随核电荷数 Z 的增大而增大, 即相对论效应的差异造成了不同离子双共振结构的差异.

图 3 和图 4 分别选取 $\delta_{3p_{1/2,3/2}}^c$ 和 $\delta_{2p_{1/2,3/2}}^c$ 附近的标度屏蔽长度, 给出了 C^{5+} , Al^{12+} 和 W^{73+} 离子初态为 $2s_{1/2}$ 的标度的总光电离截面随标度的光电子能量的变化关系, 总截面是跃迁 $2s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{1/2}$ 和 $2s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{3/2}$ 贡献的分截面叠加后的结果. 对比图 3 和表 1 可以看出, $\delta = 8.33$ 时略小于 $\delta_{3p_{1/2}}^c$ (W^{74+}), 与 $\delta_{3p_{3/2}}^c$ (W^{74+}), $\delta_{3p_{1/2,3/2}}^c$ (Al^{12+}) 和 $\delta_{3p_{1/2,3/2}}^c$ (C^{5+}) 均相差较大, 在图 3(c) 中表现出双共振结构, 且两个共振峰差异较大, 第 2 个共振峰的结构和出现的位置和图 3(a), (b) 中 C^{5+} 和 Al^{12+} 的共振结构相似. $\delta = 8.72$ 时略小于 $\delta_{3p_{3/2}}^c$ (W^{74+}) 但大于 $\delta_{3p_{1/2}}^c$ (W^{74+}), 在图 3(c) 中出现了一个尖锐的共振峰, 并且与图 3(a), (b) 中的共振峰有较大差异. $\delta \geq 8.85$ 时已经大于

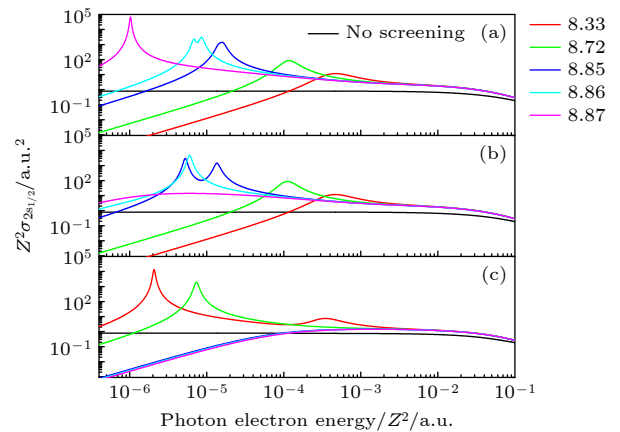


图 3 (a) C^{5+} , (b) Al^{12+} 和 (c) W^{73+} 离子初态为 $2s_{1/2}$ 的总标度光电离截面随标度的光电子能量的变化关系, 不同颜色的曲线对应不同的标度的屏蔽长度
Fig. 3. Behavior of the total $2s_{1/2}$ scaled photoionization cross sections of (a) C^{5+} , (b) Al^{12+} and (c) W^{73+} ion as a function of scaled photoelectron energy. The colors of the lines are for different scaled screening lengths.

$\delta_{3p_{1/2,3/2}}^c(W^{74+})$, 图 3(c) 中没有共振结构. 其中 $\delta = 8.85$ 时略小于 $\delta_{3p_{1/2}}^c(Al^{12+})$, 并且与 $\delta_{3p_{3/2}}^c(Al^{12+})$ 相差较小, 在图 3(b) 中表现出结构相近的两个共振峰, 而 $\delta_{3p_{1/2}}^c(C^{5+})$ 和 $\delta_{3p_{3/2}}^c(C^{5+})$ 相差较小, 并且虽然小于但不够接近 8.85, 跃迁 $2s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{1/2}$ 和 $2s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{3/2}$ 贡献的分截面形成了两个位置接近的分辨率较低 (峰值较宽) 的共振峰, 叠加之后在图 3(a) 中表现为一个共振峰. $\delta = 8.86$ 时略小于 $\delta_{3p_{3/2}}^c(Al^{12+})$ 和 $\delta_{3p_{1/2}}^c(C^{5+})$, 图 3(b) 中出现了一个共振峰, 图 3(a) 中出现了可以分辨的双共振结构. $\delta = 8.87$ 时略小于 $\delta_{3p_{3/2}}^c(C^{5+})$ 但是大于 $\delta_{3p_{1/2,3/2}}^c(Al^{12+})$, 仅在图 3(a) 中出现了一个尖锐的共振峰.

图 4 中不仅存在与图 3 相比物理机制一致的势形共振结构, 并且在中高能区还出现了极小值, 即 Cooper 极小, 是由于初态波函数包含节点时, 对应的光电离截面的跃迁矩阵元将经过零点导致的. 过去的研究工作已经发现, 对于 $nl \rightarrow \epsilon, l+1$ 跃迁贡献的光电离截面, Cooper 极小仅出现在 δ_{nl}^c 附近^[1,3], 因此图 3 中 $\delta_{3p_{1/2,3/2}}^c$ 附近的临界标度屏蔽长度对应的截面中没有出现 Cooper 极小. 图 4(a), (b) 中的 Cooper 极小结构非常接近, 并且与图 4(c) 相比差异较大.

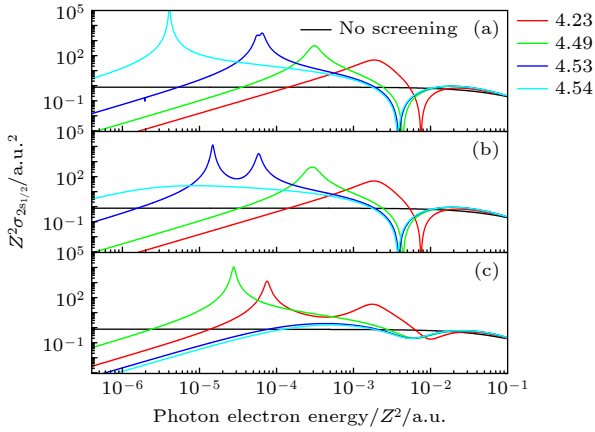


图 4 (a) C^{5+} , (b) Al^{12+} 和 (c) W^{73+} 离子初态为 $2s_{1/2}$ 的总标度光电离截面随标度的光电子能量的变化关系, 不同颜色的曲线对应不同的标度的屏蔽长度

Fig. 4. Behavior of the total $2s_{1/2}$ scaled photoionization cross sections of (a) C^{5+} , (b) Al^{12+} and (c) W^{73+} ion as a function of scaled photoelectron energy. The colors of the lines are for different scaled screening lengths.

为了清楚展现核电荷数较大时的 Cooper 极小, 在图 5 中, 选取与图 4 相同的标度屏蔽长度, 给出了 W^{73+} 离子跃迁 $2s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{1/2}$ 和 $2s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{3/2}$

贡献的分截面随标度的光电子能量的变化关系. 对比图 5(a), (b) 两幅图, 可以发现同一个屏蔽长度对应的跃迁 $2s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{1/2}$ 和 $2s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{3/2}$ 贡献的分截面中出现 Cooper 极小的位置差异较大, 因此叠加之后在图 4(c) 的总截面中形成了较浅的极小值. 因此, 核电荷数较大时, 相对论效应产生的精细结构劈裂, 不仅对势形共振结构影响较大, 还能够显著影响 Cooper 极小的深度和出现的位置.

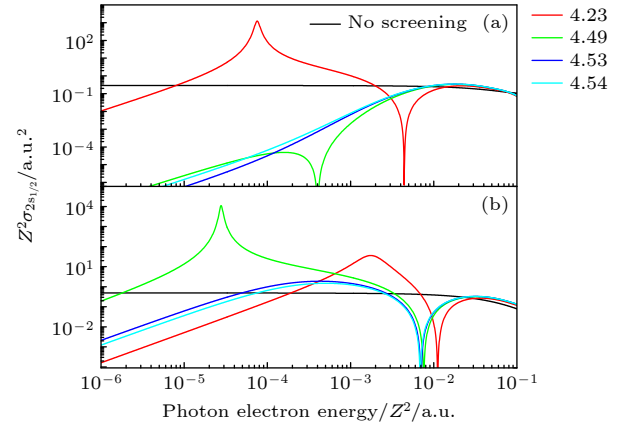


图 5 W^{73+} 离子跃迁 (a) $2s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{1/2}$ 和 (b) $2s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{3/2}$ 贡献的分截面随标度的光电子能量的变化关系. 不同颜色的曲线对应不同的标度的屏蔽长度

Fig. 5. Behavior of partial (a) $2s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{1/2}$ and (b) $2s_{1/2} \rightarrow \epsilon p_{3/2}$ scaled photoionization cross sections of W^{73+} ion as a function of scaled photoelectron energy. The colors of the lines are for different scaled screening lengths.

图 6 选取 $\delta_{3s_{1/2}}^c$ 和 $\delta_{3d_{3/2}}^c$ 附近的标度屏蔽长度, 给出了 C^{5+} , Al^{12+} 和 W^{73+} 离子初态为 $2p_{1/2}$ 的标度的总光电离截面随标度的光电子能量的变化关系, 总截面是跃迁 $2p_{1/2} \rightarrow \epsilon s_{1/2}$ 和 $2p_{1/2} \rightarrow \epsilon d_{3/2}$ 贡献的分截面叠加后的结果. 对比图 6 和表 1 可以发现, $\delta = 6.68$ 和 $\delta = 7.15$ 时分别略小于 $\delta_{3s_{1/2}}^c(W^{74+})$ 和 $\delta_{3s_{1/2}}^c(Al^{12+}, C^{5+})$, 但是由于 $l=0$ 的有效势中不存在离心势垒, 没有在图 6(b), (c) 对应的光电离截面中出现共振峰, 而是在低能区域表现为能量分布较宽的极大值, 即虚态效应, 能够出现在 $\delta_{ns_{1/2}}^c$ 附近的屏蔽长度 (即 δ 略小于或略大于 $\delta_{ns_{1/2}}^c$) 对应的截面中^[1,3]. 并且屏蔽长度 δ 越接近 $\delta_{ns_{1/2}}^c$, 对应低能区域的截面值越大, 因此图 6(a), (b) 中 C^{5+} 和 Al^{12+} 光电子能量约为 10^{-7} a.u. 的光电离截面分别满足 $\sigma(\delta = 7.17) > \sigma(\delta = 7.15)$ 和 $\sigma(\delta = 7.15) > \sigma(\delta = 7.17)$. 由于仅有跃迁 $2p_{1/2} \rightarrow \epsilon d_{3/2}$ 贡献的分截面中能够出现势形共振, 因此图 6 中不存在双共振结构.

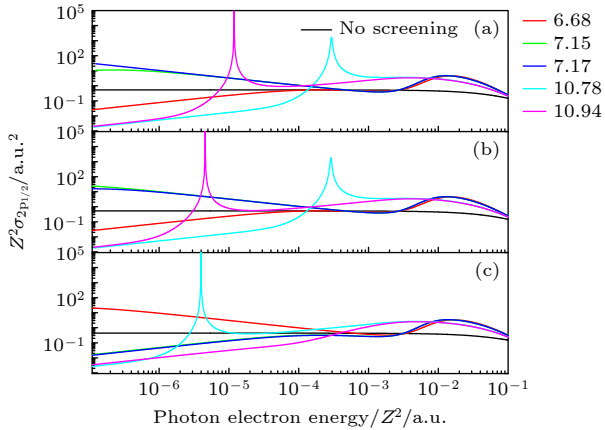


图 6 (a) C^{5+} , (b) Al^{12+} 和 (c) W^{73+} 离子初态为 $2p_{1/2}$ 的总标度光电离截面随标度的光电子能量的变化关系, 不同颜色的曲线对应不同的标度的屏蔽长度

Fig. 6. Behavior of the total $2p_{1/2}$ scaled photoionization cross sections of (a) C^{5+} , (b) Al^{12+} and (c) W^{73+} ion as a function of scaled photoelectron energy. The colors of the lines are for different scaled screening lengths.

图 7 选取与图 6 相同的标度屏蔽长度, 给出了 C^{5+} , Al^{12+} 和 W^{73+} 离子初态为 $2p_{3/2}$ 的标度的总光电离截面随标度的光电子能量的变化关系, 总截面是跃迁 $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon s_{1/2}$, $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{3/2}$ 和 $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{5/2}$ 贡献的分截面叠加后的结果. 由于跃迁 $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon s_{1/2}$ 贡献的虚态效应同样决定于对应的屏蔽长度是否在 $\delta_{ns_{1/2}}^c$ 附近, 因此, $\delta = 6.68, 7.15, 7.17$ 时图 7 中的光电离截面与图 6 非常相似. $\delta = 10.78, 10.94$ 时, 不同于图 6 中仅有跃迁 $2p_{1/2} \rightarrow \epsilon d_{3/2}$ 贡献的单共振峰, 图 7 出现了跃迁 $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{3/2}$ 和 $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{5/2}$ 贡献的分截面叠加后的双共振结构.

但是 $\delta = 10.78$ 时在图 7(a), (b) 中仅能看到单共振峰, 为了解释这一现象, 在图 8 中给出了 Al^{12+} 离子跃迁 $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon s_{1/2}$, $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{3/2}$ 和 $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{5/2}$ 贡献的分标度截面随标度的光电子能量的变化关系. 如图 8(b), (c) 所示, 对比跃迁 $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{3/2}$ 和 $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{5/2}$ 贡献的分截面中的共振峰, $\delta = 10.94$ 时峰值位置有明显差异, 而 $\delta = 10.78$ 时由于与 $\delta_{3d_{3/2}}^c$ 和 $\delta_{3d_{5/2}}^c$ 都相距较远, 峰值位置非常接近且不够尖锐, 因此叠加之后难以相互分辨, 在图 7(b) 中仅能看到单共振峰. 根据图 8 还可看到, $\delta = 7.15$ 和 $\delta = 7.17$ 时, 图 8(a) 中跃迁 $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon s_{1/2}$ 贡献的分截面由于虚态效应在较低的能量区域趋于极大值, 而图 8(b), (c) 中跃迁 $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{3/2}$ 和 $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{5/2}$ 贡献的分截面则是较高能量区域对应的截

面值更大, 这些分截面叠加之后在图 7(b) 中光电子能量约为 2×10^{-3} a.u. 的位置出现了极小值, 即 Combet-Farnoux 极小^[1,3,6], 图 7(a), (c) 中分别在 $\delta = 7.15, 7.17$ 和 $\delta = 6.68$ 时能够看到类似的结构.

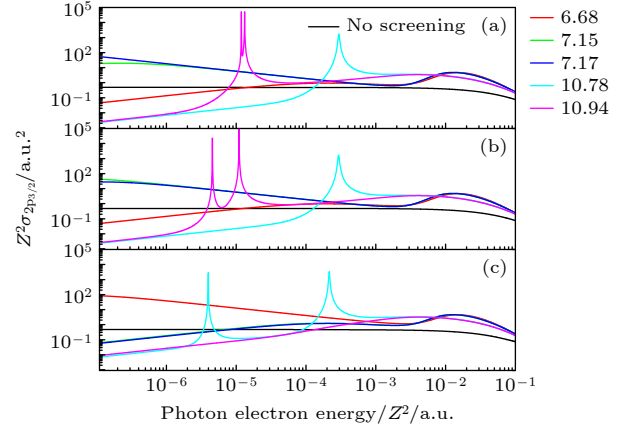


图 7 (a) C^{5+} , (b) Al^{12+} 和 (c) W^{73+} 离子初态为 $2p_{3/2}$ 的总标度光电离截面随标度的光电子能量的变化关系, 不同颜色的曲线对应不同的标度的屏蔽长度

Fig. 7. Behavior of the total $2p_{3/2}$ scaled photoionization cross sections of (a) C^{5+} , (b) Al^{12+} and (c) W^{73+} ion as a function of scaled photoelectron energy. The colors of the lines are for different scaled screening lengths.

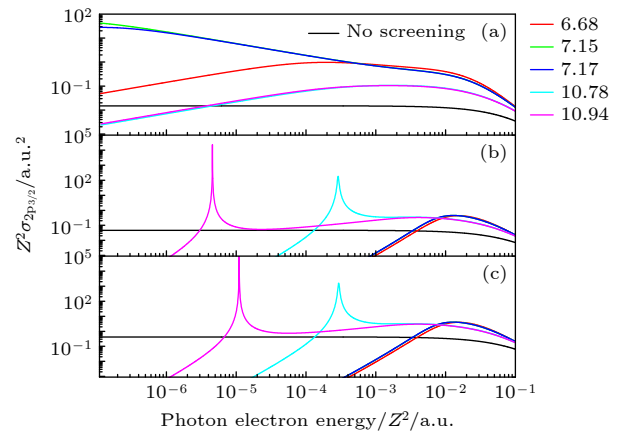


图 8 Al^{12+} 离子跃迁 (a) $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon s_{1/2}$, (b) $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{3/2}$ 和 (c) $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{5/2}$ 贡献的分标度截面随标度的光电子能量的变化关系. 不同颜色的曲线对应不同的标度的屏蔽长度

Fig. 8. Behavior of partial (a) $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon s_{1/2}$, (b) $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{3/2}$, and (c) $2p_{3/2} \rightarrow \epsilon d_{5/2}$ scaled photoionization cross sections of Al^{12+} ion as a function of scaled photoelectron energy. The colors of the lines are for different scaled screening lengths.

4 结 论

本文用 Debye 势 (1) 式, 以 C^{5+} , Al^{12+} 和 W^{73+} 离子为例研究了等离子体环境中相对论效应对类氢离子光电离过程的影响. 研究发现, 标度屏蔽长

度在某些束缚态的临界值附近时, 由于可能存在势形共振、Cooper 极小或虚态效应, 相对论效应使得核电荷数不同的离子对应的标度光电离截面差异显著.

势形共振源于角动量 $l > 0$ 的末连续态对应的有效势中存在离心势垒, 同时相对论效应带来的精细结构劈裂使得总截面中能够出现双共振峰, 又由于共振峰的峰值宽度和能量位置与屏蔽长度临近临界值的程度相关, 导致随核电荷数 Z 的增大, 从 C^{5+} 到 Al^{12+} 再到 W^{73+} 离子对应光电离截面中出现双共振结构的两峰值大小、宽度和位置的差异都越来越大.

Cooper 极小出现在初态波函数至少包含一个极点的跃迁 $nlj \rightarrow \varepsilon, l+1, j'$ 对应的光电离截面中, 其光电子能量位置与末连续态对应的临界屏蔽长度相关, 因此, 不同于 C^{5+} 和 Al^{12+} 离子对应的总光电离截面中出现的较深的极小值, 对于核电荷数较大的 W^{73+} 离子, 相对论效应产生的显著的精细结构劈裂, 使得分截面 Cooper 极小的位置差异较大, 在总截面中叠加出较浅的极小值.

虚态效应出现在跃迁 $np_{1/2, 3/2} \rightarrow \varepsilon s_{1/2}$ 对应的光电离截面中, 并且低能区光电离截面虚态增强的截面值大小与临近 $\delta_{ns_{1/2}}^c$ 的程度相关, 因此, 核电荷数较大的 W^{73+} 离子出现虚态效应的屏蔽长度与 C^{5+} 和 Al^{12+} 离子完全不同, 对于同一个屏蔽长度, C^{5+} 和 Al^{12+} 离子出现虚态增强的低能区极大值也有明显差异.

参考文献

- [1] Qi Y Y, Wang J G, Janev R K 2009 *Phys. Rev. A* **80** 063404
- [2] Shore B W 1975 *J. Phys. B* **8** 2023
- [3] Qi Y Y, Wang J G, Janev R K 2011 *Eur. Phys. J. D* **63** 327
- [4] Cooper J W 1962 *Phys. Rev.* **128** 681
- [5] Yin R Y, Pratt R H 1987 *Phys. Rev. A* **35** 1149
- [6] Combet-Farnoux F 1972 *Proceedings of the International Conference on Inner Shell Ionization Phenomena* (Vol. 2) (Atlanta: University of Georgia Press) p1130
- [7] Lin C Y, Ho Y K 2010 *Phys. Rev. A* **81** 033405
- [8] Lin C Y, Ho Y K 2010 *Phys. Plasmas* **17** 093302
- [9] Lin C Y, Ho Y K 2011 *Phys. Scr. T* **144** 014051
- [10] Xie L Y, Wang J G, Janev R K 2014 *Phys. Plasmas* **21** 063304
- [11] Zheng X, Chi H C, Lin S T, Jiang G, Qiao C, Huang K N 2019 *Indian J. Phys.* **93** 267
- [12] Shukla P K, Eliasson B 2008 *Phys. Lett. A* **372** 2897
- [13] Qi Y Y, Wang J G, Janev R K 2017 *Phys. Plasmas* **24** 062110
- [14] Das M 2014 *Phys. Plasmas* **21** 012709
- [15] Chen Z B, Wang K 2020 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **245** 106847
- [16] Sharma R, Goyal A 2022 *Indian J. Phys.* **96** 1829
- [17] Zeng J, Li Y, Gao C, Yuan J 2020 *A&A* **634** A117
- [18] Zeng J, Li Y, Yuan J 2021 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **272** 107777
- [19] Li X, Rosmej F B 2020 *Phys. Lett. A* **384** 126478
- [20] Dawra D, Dimri M, Singh A K, Jha A K S, Pandey R K, Sharma R, Mohan M 2021 *Phys. Plasmas* **28** 112706
- [21] Singh D, Varshni Y P 1983 *Phys. Rev. A* **28** 2606
- [22] Stanton L G, Murillo M S 2015 *Phys. Rev. E* **91** 033104
- [23] Zhao G P, Xie L Y, Liu L, Wang J G, Janev R K 2018 *Phys. Plasmas* **25** 083302
- [24] Chen Z B, Qi Y Y, Sun H Y, Zhao G P, Liu P F, Wang K 2020 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **253** 107170
- [25] Zhao G P, Chen C, Liu L, Chen Z B, Qi Y Y, Wang J G 2022 *Phys. Plasmas* **29** 053301
- [26] Baimbetov F B, Nurekenov Kh T, Ramazanov T S 1995 *Phys. Lett. A* **202** 211
- [27] Das N, Das B, Ghoshal A 2022 *Phys. Plasmas* **29** 073505
- [28] Chen Z B 2023 *Few-Body Syst.* **64** 74
- [29] Chen Z B, Hu H W, Ma K, Liu X B, Guo X L, Li S, Zhu B H, Huang L, Wang K 2018 *Phys. Plasmas* **25** 032108
- [30] Xie H H, Jiao L G, Liu A, Ho Y K 2021 *Int. J. Quantum Chem.* **121** e26653
- [31] Wu J Y, Wu Y, Qi Y Y, Wang J G, Janev R K, Zhang S B 2019 *Phys. Rev. A* **99** 012705
- [32] Wu J Y, Qi Y Y, Cheng Y J, Wu Y, Wang J G, Janev R K, Zhang S B 2020 *Phys. Plasmas* **27** 043301
- [33] Zhao G P, Qi Y Y, Liu L, Wang J G, Janev R K 2019 *Phys. Plasmas* **26** 063509
- [34] Chen C, Zhao G P, Chen Z B, Qi Y Y, Liu L, Wu Y, Wang J G 2023 *Phys. Plasmas* **30** 123503
- [35] Qi Y Y, Ning L N, Wang J G, Qu Y Z 2013 *Phys. Plasmas* **20** 123301
- [36] Qi Y Y, Ye D D, Wang J G, Qu Y Z 2015 *Chin. Phys. B* **24** 033403
- [37] Hoarty D J, Allan P, James S F, Brown C R D, Hobbs L M R, Hill M P, Harris J W O, Morton J, Brookes M G, Shepherd R, Dunn J, Chen H, Marley E V, Beiersdorfer P, Chung H K, Lee R W, Brown G, Emig J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 265003
- [38] Gormezano C, Sips A C C, Luce T C, Ide S, Becoulet A 2007 *Nucl. Fusion* **47** S285
- [39] Dylla K G, Grant I P, Johnson C T, Parpia F A, Plummer E P 1989 *Comput. Phys. Commun.* **55** 425
- [40] Grant I P 1974 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **7** 1458
- [41] Jönsson P, He X, Froese Fischer C, Grant I P 2007 *Comput. Phys. Commun.* **177** 597
- [42] Tews M G, Perger W F 2001 *Comput. Phys. Commun.* **141** 205
- [43] Perger W F, Halabuka Z, Trautmann D 1993 *Comput. Phys. Commun.* **76** 250
- [44] Landau L D, Lifshitz E M 1958 *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* (London: Pergamon)
- [45] Bilycki M, Stachov A, Karwowski J, Mukherjee P K 2007 *Chem. Phys.* **331** 346

Influence of relativistic effects on photoionization process of hydrogen-like ions in plasma environment*

Ge Di¹⁾ Zhao Guo-Peng^{1)2)†} Qi Yue-Ying^{1)‡} Chen Chen¹⁾
Gao Jun-Wen²⁾ Hou Hong-Sheng²⁾

1) (*College of Data Science, Jiaxing University, Jiaxing 314001, China*)

2) (*School of Physics, Hangzhou Normal University, Hangzhou 311121, China*)

(Received 3 January 2024; revised manuscript received 20 January 2024)

Abstract

In this study, the photoionization cross sections of C^{5+} , Al^{12+} , and W^{73+} ions in a Debye plasma environment are calculated in the dipole approximation. The main emphasis is placed on investigating the influence of relativistic effects on shape resonances, Cooper minima, and virtual state effects. The relativistic effects lead to fine-structure splittings, allowing the appearance of double-shape resonance peaks in the total cross-section. Because the width and energy position of resonance peak are affected by the near critical screening length, the increase of nuclear charge Z leads to the significant differences in the size, width, and position of the double-shape resonance peak. The energy position of Cooper minimum in the photoelectrons is related to the critical screening length corresponding to the final continuum state. Unlike the deeper minima observed in the total photoionization cross-sections for C^{5+} and Al^{12+} ions, for the higher nuclear charge of W^{73+} ions, the significant fine-structure splitting arising from relativistic effects results in substantial differences in the positions of the Cooper minima in the partial cross-sections. Therefore, when superimposed on the total cross section, these minima appear shallower. The W^{73+} ion has a higher nuclear charge, and the screening length related to the virtual state effect is completely different from that of C^{5+} ion and Al^{12+} ion. Moreover, for the same screening length, there is a significant difference in the virtual state enhancement amplitude between C^{5+} ion and Al^{12+} ion in the low energy region.

Keywords: photoionization, relativistic effect, shape resonance, Cooper minima

PACS: 32.80.Fb, 52.20.-j

DOI: 10.7498/aps.73.20240016

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12105119) and the Open Foundation for Key Laboratory of Clean Energy and Carbon Neutrality of Zhejiang Province, China (Grant No. 204022023006A).

† Corresponding author. E-mail: guopengzhao@zjxu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: yying_qi@zjxu.edu.cn

等离子体环境中相对论效应对类氢离子光电离过程的影响

戈迪 赵国鹏 祁月盈 陈晨 高俊文 侯红生

Influence of relativistic effects on photoionization process of hydrogen-like ions in plasma environment

Ge Di Zhao Guo-Peng Qi Yue-Ying Chen Chen Gao Jun-Wen Hou Hong-Sheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 083201 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240016

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240016>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

光电离速率影响大气压空气正流注分支的机理研究

Influence of photoionization rates on positive streamer branching in atmospheric air

物理学报. 2019, 68(9): 095202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190060>

光电离过程中Fe靶和V靶特征辐射的角相关研究

Angular distribution of characteristic X-ray emission from Fe and V following photoionization

物理学报. 2020, 69(4): 043201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191524>

不同缓冲气体中ArF准分子激光系统放电特性分析

Analysis of ArF excimer laser system discharge characteristics in different buffer gases

物理学报. 2020, 69(17): 174207 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200087>

光子碰撞Au靶产生L系特征X射线角分布

Angular distribution of L characteristic X-ray emission from Au target impacted by photons

物理学报. 2020, 69(12): 123201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191977>

NO分子形状共振阿秒动力学精密测量

Precise measurement of attosecond dynamics of NO molecular shape resonance

物理学报. 2022, 71(23): 233301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221735>

Stark效应诱导的类氢离子 $2s_{1/2}-1s_{1/2}$ 跃迁几率的理论研究

Theoretical investigation on Stark-induced transition probabilities of hydrogen-like ions

物理学报. 2021, 70(17): 173201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210181>