第 57 卷 第 4 期 2008 年 4 月
1000-3290/2008/57(04)/2152-09

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.57,No.4,April,2008
©2008 Chin. Phys. Soc.

锂原子光电离过程中的弛豫效应*

桑萃萃[1)] 万建杰[1)] 董晨钟[1)2)†] 丁晓彬[1)] 蒋 军[1)]

1)(西北师范大学物理与电子工程学院,兰州 730070)

2)(兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心,兰州 730000)

(2007 年 6 月 4 日收到;2007 年 10 月 23 日收到修改稿)

利用基于多组态 Dirac-Fock 方法的程序包 GRASP92 和 RATIP 以及在此基础上最新发展的 RERR06 程序,计算了锂原子 $1s^2nl$($n=2,3$;$l=$ s, p) 的内壳层和外壳层的光电离截面. 计算中详细考虑了光电离过程中的弛豫效应. 结果表明 在锂原子内壳层电子的光电离过程中弛豫效应较强,而在外壳层电子的光电离过程中弛豫效应较弱. 另外,相应于不同态的内壳层光电离过程,其弛豫效应的影响也不同,对激发态的影响比对基态的影响大,对高激发态的影响比对低激发态的影响大.

关键词:多组态 Dirac-Fock 方法,光电离截面,弛豫效应

PACC:3290,3280,3120T

1. 引 言

光电离 (photoionization) 是指原子(或离子) 吸收入射光子的能量,使原子(或离子)中的电子摆脱原子核的束缚变为连续电子的过程,它是辐射复合(RR)的逆过程[1]. 对光电离过程的研究在天体物理、X 射线激光、高温等离子体以及热核聚变等的研究中都有广泛应用. 当原子(或离子)中一个电子被电离后,剩余离子中的势场将发生变化,使剩余电子的电荷密度发生重排,即所谓的弛豫. 这种现象的一种直接效应就是在发生光电离过程的同时还伴随着其他电子的激发或退激发,即所谓的振激或振退过程. 若光电离后剩余电子仍处在原来的轨道,则此过程为单电子过程,主要的电离机理来自于辐射场与原子相互作用,相应的光电离截面称为主光电离截面 若光电离后还伴随着一个剩余电子振激(或振退),则此过程为多电子过程,相应的光电离截面称为振激(或振退)截面. 已有的理论和实验研究发现,多电子过程在有些原子(或离子)的光电离过程中并不明显[2],但对有些原子(或离子), 弛豫效应占有很重要的比重,甚至有时振激(或振退)截面会大于主截面[1].

锂原子是最简单的开壳层多电子系统,也是理论和实验关注最多的体系,对它的细致研究不仅能够检验已有理论和实验方法的精确性,也会对其他原子的光电离过程的理解提供有益的帮助. 在理论方面,早在 1975 年,文献[3, 4]已经分别用极化轨道方法和多体微扰理论计算了锂原子基态的外壳层光电离截面. 1976 年,Aymer 等[5]在非相对论单电子模型下计算了锂原子基态和各种激发态 $1s^2nl$ ($n=2,\cdots,8$;$l=$ s, p, d) 的外壳层光电离截面,研究了它们在电离限附近的非类氢行为. 1990 年和 1991 年,文献[6, 7]分别用 R 矩阵方法和非共振多通道散射理论计算了锂原子基态的内壳层光电离截面. 1993 年,Lahiri 等[8]用 Hartree-Slater (HS) 方法计算了锂原子 $1s^2nl$($n=2,3,4,5$;$l=$ s, p) 的外壳层光电离截面,从而得出了锂离子的 RR 截面. 1996 年,Kupliauskienė 等[9]采用偶极近似下的 Hartree-Fock (HF) 方法,通过考虑轨道弛豫效应,计算了锂原子的基组态和第一激发组态 $1s^22p$ 的内壳层光电离截面,同时给出了振激截面与主截面的比值. 1999 年,Zhou 等[10]又用 R 矩阵方法精确计算了激发组态 $1s^22p$ 和 $1s^23p$ 的内壳层光电离截面. 但是到目前为止,对锂原子基态及各种激发态的内壳层和外壳层的光电离截面还缺少系统的理论研究. 在实验方

* 国家自然科学基金(批准号:10434100,10774122)、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和西北师范大学科技创新工程(批准号:NWNU-KJCXGC-03-21)资助的课题.

† E-mail:dongcz@nwnu.edu.cn

面，1965 年，Hudson 等[11]就已经观测到了锂原子基态的外壳层光电离过程. 1987 年，Ferrett 等[12]观测了锂原子基态的内壳层光电离过程. 但由于该实验的分辨率不高，在光电子谱中不仅到末态 $1s3l$（l = s，p，d）各子态的截面不能完全分开，即使到末态 $1s2l$（l = s，p，d）^1S 和 ^3P 的截面也不能分开. 1991 年，Langer 等[13]又进一步测量了锂原子基态的内壳层光电离截面，这时到末态 $1s2l$ ^1S 和 ^3P 的截面已经能完全分开. 对于激发态的锂原子，由于实验上的困难，直到 2000 年 Cheng 等[14]才对组态 $1s^2nl$（n = 2，…，10）的内壳层光电离截面进行了测量，得到了光子能量为 100 eV 时的光电子谱. 在该实验中，到末态 $1snl$（n = 2，3）$^{1,3}S$ 和 $^{1,3}P$ 的截面已能完全分辨. 近年来，随着磁光阱（MOT）技术和其他实验技术的发展，人们已能较好地获取并储存激发态锂原子，从而可以更好地对其激发态的光电离过程进行观测. 例如，2001 年，Wippel 等[15]观测了处于激发态 $1s^22p\ ^2P_{3/2}$ 的锂原子的外壳层光电离过程；2006 年，Amin 等[16]观测了处于激发态 $1s^22p\ ^2P_{3/2}$ 和 $1s^23s\ ^2S_{1/2}$ 的锂原子的外壳层光电离过程. 同时，Saleem 等[17,18]也研究了锂原子的激发态 $1s^22p\ ^2P_{3/2}$ 和 $1s^23p\ ^2P_{3/2}$ 的外壳层光电离过程. 最近，Hussain 等[19]又观测到了激发态 $1s^23s\ ^{1,3}S$ 的外壳层光电离过程. 所有这些最新的实验结果为进一步开展理论研究提供了难得的机遇和挑战.

本文利用基于全相对论的多组态 Dirac-Fock 方法（MCDF）发展起来的程序包 GRASP92 和 RATIP 以及最新开发的可以包括弛豫效应的 RERR06 程序，详细地研究了锂原子基态和激发态的内壳层光电离过程

$$1s^22l + h\gamma \rightarrow 1sn'l + \varepsilon p_{1/2,3/2}\quad (n' = 2,3;\ l = s,p), \tag{1a}$$

$$1s^23l + h\gamma \rightarrow 1sn'l + \varepsilon p_{1/2,3/2}\quad (n' = 2,3,4;\ l = s,p), \tag{1b}$$

及其外壳层光电离过程

$$1s^2ns + h\gamma \rightarrow 1s^2 + \varepsilon p_{1/2,3/2}\quad (n = 2,3), \tag{2a}$$

$$1s^2np + h\gamma \rightarrow 1s^2 + \varepsilon s,d_{3/2,5/2}\quad (n = 2,3), \tag{2b}$$

在(1a)式中，与 $n'=2$ 对应的过程是主光电离过程，与 $n'=3$ 对应的过程是振激光电离过程；在(1b)式中，与 $n'=2$ 对应的过程是振退光电离过程，与 $n'=3$ 对应的过程是主光电离过程，而与 $n'=4$ 对应的过程是振激光电离过程.

2. 理论方法

本文中对锂原子的内壳层和外壳层光电离截面的计算都是在相对论 MCDF 理论框架下进行的. 关于 MCDF 方法在文献[20—24]中已有详细的叙述，本文仅做简要的介绍.

2.1. 能级和波函数的计算

具有 N 个电子的原子体系的 Dirac-Coulomb 哈密顿量可写为（除特别说明外，本文计算中所使用的单位均为 a.u.）

$$\hat{H}^{\mathrm{DC}} = \sum_{i=1}^{N}\hat{H}_{i\mathrm{D}} + \sum_{i>j}^{N}\frac{1}{r_{ij}}. \tag{3}$$

这里 $\hat{H}_{i\mathrm{D}}$ 为第 i 个电子的 Dirac 哈密顿量，可表示为

$$\hat{H}_{i\mathrm{D}} = c\hat{\alpha}\cdot\hat{p}_i + (\beta-1)c^2 + V_{\mathrm{nuc}}(\hat{r}_i), \tag{4}$$

式中 $V_{\mathrm{nuc}}(\hat{r}_i)$ 为核势场，$\hat{\alpha}$ 和 β 分别为 Dirac 矢量和标量矩阵，$\hat{p}_i$ 为第 i 个电子的动量算符，c 为真空中的光速.

在 MCDF 方法中，原子态函数 $|\alpha(PJM)\rangle$ 可以表示为具有相同宇称 P、总角动量 J 和总角动量 z 分量 M 的组态波函数 $|\Gamma_r(PJM)\rangle$ 的线性组合，即

$$|\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c}C_r(\alpha)\,|\Gamma_r(PJM)\rangle, \tag{5}$$

式中 n_c 是组态波函数的个数，$C_r(\alpha)$ 是组态混合系数. 组态波函数 $|\Gamma_r(PJM)\rangle$ 是 N 个单电子自旋轨道 $\{\psi_k \equiv |\psi_{n_k\kappa_k m_k}\rangle, k=1,\cdots,N\}$ 的波函数构成的 N 阶 Slater 行列式 $|U^p_{\{\psi_k\}}\rangle$ 的线性组合，即

$$|\Gamma_r(PJM)\rangle = \sum_p B_{rp}\,|U^p_{\{\psi_k\}}\rangle, \tag{6}$$

式中

$$|U_{\{\psi_k\}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\{\psi_1,\cdots,\psi_N\}. \tag{7}$$

单个束缚电子的自旋轨道波函数可表示为

$$\psi_{n\kappa m} = \langle \boldsymbol{r}\,|n\kappa m\rangle = \frac{1}{r}\begin{bmatrix} P_{n\kappa}(r)\,\chi_{\kappa m}(\theta,\phi) \\ \mathrm{i}Q_{n\kappa}(r)\,\chi_{-\kappa m}(\theta,\phi)\end{bmatrix}, \tag{8}$$

式中 $P_{n\kappa}(r)$ 和 $Q_{n\kappa}(r)$ 分别为径向波函数的大、小分量，κ 为（相对论）角量子数，$\chi_{\kappa m}(\theta,\phi)$ 为自旋球谐函数.

本文关于光电离截面的计算中，原子态波函数 $|\alpha(PJM)\rangle$ 是用(7)式的 Slater 行列式展开的，即

$$|\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r,p}d_{rp}(\alpha)\,|U^p_{\{\psi_k\}}\rangle, \tag{9}$$

式中

$$d_{rp}(\alpha) = C_{r(\alpha)} B_{rp}.$$

为了考虑弛豫效应,光电离前的原子态波函数和光电离后‘离子 + 连续电子’态的波函数是分别计算的. 若初态的展开基为 ψ_k,末态的展开基为 $\psi'_{k'}$,则由于两组基之间的不正交,而有

$$\langle \psi_k | \psi'_{k'} \rangle = d_{UV}(kk').$$

另外,设 $|V_{\{\psi'_{k'}\}}\rangle$ 是由离子中的剩余电子和连续态电子的轨道波函数构成的 N 阶 Slater 行列式,其中单个连续电子的自旋轨道波函数可以表示为

$$\psi_{\varepsilon km} = \frac{1}{r}\begin{bmatrix} P_{\varepsilon k}(r)\chi_{km}(\theta,\phi) \\ \mathrm{i}Q_{\varepsilon k}(r)\chi_{-km}(\theta,\phi) \end{bmatrix}. \tag{10}$$

将由原子态波函数构造的 Dirac-Coulomb 哈密顿矩阵进行对角化,可得到相关原子态 α 的能量和组态混合系数. 另外,为了进一步提高计算精度,Breit 相互作用、量子电动力学效应(包括自能和真空极化)等高阶效应也被包括在能级和波函数的计算中.

2.2. 光电离截面的计算

从初态 i 到末态 f 的光电离截面可由下式计算[25]:

$$\sigma_{if}^{PI} = 4\pi^2 a_0^2 \alpha \frac{\mathrm{d}f_{if}}{\mathrm{d}\varepsilon}. \tag{11}$$

这里 α 为精细结构常数,a_0 为玻尔半径. $\frac{\mathrm{d}f_{if}}{\mathrm{d}\varepsilon}$ 为振子强度密度,可表示为

$$\frac{\mathrm{d}f_{if}}{\mathrm{d}\varepsilon} = \frac{\pi c}{(2L+1)\omega^2}\left|\sum_{r,p,q} d_{rp}(i)\, d_{rq}(f) \times \sum_{k,k'}\langle U^p_{\{\psi_k\}} | O^{(L)} | V^q_{\{\psi'_{k'}\}}\rangle\right|^2, \tag{12}$$

式中 ω 和 ε 分别为入射光子和连续电子的能量,$O^{(L)}$ 为阶数为 L 的辐射场多极算符. 矩阵元 $\langle U^p_{\{\psi_k\}} | O^{(L)} | V^q_{\{\psi'_{k'}\}}\rangle$ 可进一步表示为

$$\langle U_{\{\psi_k\}} | O^{(L)} | V_{\{\psi'_{k'}\}}\rangle = \sum_{k,k'}\langle \psi_k | O^{(L)} | \psi'_{k'}\rangle D_{UV}, \tag{13}$$

式中 D_{UV} 是由重叠积分 $d_{UV}(kk')$ 构成的行列式[26],

$$D_{UV} = \det\{d_{UV}(kk')\}.$$

3. 结果及讨论

利用基于 MCDF 方法的程序包 GRASP92[23] 和 RATIP[27] 以及最新开发的可以包括弛豫效应的 RERR06 程序,计算了锂原子 $1s^2 nl$ ($n = 2,3$; $l = s, p$) 的内壳层和外壳层光电离截面. 在计算过程中考虑了弛豫效应.

3.1. 电子轨道的弛豫

当原子(或离子)中的一个电子发生光电离时,剩余电子所‘感受’的势场会发生变化,其电荷密度会发生重排,这种现象称为弛豫. 图 1 给出了锂原子的基态和激发态中 $1s_{1/2}$ 电子发生光电离前后占据轨道的平均半径,实线表示光电离前锂原子各占据轨道的平均半径,虚线表示光电离后锂离子占据轨道的平均半径. 从图 1 中可以看出,$1s_{1/2}$ 电子轨道的平均半径几乎没有变化;$2s_{1/2}$,$2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 电子轨道的平均半径分别减小了 $1.3783a_0$ (35.6%),$2.6190a_0$ (54.6%) 和 $2.6194a_0$ (54.6%);而 $3s_{1/2}$,$3p_{1/2}$ 和 $3p_{3/2}$ 电子轨道的平均半径分别减小了 $4.1853a_0$ (34.3%),$6.0230a_0$ (49.4%) 和 $5.8683a_0$ (48.2%). 由此可见,外壳层电子的轨道弛豫现象比内壳层电子的轨道弛豫现象明显[28].

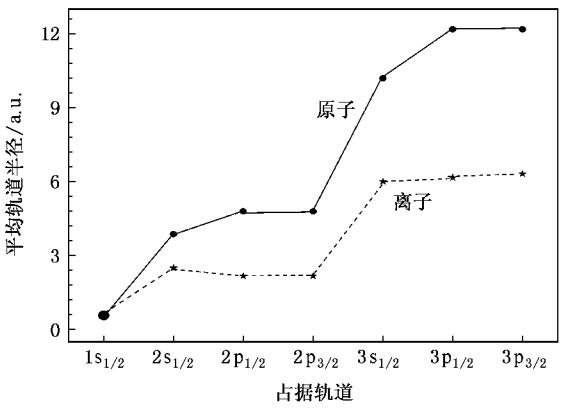

图 1 光电离前后电子占据轨道的平均半径

由于锂原子在光电离后会发生很强的轨道弛豫现象,所以本文在计算锂原子光电离截面(尤其是内壳层光电离截面)时充分考虑了弛豫效应. 事实上,轨道弛豫是原子(或离子)发生振激(或振退)光电离的主要原因,因此在计算振激(或振退)光电离截面时也必须考虑这种效应.

3.2. 内壳层光电离截面

在锂原子的内壳层光电离过程中,外壳层电子所‘感受’到的有效核电荷数发生了变化,使其所处的势场变化较大,因而轨道弛豫现象比较明显,这可

以通过振激和振退光电离截面来反映. 这里我们详细研究了锂原子 $1s^2 nl$ ($n=2,3$；$l=$ s, p) 的内壳层光电离过程，计算了相应的主光电离截面和振激(振退)光电离截面.

图 2(a)和(b)分别是从锂原子基组态 $1s^22s$ 光电离 1s 电子形成末态 $1s2s\ ^1S_0$ 和 $^3S_1$ 的主光电离截面和形成末态 $1s3s\ ^1S_0$ 和 $^3S_1$ 的振激光电离截面，图中同时给出了文献[6,7,9]的计算结果以及文献[12]的实验结果，L 和 V 分别表示长度和速度规范下的结果. 从图 2 可以看出：本文在两种规范下计算得到的截面具有很好的一致性，并且与实验结果也符合很好；形成三重态的截面明显大于形成单重态的截面. 另外，从图 2(b)还可以看出，本文结果与文献[9]的结果基本一致，但明显大于文献[6]的 R 矩阵计算结果，对此有必要与将来的实验作进一步的比较.

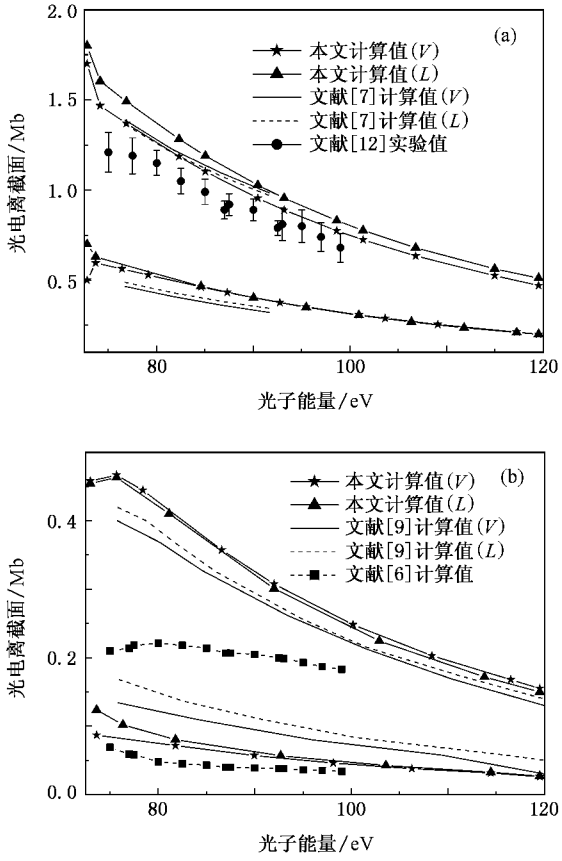

图 2　基组态 $1s^22s$ 的内壳层光电离截面　(a)形成末态 $1s2s\ ^1S_0$ 和 $^3S_1$ 的主光电离截面，(b)形成末态 $1s3s\ ^1S_0$ 和 $^3S_1$ 的振激光电离截面

图 3(a)和(b)分别是从锂原子激发组态 $1s^22p$ 光电离 1s 电子形成末态 $1s2p\ ^1P$ 和 ^3P 的主光电离截面和形成末态 $1s3p\ ^1P$ 和 ^3P 的振激光电离截面，图中同时给出了文献[1]的多组态 Hartree-Fock (MCHF) 计算结果以及文献[9]的 HF 计算结果. 从图 3 中可以看出：本文的计算结果在两种规范下有很好的一致性；形成三重态的截面大于形成单重态

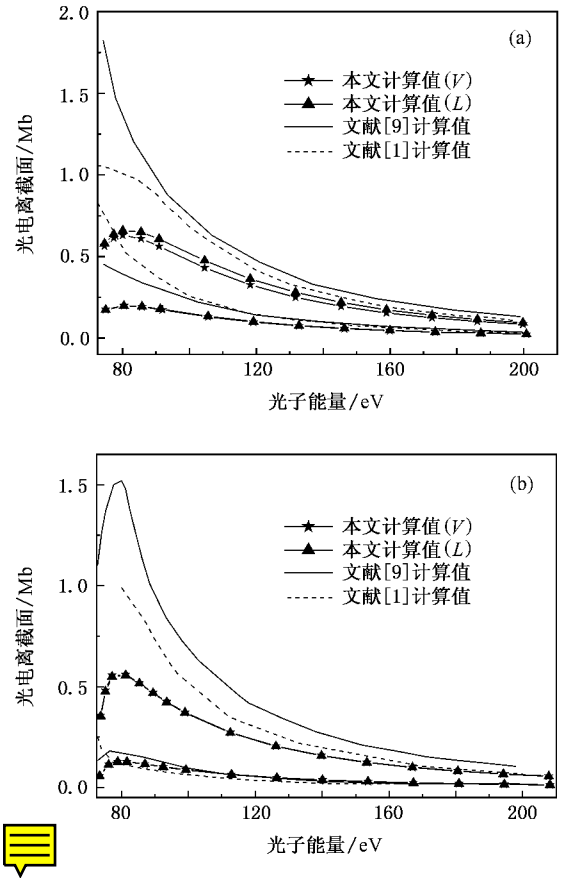

图 3　激发组态 $1s^22p$ 的内壳层光电离截面　(a)形成末态 $1s2p\ ^1P$ 和 ^1P 的主光电离截面，(b)形成末态 $1s3p\ ^1P$ 和 ^1P 的振激光电离截面

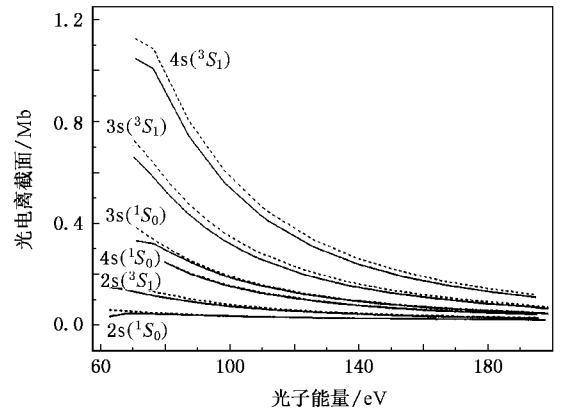

图 4　激发组态 $1s^23s$ 的内壳层光电离截面　末态为 $1snS$ ($n=2,3,4$) $^1S_0$ 和 $^3S_1$

的截面;主光电离截面稍大于振激光电离截面.

图4给出了本文计算得到的从激发组态 $1s^2 3s$ 光电离 1s 电子形成末态 $1snsn(n=2,3,4)^1S$ 和 ^3S 的振退光电离截面、主光电离截面和振激光电离截面.从图4可以看出,形成末态 $1s4s\ ^3S_1$ 的振激光电离截面最大,而主光电离截面较小,振退光电离截面最小.这是因为随着激发态的升高,外壳层电子的轨道收缩现象趋于明显.到组态 $1s^2 3s$ 时,重叠积分〈3s|3s〉的值已小于重叠积分〈3s|4s〉的值,而重叠积分〈3s|2s〉的值更小.

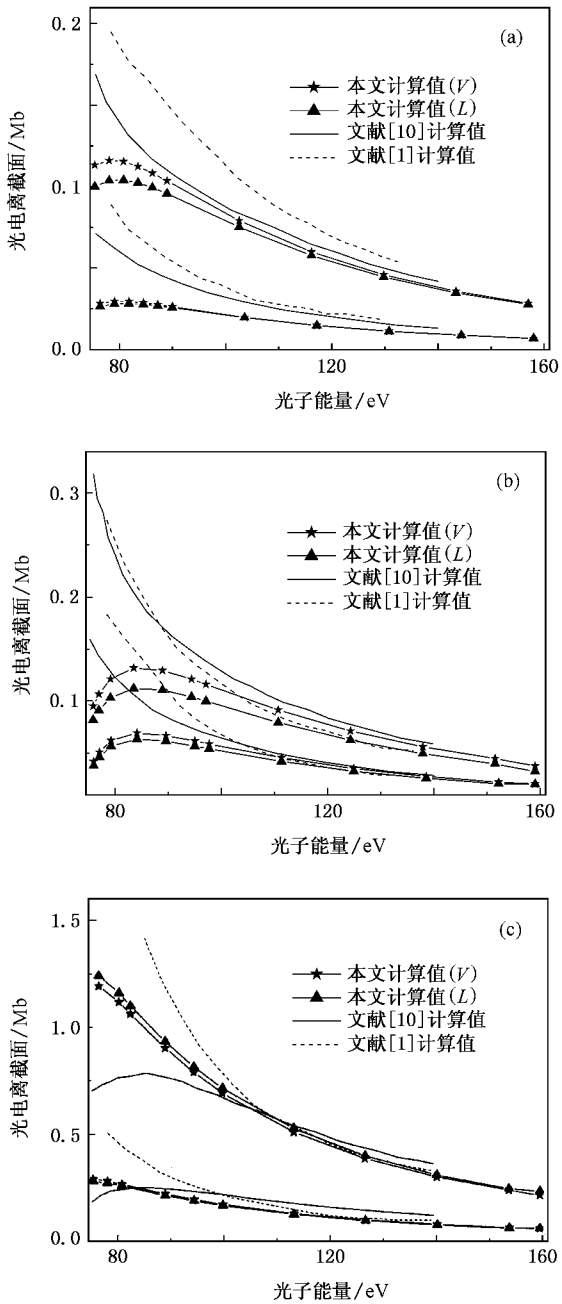

图5 激发组态 $1s^2 3p$ 的内壳层光电离截面 (a)形成末态 $1s2p\ ^1P$ 和 ^1P 的振退光电离截面,(b)形成末态 $1s3p\ ^1P$ 和 ^1P 的主光电离截面,(c)形成末态 $1s4p\ ^1P$ 和 ^1P 的振激光电离截面

图5是从激发组态 $1s^2 3p$ 光电离 1s 电子形成末态 $1s2p\ ^1P$ 和 ^3P,$1s3p\ ^1P$ 和 ^3P 及 $1s4p\ ^1P$ 和 ^3P 的振退光电离截面、主光电离截面和振激光电离截面,图中同时也给出了文献[10]的 R 矩阵计算结果以及文献[1]的 MCHF 计算结果.由于 3p 电子有很强的轨道收缩现象,使振激光电离截面远大于主光电离截面和振退光电离截面.另外,在电离阈附近本文计算的光电离截面有减小的趋势,这是因为在此光电离过程中我们所考虑的电子关联具有使截面'干涉相消(destructive interference)[7,29]'的作用.

3.3. 外壳层光电离截面

在锂原子的外壳层光电离过程中,因为内壳层的 1s 电子'感受'到的势场变化不明显,弛豫效应较弱,本文只展示了锂原子组态 $1s^2 nl(n=2,3;l=s,p)$ 中外壳层电子的主光电离截面.为了便于与文献中的结果做比较,这里给出了光电离截面随光电子能量的变化结果.

图6给出了基态 $1s^2 2s\ ^2S_{1/2}$ 的 $2s_{1/2}$ 电子的光电离截面,图中同时给出了文献[8]的 Hartree-Slater (HS)计算结果以及文献[11]的实验结果.从图6可以看出,本文在两种规范下的截面一致性很好,并且比文献[8]的计算结果更符合实验值,尤其是在光电子能量较小的区域.

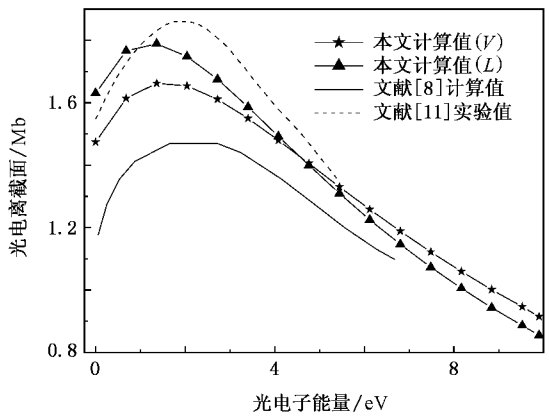

图6 基组态 $1s^2 2s$ 的外壳层光电离截面

图7(a)和(b)分别是激发态 $1s^2 2p\ ^2P_{1/2}$ 和 $^2P_{3/2}$ 的 $2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 电子的光电离截面.从图7可以看出,本文的结果与实验值[16,17]符合很好.虽然不同通道的光电离截面存在差别,但对不同通道的光电离截面的求和结果相差很小.

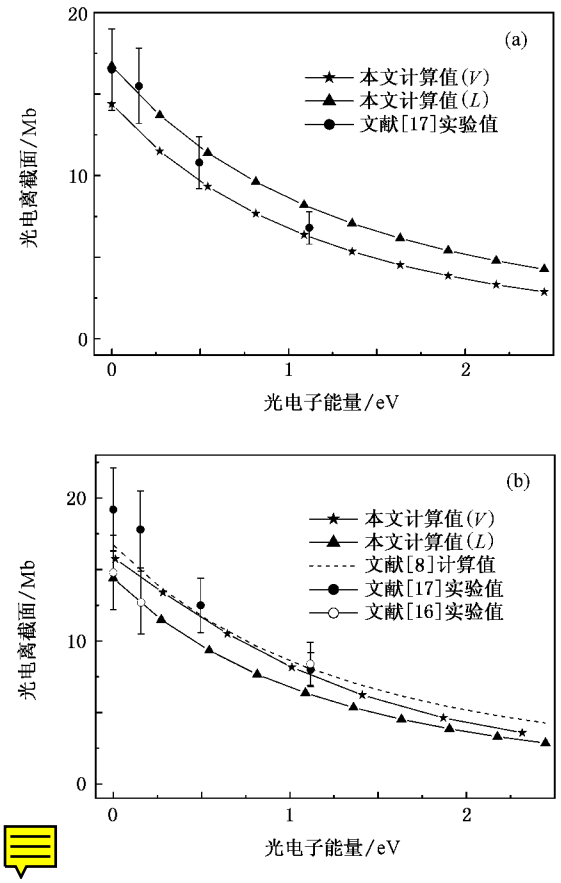

图 7　激发组态 $1s^2 2p$ 的外壳层光电离截面　(a)从激发态 $1s^2 2p\ ^2P_{1/2}$ 光电离 $2p_{1/2}$ 电子，(b)从激发态 $1s^2 2p\ ^2P_{3/2}$ 光电离 $2p_{3/2}$ 电子

图 8 给出了激发态 $1s^2 3s\ ^2S_{1/2}$ 的 $3s_{1/2}$ 电子的光电离截面. 从图 8 可以看出，本文计算结果与文献[19]的实验值以及文献[8]的计算结果都符合很好，而文献[16]在电离限处测量的光电离截面较大. 另外，文献[5]计算得到的电离限处的截面为 1.48 Mb.

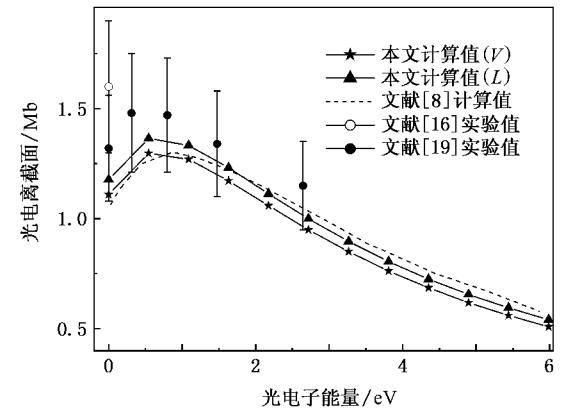

图 8　激发组态 $1s^2 3s$ 的外壳层光电离截面

图 9(a)和(b)分别是激发态 $1s^2 3p\ ^2P_{1/2}$ 和 $^2P_{3/2}$ 的 $3p_{1/2}$ 和 $3p_{3/2}$ 电子的光电离截面. 从图 9 可以看出：两种规范下截面的一致性很好，并且与文献[18]的实验值以及文献[8]的计算结果也很一致. 另外，因为在锂原子中 2p 和 3p 轨道都可以近似地看作是类氢的，所以与图(7)中有相似的原因，图 9(a)和(b)中截面的差别也很小.

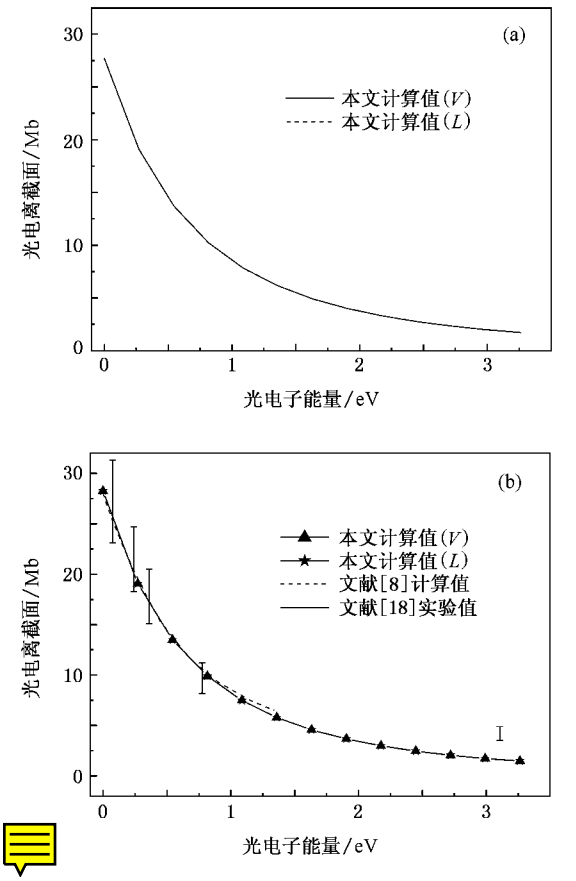

图 9　激发组态 $1s^2 3p$ 的外壳层光电离截面　(a)从激发态 $1s^2 3p\ ^2P_{1/2}$ 光电离 $3p_{1/2}$ 电子，(b)从激发态 $1s^2 3p\ ^2P_{3/2}$ 光电离 $3p_{3/2}$ 电子

3.4. 弛豫效应对内壳层光电离截面的影响

为了进一步讨论在内壳层光电离过程中振激和振退现象的规律，本文用图 10 所示振激(振退)截面和主截面的比值来反映这种差别. 图 10(a)是从组态 $1s^2 2s$ 和 $1s^2 2p$ 中光电离 $1s_{1/2}$ 电子时振激光电离截面和主光电离截面的比值，分别用 3s/2s 和 3p/2p 来标记，其中实线和虚线分别是在长度和速度规范下文献[9]的 HF 计算结果. 图 10(b)是从组态 $1s^2 3s$ 和 $1s^2 3p$ 中光电离 $1s_{1/2}$ 电子时振激(振退)光电离截面和主光电离截面的比值，分别用 (2s + 4s)/3s 和 (2p

+4p)/3p 来标记. 从图 10 可以看出,比值随着激发态的升高而增大. 这是因为激发态越高,价电子的轨道贯穿越小,光电离掉一个 $1s_{1/2}$ 电子后,使其‘感受’到的核电荷数的变化越接近于 1,弛豫效应也就越明显. 关于这一点还可以从光电离前后各轨道间的重叠积分看出. 表 1 给出了在组态 $1s^2nl$ ($n=2$, 3; $l=s$, p) 的内壳层光电离过程中初态和末态中占据电子轨道的重叠积分值. 从表 1 可知,除了光电离前后的 $1s_{1/2}$ 电子轨道的重叠积分值接近于 1 外,其他电子轨道的重叠积分都较小;另外,初态中某一电子轨道 nl_j 和末态中相应电子轨道的重叠积分值随着 n 和 l 的增大而减小.

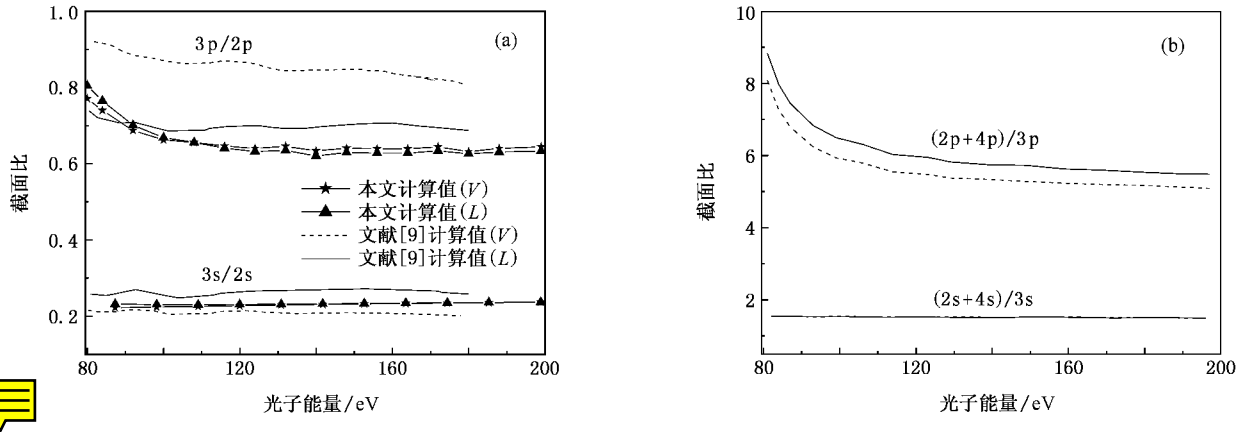

图 10 振激和振退光电离截面与主截面之比 (a)从组态 $1s^22s$ 和 $1s^22p$ 光电离 $1s_{1/2}$ 电子,(b)从组态 $1s^23s$ 和 $1s^23p$ 光电离 $1s_{1/2}$ 电子

表 1 内壳层电子的光电离过程中初态和末态占据电子轨道的重叠积分

光电离末态电子轨道 $n'l'_{j'}$	光电离初态电子轨道 nl_j						
	$1s_{1/2}$	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$2p_{3/2}$	$3s_{1/2}$	$3p_{1/2}$	$3p_{3/2}$
$1s_{1/2}$	0.9942	−0.0433	—	—	0.0196	—	—
$2s_{1/2}$	−0.0743	0.8574	—	—	0.2599	—	—
$3s_{1/2}$	−0.0285	−0.4983	—	—	0.5660	—	—
$4s_{1/2}$	—	−0.0688	—	—	−0.7789	—	—
$2p_{1/2}$	—	—	0.5578	—	—	0.2599	—
$2p_{3/2}$	—	—	—	0.6186	—	—	0.2601
$3p_{1/2}$	—	—	−0.7826	—	—	0.1820	—
$3p_{3/2}$	—	—	—	0.7802	—	—	0.1821
$4p_{1/2}$	—	—	−0.0394	—	—	−0.9115	—
$4p_{3/2}$	—	—	—	−0.0764	—	—	−0.8987

4. 结 论

本文利用基于 MCDF 方法的程序包 GRASP92 和 RATIP 以及最新发展的可以包括弛豫效应的 RERR06 程序,详细计算了锂原子基组态及其激发组态 $1s^2nl$ ($n=2,3$; $l=s$, p) 的内壳层和外壳层光电离截面. 详细研究了弛豫效应对锂原子的内壳层和外壳层光电离过程的影响. 研究发现,在内壳层电子的光电离过程中,因为剩余外壳层电子所‘感受’到的核电荷数发生了变化(接近于 1),相应的轨道弛豫现象很明显,例如 $2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 电子轨道在光电离后收缩了 54.6%,所以必须考虑弛豫效应. 弛豫效应的一个直接表现就是振激和振退过程的发生,所以本文不仅计算了其主光电离截面,还详细计算了其振激和振退光电离截面. 而在锂原子外壳层电子的光电离过程中,电子轨道的弛豫不明显,振激和振退现象很弱,所以本文只给出了其主光电离截面. 另外,为了进一步研究弛豫效应对不同组态的内壳层光电离过程的影响规律,本文还计算了振激

(振退)光电离截面与主光电离截面的比值. 结果表明 弛豫效应对激发态的内壳层光电离过程的影响大于对基态的影响,并且对高激发态的影响大于对低激发态的影响,从光电离前后各占据电子轨道间的重叠积分值也可以看出这一点. 本文计算的内壳层和外壳层电子的光电离截面与实验值符合很好,从而说明在原子(或离子)体系的光电离过程的研究中,MCDF 方法能提供精确的理论结果.

[1] Felfli Z, Manson S T 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 1687

[2] Wan J J, Dong C Z, Sang C C, Ding X B, Xie L Y, Jiang J 2007 *J. Phys.*: *Confer. Ser.* **58** 367

[3] Bhatia A K, Temkin A, Silver A 1975 *Phys. Rev.* A **12** 2044

[4] Chang T N, Poe R T 1975 *Phys. Rev.* A **11** 191

[5] Aymer M, Luc-Koenig E, Farnoux F C 1976 *J. Phys. B*: *At. Mol. Opt. Phys.* **9** 1279

[6] Lisini A, Burke P G, Hibbert A 1990 *J. Phys. B*: *At. Mol. Opt. Phys.* **23** 3767

[7] Armen G B, Larkins F P 1991 *J. Phys. B*: *At. Mol. Opt. Phys.* **24** 2675

[8] Lahiri J, Manson S T 1993 *Phys. Rev.* A **48** 3674

[9] Kupliauskienė A 1996 *Phys. Scr.* **53** 149

[10] Zhou H L, Manson S T, Vo Ky L, Faucher P, Bubau F B, Hibbert A, Diehl S, Cubaynes D, Bizau J M, Journal L, Wuilleumier F J 1999 *Phys. Rev.* A **59** 462

[11] Hudson R D, Carter V L 1965 *Phys. Rev.* **137** 1648

[12] Ferrett T A, Lindle D W, Heimann P A, Brewer W D, Becker U, Kerkhoff H G, Shirley D A 1987 *Phys. Rev.* A **36** 3172

[13] Langer B, Viefhaus J, Hemmers O, Menzel A, Wehlitz R 1991 *Phys. Rev.* A **43** 1652

[14] Cheng W T, Kukk E, Cubaynes D, Chang J C, Snell G, Bozek J D, Wuilleumier F J, Berrah N 2000 *Phys. Rev.* A **62** 062509

[15] Wippel V, Binder C, Huber W, Windholz L, Allegrini M, Fuso F, Arimondo E 2001 *Eur. Phys. J.* D **17** 285

[16] Amin N, Mahmood S, Saleem M, Kalyar M A, Baig M A 2006 *Eur. Phys. J.* D **40** 331

[17] Saleem M, Hussain S, Rafiq M, Baig M A 2006 *J. Appl. Phys.* **100** 053111

[18] Saleem M, Hussain S, Rafiq M, Baig M A 2006 *J. Phys. B*: *At. Mol. Opt. Phys.* **39** 5025

[19] Hussain S, Saleem M, Baig M A 2007 *Phys. Rev.* A **75** 022710

[20] Dong C Z, Fritzsche S 2005 *Phys. Rev.* A **72** 012507

[21] Dong C Z, Fritzsche S, Fricke B 2006 *Eur. Phys. J.* D **40** 317

[22] Dong C Z, Xie L Y, Wan J J, Jiang J 2005 *Chin. Phys.* **14** 1009

[23] Parpia F A, Fischer C F, Grant I P 1996 *Comput. Phys. Commun.* **94** 249

[24] Fricke B 1984 *Phys. Scr.* T **8** 129

[25] Cowan R D 1981 The Theory of Atomic Structure and Spectra (Berkeley: University of California Press) p525

[26] Löwdin P O 1955 *Phys. Rev.* **97** 1735

[27] Fritzsche S 2001 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **114—116** 1155

[28] Li J, Dong C Z, Xie L Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 655 (in Chinese) [李　杰、董晨钟、颉录有 2006 物理学报 **55** 655]

[29] Fritzsche S, Aksela H, Dong C Z, Heinäsmäki S, Sienkiewicz J E 2003 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.* B **93—98** 205

Relaxation effect in photoionization processes of lithium *

Sang Cui-Cui[1)] Wan Jian-Jie[1)] Dong Chen-Zhong[1)2)†] Ding Xiao-Bin[1)] Jiang Jun[1)]

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

2)(*Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, Lanzhou* 730000, *China*)

(Received 4 June 2007; revised manuscript received 23 October 2007)

Abstract

Using multi-configuration Dirac-Fock method and the corresponding packages GRASP92 and RATIP, as well as the newly developed RERR06, we calculated inner- and outer-shell photoionization cross sections of configurations $1s^2\,nl$ ($n = 2,3$; l = s, p) of atomic lithium. In the calculations, the relaxation effect caused by photoionization of electrons was included. It was found that the relaxation effect plays an important role in the inner-shell photoionizational processes, contrary to the outer-shell photoionizational processes. Further, the effects of relaxation on inner-shell photoionizational processes from different states are not the same. It is more prominent for the excited states than the ground state, and for the higher excited states than the lower excited states.

Keywords: multi-configuration Dirac-Fock method, photoionization cross section, relaxation effect

PACC: 3290, 3280, 3120T

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10434100, 10774122), the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education of China (Grant No. 20070736001), the Center of Theoretical Nuclear Physics of National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, China and the Science and Technology Innovation Program of Northwest Normal University, China (Grant No. NWNU-KJCXGC-03-21).

† E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn