

文章编号: 1007-4627(2011)01-0245-06

高离化态 Au 离子光电离过程的理论研究^{*}

王云荣, 刘晓斌, 丁晓彬, 董晨钟[#]

(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, 甘肃 兰州 730070)

摘要: 基于多组态 Dirac-Fock 方法的程序包 GRASP92 和 RATIP 及在此基础上最新发展的 RELPHOTO08 程序, 系统地研究了高离化态金离子 M 壳层的光电离截面随入射光子能量、离化度以及壳层的变化规律。结果表明: 光电离截面随光子能量的增大而单调减小; 电离 nl 电子时, 如果相关电子的主量子数较大, 则该电子存在与否对其光电离截面几乎没有影响; 在同一离化度下, 角量子数 l 可引起两种性质不同的效应, 其相互竞争可导致光电离截面随入射光子能量的复杂变化。

关键词: 多组态 Dirac-Fock 方法; 光电离; 截面

中图分类号: O562.4 **文献标识码:** A

1 引言

光电离(PI)是光与原子或离子相互作用的主要过程之一, 它是辐射复合的逆过程。在天体物理、X 射线激光、惯性约束聚变(ICF)等研究领域, 为了真实模拟等离子体中各种元素不同电离度离子的相对丰度、电离平衡、光谱特性及平均电离度等, 光电离截面是必不可少的原子参数之一^[1]。在 ICF 间接驱动实验中, 高功率激光与腔壁物质相互作用能够产生大量的高离化态离子。这些离子经过激发、衰变和复合等多种原子物理过程能够产生大量的 X 射线, 形成一个具有一定温度和强度的等离子体辐射场。该辐射场进一步对热核材料进行压缩加热, 使其产生热核聚变。Au 元素($Z=79$)因其具有高的 X 射线吸收率和转化率而成为 ICF 实验的首选腔壁材料^[2]。

20 世纪 80 年代以来, 人们对 Au 元素的不同离化度离子进行了大量的实验和理论研究。在实验方面, Foord 等^[3]和 Glenzer 等^[4]利用 NOVA 激光设备研究了高密金等离子体的电荷态分布, 发现类镍、类铜、类锌和类镓离子是金等离子体中含量较高的成分; Wong 等首次在电子束离子阱(EBIT)中测量了冕平衡区金等离子体的电荷态分布^[5]; May

等在 2003 年利用 EBIT 测量了类镍到类氦金等离子体的发射谱线^[6], 在 2005 年, 他们又测量了类镍到类镓金离子的电子碰撞激发截面^[7]; Brown 等测量了 EBIT 中高离化态 Au 离子 L 壳层的激发谱线^[8]等。在理论方面, Honda 等利用多组态 Dirac-Fock(MCDF)方法计算了类镍到类镓金离子的跃迁能和振子强度^[9]; 程新路等在自旋轨道劈裂阵(SOSA)模型下计算了金等离子体的 M 带发射谱^[10]; 焦荣珍等也用 SOSA 模型模拟了类镍金离子的双电子复合速率系数^[11]; 杨天丽等利用 MCDF 方法计算了金等离子体中电离态的平均分布^[12]; 曾交龙等利用 Flexible Atomic Code(FAC)程序计算了类钴到类镓金离子的能级、振子强度和电子碰撞强度^[13]; Peyrusse 等^[14]计算了冕区金等离子体的电荷态分布并得到了与 Wong 等^[5]实验一致的平均电离度; 杨宁选等利用 MCDF 方法计算了类镍、类铜和类锌金离子的激发能和电子碰撞强度^[15]。然而, 这些实验和理论工作主要集中在金等离子体中电子碰撞激发、辐射跃迁和双电子复合过程, 与光电离过程相关的研究还很缺乏。

本文利用基于 MCDF 方法的程序包 GRASP92 和 RATIP 以及本小组最新发展的 RELPHOTO08

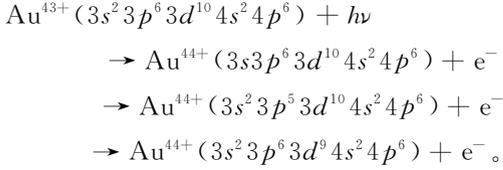
* 收稿日期: 2011-01-23; 修改日期: 2011-02-28

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10434100, 10774122, 10876028); 高等学校博士学科点专项科研基金资助项目(20070736001)

作者简介: 王云荣(1985-), 女(汉族), 甘肃甘谷人, 硕士研究生, 从事原子结构和光电离研究; E-mail: wdxywryi@163.com

通讯联系人: 董晨钟, E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

程序^[16-22], 详细地研究了高离化态 Au 离子 M 壳层电子的光电离截面随入射光子能量、离化度以及壳层变化的规律。例如, 对于 Au⁴³⁺ 离子, 本文的计算主要包括以下具体过程:



2 理论模型

2.1 能级和波函数的计算

有关 MCDF 理论方法, 相关文献^[19-23]已有详细的叙述, 这里仅作简要的介绍。在该理论中, 具有 N 个电子的原子体系的 Dirac-Coulomb 哈密顿量在原子单位下可写为

$$\hat{H}^{\text{DC}} = \sum_{i=1}^n \hat{H}_{iD} + \sum_{i>j}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (1)$$

这里 \hat{H}_{iD} 是第 i 个电子的 Dirac 哈密顿量, 可表示为

$$\hat{H}_{iD} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{\text{nuc}}(\mathbf{r}_i), \quad (2)$$

其中 $V_{\text{nuc}}(\mathbf{r}_i)$ 是核势场, $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 分别是 Dirac 矢量和标量矩阵, \mathbf{p}_i 是第 i 个电子的动量算符, c 是真空中光速。

在 MCDF 方法中, 原子态函数 $|\alpha(PJM)\rangle$ 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

$$|\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) |\Gamma_r(PJM)\rangle, \quad (3)$$

其中, 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 个单电子自旋轨道波函数 $\psi_k (k=1, \dots, N)$ 构成的 N 阶 Slater 行列式 $|\Psi_p\rangle$ 的线性组合, 即

$$|\Gamma_r(PJM)\rangle = \sum_p B_{rp} |\Psi_p\rangle, \quad (4)$$

其中

$$|\Psi_p\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\{\psi_1, \dots, \psi_N\}, \quad (5)$$

单个束缚电子的自旋轨道波函数可以表示为

$$\psi_{n\kappa m} = \langle \mathbf{r} | n\kappa m \rangle = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{n\kappa}(r) & \chi_{\kappa m}(\theta, \phi) \\ iQ_{n\kappa}(r) & \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi) \end{bmatrix}, \quad (6)$$

其中, n 为主量子数, $P_{n\kappa}(r)$ 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, 相应于 $l=j \pm 1/2$, $\kappa = \pm(j+1/2)$, $\chi_{\kappa m}(\theta, \phi)$ 为自旋球谐函数。

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:

$$\sigma_{if}^{\text{PI}} = 4\pi^2 a_0^2 \alpha \frac{df_{if}}{d\epsilon}, \quad (7)$$

其中 α 为精细结构常数, a_0 为玻尔半径。 $df_{if}/d\epsilon$ 为振子强度密度, 可进一步表示为^[24]

$$\begin{aligned} \frac{df_{ij}}{d\epsilon} &= \frac{\pi c}{(2L+1)\omega^2} |\langle \alpha_j^{N-1}(P'_j J'_j M'_j) | \\ & \epsilon\kappa; \alpha_j^N(P_j J_j M_j) \| \mathbf{O}^{(L)} \| \alpha_i^N(P_i J_i M_i) \rangle|^2, \quad (8) \end{aligned}$$

其中, ω 和 ϵ 分别是入射光子和连续电子的能量, $\mathbf{O}^{(L)}$ 是阶数为 L 的辐射场多极算符, $|\alpha_i^N(P_i J_i M_i)\rangle$ 是光电离初态的原子态波函数, $|\alpha_j^N(P_j J_j M_j)\rangle$ 是由末离子态 $|\alpha_j^{N-1}(P'_j J'_j M'_j)\rangle$ 和连续电子 $\epsilon\kappa$ 通过反对称化耦合而成的光电离末态波函数。

3 结果与讨论

基于 MCDF 方法的程序包 GRASP92 和 RATIP 以及本小组最新发展的 RELPHOTO08 程序, 研究了高离化态 Au 离子 M 壳层电子的光电离截面随入射光子能量、离化度及壳层变化的规律。为了从整体上给出光电离截面的变化情况, 我们采用对初态按统计权重平均、末态求和的方法, 进一步得到了组态-组态的光电离截面。

3.1 能级和轨道半径

表 1 给出了本文计算的类镓和类锗金离子光电离末态离子的能级, 并与文献^[13]利用 FAC 程序计算的结果作了比较, 发现两者具有较好的一致性。但本文计算的能级数据比文献^[13]的结果平均小 0.064%, 这可能是由于在我们的计算中所使用的电子组态与文献^[13]相比较少的原因。其它金离子的能级是在同样的组态模型下计算的, 这里不再赘述。

表 1 计算的类镓和类锗金离子光电离末离子态的能级及与其它理论值的比较*

eV

类镓离子初态: $3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p$			类锗离子初态: $3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$		
末离子态	本文结果	文献[13]的结果	末离子态	本文结果	文献[13]的结果
$(3d_{3/2} 4p_{1/2})_2$	2011.49	2013.95	$(3d_{3/2} 4p_{1/2})_{3/2}$	1997.65	1999.97
$(3d_{3/2} 4p_{1/2})_1$	2015.31	2017.85	$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_2 4p_{3/2})_{7/2}$	2038.64	2040.48
$(3d_{5/2} 4p_{3/2})_4$	2062.54	2065.21	$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_3 4p_{3/2})_{3/2}$	2041.83	2043.70
$(3d_{5/2} 4p_{3/2})_2$	2064.86	2067.46	$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_3 4p_{3/2})_{5/2}$	2042.65	2044.55
$(3d_{5/2} 4p_{3/2})_1$	2066.46	2069.20	$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_3 4p_{3/2})_{9/2}$	2044.30	2045.87
$(3d_{5/2} 4p_{3/2})_3$	2067.96	2070.67	$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_2 4p_{3/2})_{3/2}$	2046.67	2048.22
$(3d_{3/2} 4p_{3/2})_1$	2155.71	2157.37	$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_2 4p_{3/2})_{5/2}$	2047.16	2048.80
$(3d_{3/2} 4p_{3/2})_3$	2155.76	2157.46	$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_2 4p_{3/2})_{1/2}$	2047.24	2048.87
$(3d_{3/2} 4p_{3/2})_2$	2158.66	2160.34	$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_3 4p_{3/2})_{7/2}$	2048.82	2051.51
$(3d_{3/2} 4p_{3/2})_0$	2151.09	2152.71	$((3d_{3/2} 4p_{1/2})_2 4p_{3/2})_{1/2}$	2127.99	2128.67
			$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_2 4p_{3/2})_{3/2}$	2132.47	2133.20
			$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_2 4p_{3/2})_{5/2}$	2133.10	2133.94
			$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_2 4p_{3/2})_{7/2}$	2136.01	2136.47
			$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_1 4p_{3/2})_{1/2}$	2137.91	2138.50
			$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_1 4p_{3/2})_{5/2}$	2140.11	2140.67
			$((3d_{5/2} 4p_{1/2})_1 4p_{3/2})_{3/2}$	2140.81	2141.46
			$(3d_{5/2} (4p_{3/2}^2)_2)_{9/2}$	2184.87	2185.71
			$(3d_{5/2} (4p_{3/2}^2)_2)_{7/2}$	2185.10	2185.84
			$(3d_{5/2} (4p_{3/2}^2)_2)_{1/2}$	2186.33	2187.11
			$(3d_{5/2} (4p_{3/2}^2)_2)_{5/2}$	2189.02	2190.05
			$(3d_{5/2} (4p_{3/2}^2)_2)_{3/2}$	2189.65	2190.52
			$(3d_{5/2} (4p_{3/2}^2)_0)_{3/2}$	2198.65	2200.94
			$(3d_{3/2} (4p_{3/2}^2)_2)_{3/2}$	2275.29	2275.13
			$(3d_{3/2} (4p_{3/2}^2)_2)_{1/2}$	2276.99	2276.76
			$(3d_{3/2} (4p_{3/2}^2)_2)_{7/2}$	2277.41	2277.18
			$(3d_{3/2} (4p_{3/2}^2)_2)_{5/2}$	2277.61	2277.36
			$(3d_{3/2} (4p_{3/2}^2)_0)_{3/2}$	2289.50	2290.72

* 所有能量值都是以末离子态的基态为基准的。

为了说明电子占据轨道的平均半径与它的主量子数 n 和角量子数 l 之间关系, 图 1 给出了 Au^{43+} ($3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$), Au^{47+} ($3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$), Au^{60+} ($3s^2 3p^6 3d$), Au^{64+} ($3s^2 3p^3$) 和 Au^{68+} ($3s$) 等 5 种 Au 离子的各占据轨道电子的平均半径。从图中可以看出, 同一主量子数电子的平均轨道半径相差不多, 而不同主量子数电子的轨道半径相差甚远; 剥离同一主量子数上的电子只对该壳层电子的平均轨道半径产生明显的影响, 而对其它较内壳层电子的平均轨道半径几乎没有影响。例如, Au^{47+} 和 Au^{43+} 相比, 对应于剥离 $4p$ 上的电子, 使 Au^{47+} 的 $4s_{1/2}$, $4p_{1/2}$ 和 $4p_{3/2}$ 的平均轨道半径相对于 Au^{43+} 的都减小, 而其它较内壳层电子的平均轨道半径几乎未变。很显然, 对于高离化态离子, 其占据轨道电子的平均半径主要与它的主量子数 n 有关而与角量子数 l 的关

系很小。

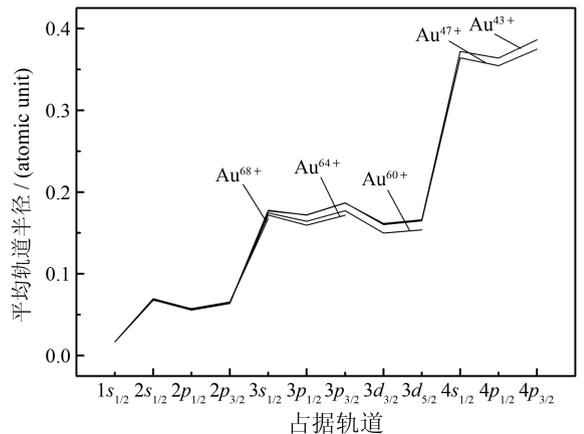


图 1 不同离化度 Au 离子各占据电子轨道的平均半径

3.2 光电离截面随入射光子能量和离化度的变化

图 2 给出了高离化态 Au 离子 3s, 3p 和 3d 次壳层电子的光电离截面随入射光子能量的变化。从图中可以看出, 各个壳层电子的光电离截面都随入

射光子能量的增大而单调减小。这是因为入射光子的能量越大, 其与电离能的差值越大, 越不容易发生共振电离, 相应的光电离截面也就越小。

从图 2(a) 也可看出, 对一定能量的入射光子,

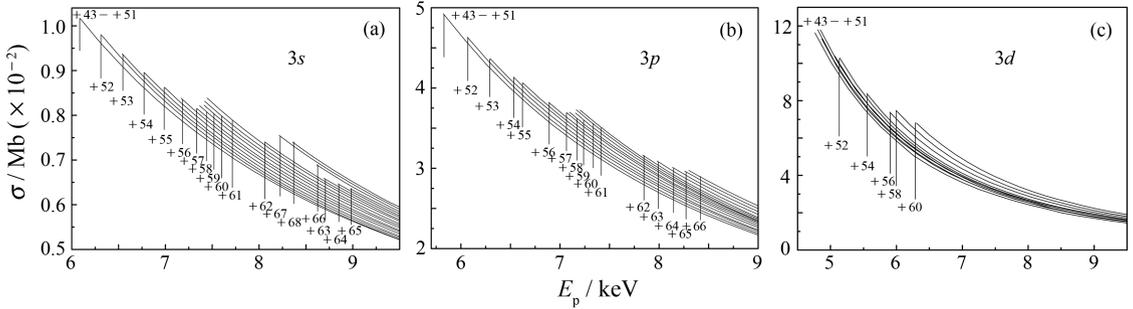


图 2 Au 离子 M 壳层的光电离截面

(a) 从 Au^{43+} 到 Au^{68+} 离子的 3s 内壳层的光电离截面, (b) 从 Au^{43+} 到 Au^{66+} 离子的 3p 内壳层的光电离截面, (c) 从 Au^{43+} 到 Au^{60+} 离子 3d 壳层的光电离截面。

$Au^{43+} (3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6)$ 到 $Au^{51+} (3s^2 3p^6 3d^{10})$ 离子的 3s 光电离截面几乎重叠在一起(只有 2% 的偏离), 而对于 $Au^{52+} (3s^2 3p^6 3d^9)$ 到 $Au^{68+} (3s)$ 离子, 其光电离截面随着离化度的增大而缓慢升高。其原因可以解释为: 对于高离化态离子, 各次壳层电子占据轨道的平均轨道半径 r 主要与它的主量子数 n 有关而与角量子数 l 的关系很小。从 Au^{43+} 到 Au^{51+} , 被剥离的是较外的主量子数 $n=4$ 的电子, 这些电子的轨道离 3s 电子的轨道较远, 其存在与否对 3s 电子的影响很弱。因此, 3s 电子的光电离截面几乎不随离化度变化; 而从 Au^{52+} 到 Au^{68+} , 对应于 $n=3$ 壳层上的电子被剥离, 3s 电子的光电离截面受到的影响较大。随着 $n=3$ 壳层上的电子数的减少, 3s 电子感受到外层电子的屏蔽逐渐降低, 3s 电子的光电离截面随之而增大。这与早期关于 O, Fe 和 Hg 等核序列的结论一致^[23-25]。

从图 2(b) 还可看出, 从 Au^{43+} 到 Au^{51+} , 3p 电子的光电离截面曲线几乎也重叠在一起。但与 3s 相比, 重合性稍差, 有 3% 的偏离, 而图中未能明显的呈现。这是由于除 3s 中讨论的原因之外, 3p 轨道较 3s 更靠外, 外壳层电子的剥离对其影响较明显, 使其截面曲线的重合性变差。而从 Au^{52+} 到 Au^{66+} , 光电离截面曲线随离化度的增大而缓慢升高。如同 3s 中所讨论的, 这是由于随着 $n=3$ 壳层上的电子数的减少, 3p 电子感受到外层电子的屏蔽逐渐降低, 3p 电子的光电离截面随之而增大。

在图 2(c) 中, 从 Au^{43+} 到 Au^{51+} , 3d 电子的截面曲线重合性更差。这是因为 3d 电子较 3p 更靠外, 离心势 $l(l+1)/r^2$ 更大, 3d 电子与剥离电子间的关联明显增强而核对其的影响却相对减小, 外层电子的剥离对其影响较 3p 电子也更大, 从而对光电离截面产生了稍明显的影响; 而从 Au^{52+} 到 Au^{60+} , 光电离截面曲线随离化度的增大而缓慢升高。

3.3 光电离截面随壳层的变化

本文计算的 Au 离子的离化态比较多, 但对于每个离化态所得规律是一致的。为简洁明了, 这里以 Au^{60+} 为例研究了光电离截面随壳层的变化, 如图 3 所示。可以看出, 在 3s 电离阈以上, 当光子能量较低时, 3d 壳层的光电离截面最大, 但当光子能量超过某一值时(对不同离化度离子, 此能量值通

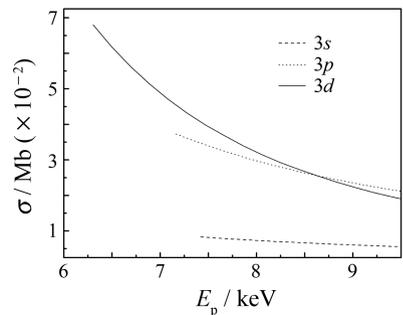


图 3 Au^{60+} 离子的 3s, 3p 和 3d 壳层光电离截面曲线变化的比较

常不同, 对 Au^{60+} 大约是 8606 eV), $3p$ 壳层的光电离截面大于 $3d$ 壳层的光电离截面, 而在图中的整个能量范围内, $3s$ 壳层的光电离截面最小。对此可理解为: 在相同的光子能量下, 电离 $3l$ 轨道的电子时, 角量子数 l 越小, 轨道偏心率越大, 光子就越不易接近, 从而其被电离的几率较小。另一方面, 角量子数 l 越小, 轨道电离能越大, 如同 3.2 中所讨论的, 它与光子能量的差值越小, 其被电离的几率就越大。这里, 角量子数 l 所引起光电离截面的这两种变化趋势相反但同时存在, 其相互竞争从而导致了光电离截面随入射光子能量的复杂变化。在 $3s$ 的光电离过程中, 轨道偏心率起主要的作用, 而对 $3p$ 和 $3d$ 的光电离过程, 两种因素竞争相当, 即出现了截面曲线相交的情况。

4 结论

基于 MCDF 方法的程序包 GRASP92 和 RATIP 以及最新发展 RELPHOTO08 程序, 本文详细论述了高离化态 Au 离子 M 壳层电子的光电离截面随入射光子能量、离化度以及壳层变化的规律。我们发现: 各壳层电子的光电离截面随入射光子能量的增大而单调减小; 当电离 nl 电子时, 如果剥离电子的主量子数大于光电离电子的主量子数, 则该电子的剥离对电离电子的光电离截面几乎没有影响。对同一主量子数随着角量子数 l 的增大, 这种影响逐渐增强; 在同一离化度下, 角量子数 l 引起光电离截面两种性质完全不同的变化, 其相互竞争导致了光电离截面随入射光子能量的复杂变化。本文提供的高离化态金离子光电离截面的理论数据对于进一步研究等离子体中相关过程的模拟都将具有重要的意义。

参考文献 (References):

[1] Fang Quanyu, Li Ping, Liu Yong, *et al.* Acta Physica Sinica, 2000, **50**(4): 655(in Chinese).
(方泉玉, 李萍, 刘勇, 等. 物理学报, 2000, **50**(4): 655.)

[2] Quintenz J P, Bloomquist D D, Leeper R J, *et al.* Progress in Nuclear Energy, 1996, **30**(2): 183.

[3] Foord M E, Glenzer S H, Thor R S, *et al.* Phys Rev Lett, 2000, **85**(5): 992.

[4] Glenzer S H, Fournier K B, Wilson B G, *et al.* Phys Rev Lett, 2001, **87**(4): 045002.

[5] Wong K L, May M J, Beiersdorfer P, *et al.* Phys Rev Lett, 2003, **90**(5): 235001.

[6] May M J, Fournier K B, Beiersdorfer P, *et al.* Phys Rev, 2003, **E68**: 036402.

[7] May M J, Beiersdorfer P, Jordan N, *et al.* Nucl Instr and Meth, 2005, **B235**: 231.

[8] Brown G V, Hansen S B, Trabert E, *et al.* Phys Rev, 2008, **E77**(6): 066406.

[9] Honda K, Minma K. Phys Rev, 1997, **E55**: 4594.

[10] Cheng Xinlu, Liu Xiaohong, Yang Xiangdong, *et al.* High Power Laser and Particle Beams, 1999, **11**(1): 83(in Chinese).
(程新路, 刘小红, 杨向东, 等. 强激光与离子束, 1999, **11**(1): 83.)

[11] Jiao R Z, Chen X L, Yang X D. Chin Phys, 2003, **12**(10): 1140.

[12] Yang T L, Jiang G, Zhu Z H. Chin Phys Lett, 2002, **19**(7): 934.

[13] Zeng J L, Zhao G, Yuan J M. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 2007, **93**: 199.

[14] Peyrusse O, Amoult C B, Bauche J. J Phys, 2005, **B38**: L137.

[15] Yang N X, Dong C Z, Jiang J. Chin Phys Lett, 2009, **26**(5): 053401.

[16] Dong C Z, Fritzsche S. Phys Rev, 2005, **A72**: 012507.

[17] Dong C Z, Fritzsche S, Fricke B. Euro Phys J, 2006, **D40**: 317.

[18] Dong C Z, Xie L Y, Wan J J, *et al.* Chin Phys, 2005, **14**(06): 1009.

[19] Dong C Z, Fritzsche S, Xie L Y. J Quant Spectrosc Radiat Transf, 2003, **76**: 447.

[20] Parpia F A, Fischer C F, Grant I P. Comput Phys Comm, 1996, **94**: 249.

[21] Fritzsche S, J Electron Spectrosc Relat Phenom, 2001, **114-116**: 1155.

[22] Wan J J, Dong C Z, Ding X B, *et al.* Phys Rev, 2009, **A79**: 022707.

[23] Missavage D W, Manson S T, Daum G R. Phys Rev, 1977, **A15**(3): 1001.

[24] Reilman R F, Manson S T. Phys Rev, 1987, **A18**(5): 2124.

[25] Chao K D, Manson S T. Phys Rev, 1981, **A24**(5): 2481.

Theoretical Studies on Photoionization Processes of Highly Charged Au Ions^{*}

WANG Yun-rong, LIU Xiao-bin, DING Xiao-bin, DONG Chen-zhong[#]

(*Key laboratory of Atomic and Molecular and Functional Material of Gansu Province, College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China*)

Abstract: Based on multiconfiguration Dirac-Fock method and the corresponding packages GRASP92 and RATIP, as well as the newly developed RELPHOTO08, the variations of M subshell photoionization cross sections with the photon energy, ionization degree and subshells for highly charged gold ions are studied systemically. The present results show that the cross sections are decreasing monotonously with the photon energy; for the photoionization of nl electrons, if the principal quantum number of removed electron is large enough, the cross sections are essentially unchanged upon the presence or absence of outer electrons; for same ionization degree, the angular quantum number introduces two opposite effects which could exist simultaneously, and the intricate variations of cross sections with the photon energy originate from the competition between these two different effects.

Key words: multi-configuration Dirac-Fock method; photoionization; cross section

* **Received date:** 23 Jan. 2011; **Revised date:** 28 Feb. 2011

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China(10434100, 10774122, 10876028); Specialized Research Fund for Doctoral Program of Higher Education of China(20070736001)

Corresponding author: Dong Chen-zhong, E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn