

文章编号: 1007-4627(2008)01-0082-05

相对论小分量波函数对原子光电离截面的影响*

刘晓斌¹, 邢永忠¹, 孙小伟²

(1 天水师范学院物理与信息科学学院, 甘肃 天水 741001;

2 兰州交通大学数理学院, 甘肃 兰州 730070)

摘要: 利用相对论平均自洽场理论, 研究了相对论波函数的小分量对原子光电离截面的影响。原子核尺寸效应将使波函数小分量对原子光电离截面的影响减弱。由于波函数沿径向空间被压缩, 电子离核的平均半径较小, 波函数小分量对高离化态离子光电离截面的影响比对一般原子要强得多。波函数小分量反映了相对论效应的基本特征, 从而也定性地说明了光电离过程中相对论效应的强弱。

关键词: 光电离; 截面; 相对论效应; 波函数小分量

中图分类号: O562.4 **文献标识码:** A

1 引言

光电离过程的研究对原子物理和等离子体物理等领域十分重要, 这是由于光电离截面对原子中相关电子的波函数、关联作用及束缚能等非常敏感, 是研究原子结构及相关原子过程的有力工具。在恒星大气、X射线天文学、X射线激光、地球电离层、物质结构及凝聚态物质的性质等方面具有重要意义^[1, 2]。在当前探索人类未来的能源——受控热核聚变的研究中, 对高密度和部分离化等离子体的性质提出愈来愈精确的要求, 光电离截面的数据更是必不可少^[3]。光电离及其逆过程在等离子体中电离平衡的建立、维持、能量输运及等离子体的状态诊断等都具有非常重要的实际意义。在等离子体的研究中, 凡涉及到热稠密物质能量传输与分配时, 都将涉及到不透明度, 在英法联合的恒星不透明工程 (Stellar Opacity Project) 及铁工程 (Iron Project) 中计算光电离截面是其主要任务之一^[4, 5]。由于目前产生和加速高离化态离子的实验技术有了很大发展, 如利用重离子加速器、超级电子束离子阱 (Super-EBIT)、电子回旋共振 (ECR) 等可以产生离化度很高以至于裸核离子^[6-8], 这就为在极端条件进

行光电离过程的研究提供了条件。

尽管相对论效应对光电离过程的影响在文献中已多有讨论^[8-10], 但由于通常相对论波函数小分量反映了相对论效应的基本特征: 相对论效应越明显, 则波函数小分量“振幅”的相对值越大、自由电子波函数振荡越剧烈^[11], 其对光电离截面的影响也就间接、定性地说明光电离过程中相对论效应的强弱。本文利用 Dirac-Slater 相对论平均自洽场理论研究了相对论波函数的小分量对简单原子光电离截面的影响, 并对这种影响做了较详细的理论说明。如无特殊说明, 在本文中采用相对论单位: $\hbar = c = m_e = 1$ 。

2 理论研究方法

原子中某一电子受到外界辐射场作用, 当入射光子能量大于或等于原子中相关电子的电离能 (束缚能负值) 时电子即被电离, 由束缚态跃迁到连续态。其物理过程为

$$A^{(q-1)+}(n_i l_i) + h\nu \rightarrow A^{q+} + e_{\varepsilon_0 l_0}^- \quad (1)$$

ε_0 , l_0 和 $h\nu = \varepsilon$ 分别为光电子的动能、角量子数以及入射光子能量, n_i 和 l_i 为电离前束缚电子的主量

* 收稿日期: 2007-06-15; 修改日期: 2007-12-04

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10447006); 甘肃省自然科学基金资助项目(3ZX062-B25-010)

作者简介: 刘晓斌(1974—), 男(汉族), 甘肃天水人, 讲师, 主要从事原子结构及光电离方面的研究;

E-mail: liuxb_tstc@sohu.com

子数及角量子数。对一定能量的入射光子, 在相对论情况下光电离截面正比于其跃迁矩阵元的平方^[12]:

$$\sigma \propto |\langle \varphi_f | \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{u} | \varphi_i \rangle|^2. \quad (2)$$

φ_i 与 φ_f 为光电离初束缚态和末自由态的电子波函数; \mathbf{k} 为波矢, \mathbf{r} 为电离前束缚电子位矢, $\boldsymbol{\alpha}$ 为 Dirac 方程中的 $\boldsymbol{\alpha}$ 矩阵, \mathbf{u} 为入射光的偏振矢量单位。可以看出, 光电离截面的相对论理论计算最终归结为对其初末态波函数的处理。在本文中电子波函数均由 A^{q+} 离子的相对论平均自洽场求解 Dirac 方程而获得^[13]。

相对论自洽场理论本质上是独立电子的平均自洽场模型: 将原子中某一电子受到的核与其他电子的作用用一个平均势场代替, 即假定该电子在原子核与其他电子的平均势场中运动。与非相对论性自洽场理论不同, 单电子的相对论波函数为^[14]

$$\varphi_{n\kappa m} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r) & \chi_{\kappa m}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) \\ iQ_{n\kappa}(r) & \chi_{-\kappa m}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$P_{n\kappa}(r)$ 和 $Q_{n\kappa}(r)$ 为相对论波函数的大小分量, $\chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r)$ 和 $\chi_{-\kappa m}(\mathbf{r}/r)$ 为相对论波函数大小分量的自旋-球谐函数, n 为主量子数, κ 为同时表示电子角动量和宇称的相对论量子数, m 为磁量子数。由于束缚态的能量分立, 电子在非常靠近和远离核的区域出现的几率很小, 其波函数通常采用空间归一。对自由电子, 由于其能量连续, 波函数可以延伸到无穷远处, 采用能量归一较为方便^[15]。在中心场近似下, 研究原子时通常只关心其径向波函数的求解, 而对角向部分则较少关心, 这是因为波函数的角向和径向部分可以分离(从严格意义上讲, 只有对氢波函数的角向和径向部分可以分离, 其他则未必如此), 而分离后的角向部分在跃迁前后不变, 并且仅与电子数有关。径向波函数则不然, 其在跃迁前后要发生变化, 对多电子原子只能通过数值求解 Dirac 方程而获得, 并且对不同原子的具体过程须单独计算。所以微观体系波函数的求解通常是对径向波函数而言的。如果不考虑 Dirac 方程的非齐次项, 对满足一定边界条件的相对论径向波函数大分量 $P_{n\kappa}(r)$ 和小分量 $Q_{n\kappa}(r)$, 其径向 Dirac 方程为^[14]

$$\begin{aligned} \left(-\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r}\right) Q_{n\kappa}(r) &= [E_{n\kappa} - 1 - V_{\text{scf}}(r)] P_{n\kappa}(r), \\ \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r}\right) P_{n\kappa}(r) &= [E_{n\kappa} + 1 - V_{\text{scf}}(r)] Q_{n\kappa}(r), \end{aligned} \quad (4)$$

$V_{\text{scf}}(r)$ 为相对论平均自洽势, $E_{n\kappa}$ 为电子在 $n\kappa$ 次壳层的轨道能量, 因含电子静能 $m_e c^2 = 1$, 电子束缚能应为 $\varepsilon_{n\kappa} = -|E_{n\kappa} - 1|$ 。相对论量子数 κ 与总量子数 j 的关系为

$$\kappa = \begin{cases} l, & j = l - 0.5 \\ -l - 1, & j = l + 0.5 \end{cases}. \quad (5)$$

此时光电离截面与相对论波函数的大小分量有如下关系^[16]:

$$\sigma \propto |\langle P_f | \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{u} | P_i \rangle + \langle Q_f | \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{u} | Q_i \rangle|^2. \quad (6)$$

多电子原子中束缚电子径向 Dirac 方程只能通过自洽场迭代求解, 自由电子则由于其动能已知, 通常不需要迭代而只需进行数值积分就可得到其波函数。

3 结果及讨论

对氢和类氢原子的单光子光电离过程的研究表明, 当入射光子的能量较大时, 光电离截面随光子能量的增加而单调地减小^[17]。入射光子能量较低时相对论效应较微弱, 但随着光子能量的增加相对论效应对原子光电离过程的影响将趋于增强^[9]。由于通常相对论波函数小分量反映了相对论效应的基本特征, 从而也定性地说明了相对论效应对电离截面的影响。

3.1 对一般原子的影响

无论是束缚电子还是自由电子, 其小分量与大分量相差悬殊, 在理论研究中大分量通常起决定作用^[11]。图 1 给出了 H 的 1s 电子被电离时光电离截面随入射光子能量的变化曲线。其中, PQ 表示相对论波函数的大小分量所对应的曲线, P 表示没有考虑小分量即大分量所对应的曲线, 以下有类似表示(图中的能量采用原子单位, 1 hartree = 27.2 eV)。可以看出: 入射光子能量较小时, PQ 和 P 曲

线相差较大, 随入射光子能量的增加两曲线相交并单调减小; 相对 PQ 曲线, P 曲线出现了振荡。对一定的光电离过程, 初束缚电子波函数是确定的, 而未自由电子波函数则随入射光子的能量而变化。由(2)式和(6)式可知影响光电离截面的只有末自由电子波函数。通常自由电子波函数在靠近核时“振幅”较小, 远离核时“振幅”较大且振荡剧烈, 与主量子数较大而角量子数相同的束缚态电子波函数相似^[11]; 末自由电子能量(入射光子能量)越大, 其波函数振荡则越剧烈, 相对于初束缚电子波函数, 波函数大小分量的平均值越接近 0, 跃迁矩阵元的平方即光电离截面也就越小, 从而使 PQ 和 P 曲线在入射光子能量增大时单调减小并趋于一致。由(6)式可知, 小分量对跃迁矩阵元的贡献不一定总为正, 考虑到相对论波函数的大小分量并未完全“同步”, 从而导致 P 曲线出现轻微振荡。

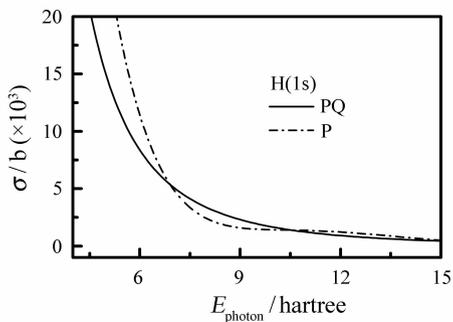


图 1 H 的 1s 电子被光电离时电离截面随入射光子能量的变化

3.2 不同核模型下的影响

尽管原子核的大小对核外电子的影响非常微弱, 但由于光电离截面对电子波函数的敏感性, 这种影响还是可以在光电离截面上反映出来。图 2 给出了不同核模型下 $Fe^{15+}(1s^2 2s^2 2p^6 3s)$ 的 3s 电子被光电离的情况。 $Fe^{15+}(3s)$ -point 表示没有考虑原子核的大小即点核模型下电离截面随入射光子能量的变化曲线, 而 $Fe^{15+}(3s)$ -ordinary 为考虑了核半径 $R = r_0 A^{1/3}$ 时的情况(这里 $r_0 = 1.20 \times 10^{-15} m$, A 为质量数)。如果考虑到原子核的大小, 核电荷分布对核外电子有一定影响: 电子波函数会延伸到核的区域, 其所感受到的有效核电荷将减小, 进而影响到波函数及束缚能等, 并最终影响到光电离过程的跃迁矩阵元, 从而使光电离截面的曲线发生各种变

化, 此即核的尺寸效应 (nuclear finite-size effects)^[18]。电子所感受到的等效核电荷减小, 相对论效应即波函数小分量对光电离截面的影响将减弱, 从而使 PQ 和 P 曲线的差别减小, 而这正是图 2 所示的。

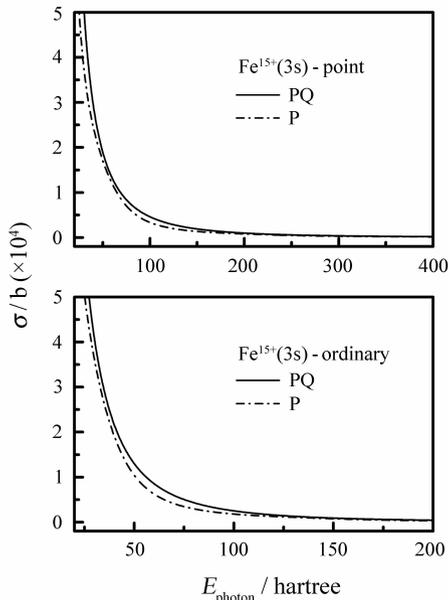


图 2 不同的原子核模型下, $Fe^{15+}(1s^2 2s^2 2p^6 3s)$ 的 3s 电子被光电离时电离截面随入射光子能量的变化

3.3 高离化态离子

通常波函数的大分量在原子光电离过程中起决

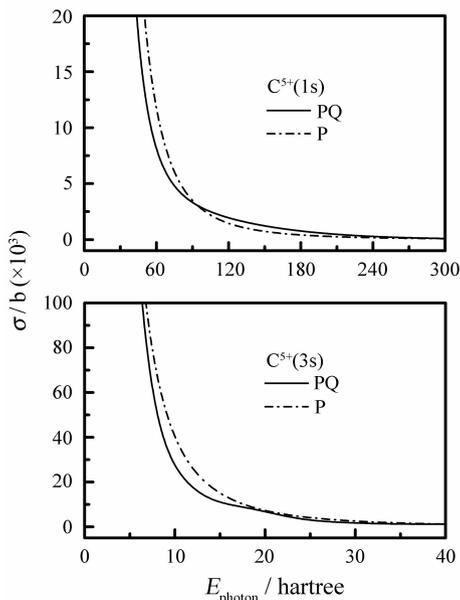


图 3 C^{5+} 的 1s 和 3s 电子被光电离时电离截面随入射光子能量的变化

定作用,但在某些特殊情况下小分量的作用不可忽略,其大小反映了相对论效应的强弱,尤其是对高离化态离子或低 Z 原子的内壳层电子更是如此。图 3 给出了 C^{5+} 的 $1s$ 和 $3s$ 电子被光电离的情况。可以看到,在入射光子的能量范围内, $C^{5+}(1s)$ 的两曲线差别比 $C^{5+}(3s)$ 以及图 1 中 $H(1s)$ 的两曲线的差别均大。这是因为 $C^{5+}(1s)$ 为高离化态离子,有效核电荷较大,波函数沿径向空间被压缩^[7],电子离核的平均半径急剧减小,相对论效应即小分量对光电离截面的影响将有所增大;相对 $C^{5+}(3s)$, $C^{5+}(1s)$ 的电子平均半径更小,小分量的影响则更大。

4 结论

在独立粒子的相对论平均自治场理论框架内,本文研究了相对论波函数小分量对简单原子光电离截面的影响。波函数大分量通常对原子光电离过程起决定作用,但在某些特殊情况下小分量的作用不可忽略,其大小反映了相对论效应的强弱。随光子能量的增加,没有考虑小分量的光电离截面曲线与大小分量的截面曲线均单调减小并趋于一致,对高离化态离子与不同核模型下的原子也有类似结论。这是因为随入射光子能量的增加光电子能量也增加,其波函数的振荡更加剧烈,相对于束缚电子波函数,光电子波函数的平均值更趋于 0。对高离化态离子,由于等效核电荷较大,电子离核的平均半径较小,波函数小分量即相对论效应对光电离截面的影响将增强,而原子核的尺寸效应更使小分量对电离截面的影响减弱。

参考文献 (References):

- [1] Jung Young-Dae. *Phys Plasma*, 1998, **5**: 4 456.
- [2] An Zhu, Liu Mantian, Tang Changhuan, *et al.* *Nuclear Physics Review*, 2003, **20**(4): 268 (in Chinese).
(安 竹, 刘慢天, 唐昶环等. 原子核物理评论, 2003, **20**(4): 268.)
- [3] Alfred Z M, William A M, Julian N. *Phys Rev*, 1990, **A42**: 1 286.
- [4] West J B. *J Phys*, 2001, **B34**: R45.
- [5] Zeng Jiaolong, Jin Fengtao, Yuan Jianmin. *Nuclear Physics Review*, 2002, **19**(2): 184 (in Chinese).
(曾交龙, 靳奉涛, 袁建民. 原子核物理评论, 2002, **19**(2): 184.)
- [6] Zhou Yuehua, Qian Xingzhong, Pan Shoufu. *J At Mol Phys*, 2003, **20**(4): 446 (in Chinese).
(周跃华, 钱兴中, 潘守甫. 原子与分子物理学报, 2003, **20**(4): 446.)
- [7] Gillaspay J D. *J Phys*, 2001, **B34**: R93.
- [8] Ichihara A, Eichler J. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 2001, **79**: 187.
- [9] Tong Xiaomin, Liu Lei, Li Jiaming. *Phys Rev*, 1994, **A49**: 4 641.
- [10] Akiva R, Goldberg I B, Stein J, *et al.* *Phys Rev*, 1994, **A50**: 1 312.
- [11] Liu Xiaobin, Xing Yongzhong. *J At Mol Phys*, accepted (in Chinese).
(刘晓斌, 邢永忠. 原子与分子物理学报, 已接收.)
- [12] Ichihara A, Shirai T, Eichler J. *Phys Rev*, 1994, **A49**: 1 875.
- [13] Li Jiaming, Zhao Zhongxin. *Acta Phys Sin*, 1982, **31**(1): 97 (in Chinese).
(李家明, 赵中新. 物理学报, 1982, **31**(1): 97.)
- [14] Dvall K G, Grant I P, Johnson T, *et al.* *Comput Phys Comm*, 1989, **55**: 425.
- [15] Cao Wei, He Liming, Zhu Yunxia, *et al.* *J At Mol Phys*, 2005, **22**(3): 524 (in Chinese).
(曹 伟, 贺黎明, 朱云霞等. 原子与分子物理学报, 2005, **22**(3): 524.)
- [16] Rodríguez R, Gil J M, Rubiano J G, *et al.* *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*, 2005, **91**: 393.
- [17] Liu Xiaobin, Dong Chenzhong, Xing Yongzhong. *J At Mol Phys*, 2007, **24**(5): 987 (in Chinese).
(刘晓斌, 董晨钟, 邢永忠. 原子与分子物理学报, 2007, **24**(5): 987.)
- [18] Cheng K T, Johnson W R, Sapirstein J. *Phys Rev*, 1993, **A47**: 1 817.

Effects of Relativistic Small Radial Component on Atomic Photoionization Cross sections*

LIU Xiao-bin^{1, 1)}, XING Yong-zhong¹, SUN Xiao-wei²

(1 *School of Physics and Information Science, Tianshui Normal University, Tianshui 741000, Gansu, China;*

2 *School of Mathematics and Physics, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou 730070, China*)

Abstract: The effects of relativistic small radial component on atomic photoionization cross sections have been studied within relativistic average self-consistent field theory. Relativistic effects are relatively unimportant for low photon energy, along with a review of high-energy photoionization the relativistic effects are quite important. The effects of relativistic small radial component on photoionization process should show breakdown when the nuclear finite-size effects is taken into account. The compression of wavefunction into the space near nucleus is so strong in highly charged ions that the electronic radius greatly decreases, and the effects of relativistic small radial component on photoionization cross sections turn to stronger than ordinary atoms. Since relativistic effects are extremely sensitive to the behavior of small radial component, the results are in good agreement with relativistic effects on photoionization cross section.

Key words: photoionization; cross section; relativistic effect; wavefunction small radial component

* **Received date:** 15 Jun. 2007; **Revised date:** 4 Dec. 2007

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China (10447006); Natural Science Foundation of Gansu Province of China (3ZX062-B25-010)

1) E-mail: liuxb_tstc@sohu.com