doi: 10.3969/j.issn.1000-0364.2019.02.014

原子核对光电离截面的影响

刘晓斌[1]，师应龙[1]，邢永忠[1]，路飞平[1]，李向兵[1]，王玉平[1]，桑萃萃[2]

(1. 天水师范学院物理系，天水 741001；2. 兰州理工大学理学院，兰州 730050)

摘 要： 利用 Dirac－Slater 相对论平均自洽场理论，研究了不同原子体系光电离截面在不同核模型下的差异．考虑原子核大小时，核的尺寸效应使电子所感受到的有效核电荷减小，并进而影响到电子的概率分布及光电离截面等；对没有考虑原子核大小的点模型，由于不存在核的尺寸效应，出射光电子的波函数有较大相移，从而有可能出现 Cooper 极小．当入射光子的能量远大于相关电子的电离能时，不同核模型下电子束缚能及平均半径等的差异将相对减小，从而使光电离截面随入射光子能量的变化趋于一致．

关键词： 相对论自洽场；核模型；光电离；尺寸效应

中图分类号： O562.4 **文献标识码：** A **文章编号：** 1000-0364(2019)02-0258-05

Influences of nucleus on atomic photoionization cross section

LIU Xiao-Bin[1], SHI Ying-Long[1], XING Yong-Zhong[1], LU Fei-Ping[1], LI Xiang-Bing[1], WANG Yu-Ping[1], SANG Cui-Cui[2]

(1. Department of Physics, Tianshui Normal University, Tianshui 741001, China;
2. College of Science, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)

Abstract: Based on Dirac－Slater relativistic average self－consistent field, the difference of photoionization cross sections within different nuclear models for different atomic systems have been studied systemically. The calculated results indicate that the effective nuclear charge of electron is decreased when the nuclear finite－size effects is taken into account. Cooper minimum may be occured within nuclear point model, it can be understood by considering the larger phase shift of outgoing photoelectron wave function after the atom absorbs one photon. If the energy of incident photon greatly exceeds the electronic photoionization threshold, the differences of bounding energy and the average radii from nucleus within different nuclear models are decreased oppositely, and the variation of photoionization cross sections with photon energy will turn to consistent.

Key words: Relativistic self－consistent field; Nuclear model; Photoionization; Finite－size effects

1 引 言

原子电离数据在等离子体物理、天体物理及辐射物理等方面非常重要，在理论和实际应用中均具有一定意义．在惯性约束聚变(ICF，inertial confinement fusion)、X 射线激光及其他一些高科技研究领域，都涉及到等离子体状态下光与原子的相互作用[1,2]．通常等离子体是由各种离化度原子、自由电子及辐射光子等组成的，而且不同离化度原子在各能级上的布居及其与周围电子、光子或其他原子的相互作用，都将直接影响等离子体的运动状态．因此，为模拟等离子体状态下不同元素不同电离度原子的相对丰度、电离平衡、光谱特性及平均电离度等，光电离及其逆过程的相关参量通常十分重要．由于光电离过程显示了原子中电子的关联效应，其截面对原子中相关电

收稿日期： 2018-03-28
基金项目： 国家自然科学基金(11764035，11464040，11665019)
作者简介： 刘晓斌(1973—)，男，甘肃天水人，教授．主要从事原子结构与光电离方面的研究．E-mail: liuxb@tsnu.edu.cn

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

子的波函数及束缚能非常敏感，通过光电离过程的研究不仅可以检验极端条件下相关理论的正确性，也是研究原子结构的重要方法，从而使其成为原子物理及等离子体物理中最重要的研究领域之一[3]．考虑到原子核的大小，核尺寸效应将对电子产生一定影响：可改变其概率分布、束缚能，并进而影响到相关的原子过程．通常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原子中相关电子的波函数非常敏感，这种影响还是可以在原子光电离过程的相关参数如截面上反映出来．到目前为止，人们对原子核的尺寸效应做了大量的研究[4]，但对其在原子光电离过程的影响却相对较少．本文利用 Dirac－Slater 相对论平均自洽场理论，研究了原子核对不同原子体系光电离截面的影响.

在原子光电离的理论研究中，影响其计算结果的因素主要有两个：电子与电子之间的关联效应是否考虑全面，即所构造的波函数是否合理；Hamilton 是否包含了比较重要的贡献如 Breit 相互作用(横向电磁相互作用，即两电子间由于交换了一个横向光子而对 Coulomb 相互作用的低级修正)、自能、真空极化以及核的尺寸效应等[5]．在本文中，如无特殊说明，我们一律采用自然单位(相对论单位)：$\hbar = m_e = c = 1$.

2　理论方法

在原子的光电离过程中，某一电子受到外界辐射场作用；当入射光子的能量大于或等于原子中相关电子的电离能(束缚能负值)时此电子即被电离，由束缚态跃迁到连续态．入射光子能量为 $\varepsilon = h\nu = \omega$ 时，其相应的光电离微分截面为[6,7]

$$\frac{d\sigma_{Ph}}{d\Omega} = \frac{\alpha}{4\omega}\frac{1}{2j_b+1}\sum_{\mu_b}\sum_{m_s}|M_{P,b}(m_s,\lambda_+,\mu_b)|^2 \tag{1}$$

$\alpha = e^2/\hbar c = 1/137.036$ 为精细结构常数．这里对初束缚态电子角动量投影 μ_b、入射光 $\lambda_+ = 1$ 和 $\lambda_- = -1$(光的偏振或极化从微观角度讲只能有两个方向)进行了加权平均；对电离后光电子的自旋投影 $m_s = \pm 1/2$ 进行了求和．这就等价于只取两种偏振中的一种，相应的跃迁矩阵元为

$$M_{P,b}(m_s,\lambda_+,\mu_b) = \int\varphi^+_{P,m_s}(r)\vec{\alpha}\cdot\vec{u}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\varphi_{j_b,\mu_b}(r)\,d^3r \tag{2}$$

与(1)不同，这里 $\vec{\alpha}$ 是 Dirac α 矩阵；$\vec{u}$ 是光子偏振的单位矢量，相当于对入射光子的方向进行了定义；$\varphi^+_{P,m_s}(r)$ 是电离后末连续态的共轭波函数，$\varphi_{j_b,\mu_b}(r)$ 是电离前初束缚态波函数．在本文的理论计算过程中，初末态均为相对论波函数，由原子的 Dirac－Slater 相对论平均自洽场方法获得[8].

如果同一势场中电子的相对论量子数 κ 相同，Dirac 方程的非齐次项可不予考虑[9]，经分离变量后可得到径向波函数的大小分量 $P_{n\kappa}(r)$ 和 $Q_{n\kappa}(r)$ 所满足的 Dirac 方程[10]

$$\left(-\frac{d}{dr}+\frac{\kappa}{r}\right)Q_{n\kappa}(r) = (\varepsilon_{nk}-1-V_{scf}(r))P_{n\kappa}(r)$$

$$\left(\frac{d}{dr}+\frac{\kappa}{r}\right)P_{n\kappa}(r) = (\varepsilon_{nk}+1-V_{scf}(r))Q_{n\kappa}(r) \tag{3}$$

这是 2 个一阶微分方程的联立方程组，其中 ε_{nk} 为电子在 $n\kappa$ 次壳层的轨道能量．此式描述的是在平均势场 $V_{scf}(r)$ 中运动的电子，这里相对论平均自洽势具体包含三部分

$$V_{scf}(r) = V(r)_{n-e} + V(r)_{e-e} + V_{exc}(r) \tag{4}$$

$V(r)_{n-e} = -Z\alpha/r$ 为核吸引的库仑势，$V(r)_{e-e}$ 为电子间的排斥势，$V_{exc}(r)$ 为局部交换势．尽管原子核的大小即体积对核外电子的影响很微弱，但该影响仍可在原子光电离截面等相关参数上有所反映．通常原子内电子的概率密度从中心向外逐步减小，这与原子核的情况有很大不同：核表面以内物质存在概率密度很高，而表面以外核密度则很快降到零；尤其对重原子核此段变化距离比原子核的半径小得多，这说明原子核的边界比较确定．大量的实验分析表明，原子核内部的密度基本均匀即随质量数 A 的增加，核的体积也相应的成比例增加，即 $V \propto A$．所以原子核半径可表示为[11]

$$R = r_0A^{1/3} \tag{5}$$

这里核半径常数 $r_0 = 1.20\times10^{-15}m$ 可通过 α 粒子、中子、质子、电子或其他粒子与原子核的散射实验而得到．通常核密度分布的研究包括两方面：用电磁相互作用研究核的电荷分布和用强相互作用研究核的物质分布；由于实验数据统计量的限制，由此两种方法得到的核半径常数 r_0 有细微差异，其取值范围为 $r_0 = (1.20\sim1.35)\times10^{-15}$ m．对轻核 $r_0 \approx 1.35\times10^{-15}$ m，随原子序数的增加 r_0 略呈减小趋势，而对重核则有 $r_0 \approx 1.20\times10^{-15}$ m．曾谨言研究了公式(5)，指出无论是轻核还是重核，根据原子核的结合能、同位旋效应

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

以及库仑能差的变化规律等，核半径更好的遵守如下规律[12-14]

$$R = r_p Z^{1/3} \tag{6}$$

这里 Z 为核电荷数，r_p 为常数，其大小为 $r_p = 1.64\times10^{-15}$ m. 原子核的半径是描述核性质最基本的物理量之一，但需要指出的是：原子核半径不是指其几何半径，早期指核密度的分布范围；当人们发现原子核具有内部结构以后，核半径被认为是核力的有效范围；但通常两者差别不是很大，而且由原子核具有电四极矩可知大多数原子核是偏离球形不多的椭球．由于研究问题的角度不同，不同实验方法所测定的原子核半径并不完全一致，例如由于电子与原子核之间存在库仑引力，用高能电子对核散射实验得出的核半径通常要小一些．

3 计算结果及讨论

利用 Dirac－Slater 相对论平均自洽场理论，本文研究了原子核对不同原子体系光电离截面的影响．具体包括以下三个方面：

3.1 原子核对电子概率分布的影响

原子核对原子性质的贡献主要来自其质量与电荷．由式(5)和(6)可以看出，原子核质量与电荷的变化均可影响到核半径的大小，并进而影响到核外电子的概率分布、光电离截面等．图1是不同核模型下 $Na(4s)$ 和 $K(4s)$ 的 $4s$ 电子的径向概率分布．其中 $P-model$ 表示没有考虑核大小的点模型，$CZ-model$ 为一般和曾氏模型，以下表示类似．相对于核的点模型，一般和曾氏模型下电子的径向概率分布 $P^2(r)+Q^2(r)$ 沿远离核的方向扩展；由于电子在核外的总概率为1，从而使概率分布曲线降低，即在核的一般和曾氏模型下电子离核的平均距离有所增加．这是因为考虑到原子核大小，核电荷分布对核外电子波函数有一定影响：电子波函数会延伸到核的区域，从而使其所感受到的有效核电荷有所减小，并影响到电子的束缚能及其核外的概率分布等，此即核的尺寸效应(finite－size effects)[15-17]．由以上论述可知：通常核电荷即原子序数越大、电子离核的平均距离就越小，则尺寸效应越明显；如果存在原子实，核半径的变化也会影响到原子实中的相关电子．电子对原子实的贯穿与核的尺寸效应均可影响电子所感受到的有效核电荷但性质相反，通常原子实的贯穿效应要比核的尺寸效应强的多，而后者仅对高离化态离子的 s 电子较为明显，从而使原子核对相关电子的影响变得较为复杂．由于一般及曾氏模型下原子核的半径相差无几，核半径对核外电子光电离过程的影响则看不出来．

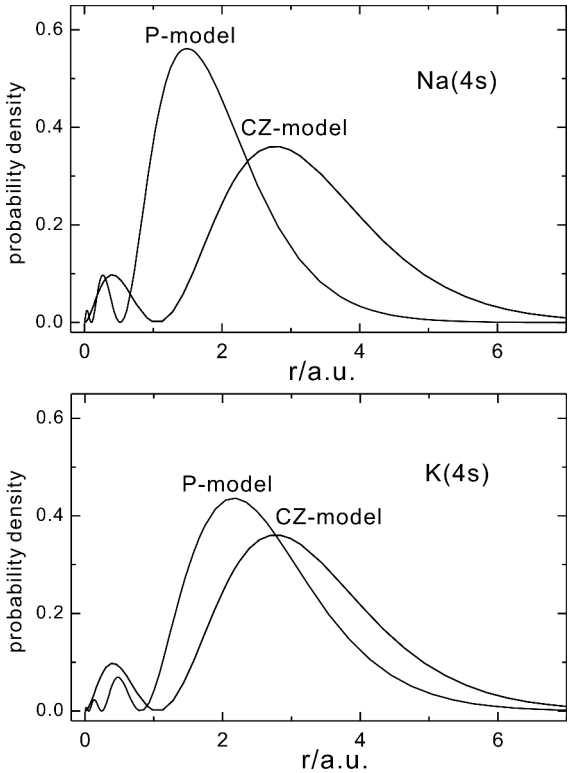

图1 不同原子核模型下 Na($2p^64s$) 和 K($2p^63s^23p^64s$) 的 4s 电子径向概率分布

Fig. 1 The radial probability densities for 4s of Na ($2p^64s$) and K($2p^63s^23p^64s$) within different nuclear models

3.2 不同核模型下光电离截面的差异

由于原子核的尺寸效应，不同核模型下电子波函数将发生或大或小的变化，并最终影响到原子光电离过程的相关参量如截面等．图2是不同核模型下 $K(4s)$ 和 $Fe^{15+}(3s)$ 的光电离截面随入射光子能量的变化曲线．可以看到：入射光子能量一定时，一般及曾氏模型下光电离截面完全相同；入射光子能量较小时一般及曾氏模型的光电离截面较点模型的略大，随入射光子能量的增加，点模型与一般及曾氏模型的曲线将相交，最终使一般及曾氏模型的光电离截面比点模型的略小，尤其对 $K(4s)$ 则更为明显．对点模型下的 $K(4s)$，当入射光子能量减小至趋于电子的电离能时，光电离截面随入射光子能量的增加呈现非单调性变化，此即 Cooper 极小[18,19]．在核的一般及曾氏模型下，由于尺寸效应使电子的有效核

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

电荷减小从而使其离核的平均半径增大. 对一定能量的入射光子，有效核电荷减小意味着入射光子能量与电子电离能(束缚能负值)之差增大，从而更不容易发生光电离，相应的电离截面也就越小; 而电子离核平均半径增大则说明入射光子越容易接近电子而发生电离，即光电离截面有所增大; 不同核模型对光电离截面的这两种影响同时存在而性质相反. 通常出射光电子的径向波函数本质上为平面波，即在离核无穷远处为正弦或余弦函数; 在核效应相对重要的近核区域，径向波函数将逐渐失去其平面波的特征而转换为扭曲波. 如果光电子的动能较小，核的影响将变得相对重要，以致光电子的径向波函数更接近扭曲波. 所以尽管初束缚电子的径向波函数对不同能量的入射光子保持不变，但当入射光子能量(也就是出射光电子的动能)连续增加时，光电子径向波函数直观上将朝靠近原子核的方向移动，在某一特定能量点其偶极矩阵元及相应光电离截面将趋于 0，这就是 Cooper 极小[19]; 由于核的点模型没有考虑原子核大小，出射光电子所感受到的有效核电荷相对较大，从而更有可能出现 Cooper 极小. 当入射光子能量远大于相关电子的电离能时，不同核模型下相关电子的束缚能及平均半径等的差异对其光电离过程的影响将相对减小，从而使不同核模型光电离截面随入射光子能量的变化趋于一致，而这正是图 2 所反映的.

3.3　高离化态原子

原子核对离化度较高的离子即高离化态原子的影响要比对一般原子的影响大的多. 在图 2 中 $Fe^{15+}(3s)$ 光电离过程的入射光子能量范围比 $K(4s)$ 的要大的多，而图 3 中 $U^{81+}(3s)$ 的入射光子的能量范围更大. 可以看出: 原子核对 $Fe^{15+}(3s)$ 的光电离截面的影响比对 $K(4s)$ 的影响大，而对 $U^{81+}(3s)$ 的影响则更大. 这是由于 $Fe^{15+}(3s)$ 和 $U^{81+}(3s)$ 均为高离化态原子，其电子所感受到的有效核电荷较大，波函数沿径向空间被压缩，电子离核的平均半径急剧减小[20]，从而使原子核对核外电子波函数及相应光电离截面等的影响比对一般原子的影响更大，当入射光子的能量较小时则更如此.

4　结　论

利用相对论平均自洽场理论，研究了类氢原子光电离截面在不同核模型下的差异. 计算结果

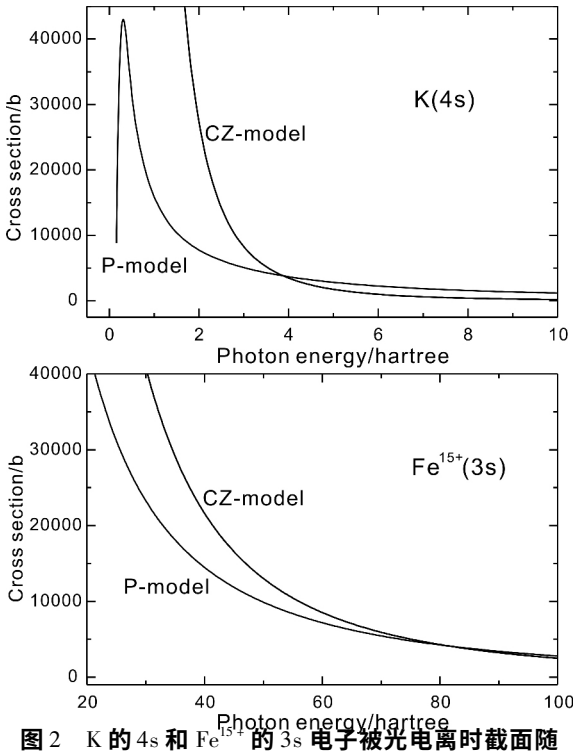

图 2　K 的 4s 和 Fe^{15+} 的 3s 电子被光电离时截面随入射光子能量的变化; 对 K 的 4s 电子，在没有考虑原子核大小的点模型下当入射光子能量较小时出现了 Cooper 极小

Fig. 2　Variation of cross section with photon energy when 4s of K and 3s of Fe^{15+} are photoionized, the Cooper – minimum is occured at low energy of photon for K within nuclear point model

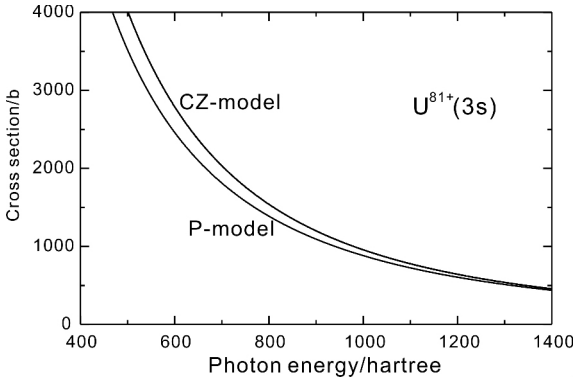

图 3　U^{81+} 的 3s 电子被光电离时截面随入射光子能量的变化

Fig. 3　Variation of cross section with photon energy when 3s of U^{81+} is photoionized

表明: 原子核的质量与电荷的变化均可影响到核半径的大小，并进而影响到核外电子的概率分布(波函数)及相应的光电离截面等. 这是因为当考虑核的大小时，核尺寸效应将使电子所感受到的有效核电荷趋于减小，并最终影响到核外电子的概率分布(波函数)及光电离截面等; 对没有考虑原子核大小的点模型由于不存在核的尺寸效应，

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

出射的连续光电子波函数有较大相移，从而更有可能出现 Cooper 极小.

参考文献:

[1] Purohit G, Kato D. Projectile – charge dependence of the differential cross section for the ionization of argon atoms at 1 keV [J]. *Phys. Rev.* A, 2017, 96: 042710.

[2] Ma K. Theoretical studies on the K shell photoionization processes of Al atom [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2018, 35: 181 (in Chinese) [马堃. Al 原子 K 壳层光电离的理论研究 [J]. 原子与分子物理学报, 2018, 35: 181]

[3] West J B. Photoionization of atomic ions [J]. *J. Phys.* B: *At. Mol. Opt. Phys.*, 2001, 34: R45.

[4] Sánchez R, Nörtershäuser W, Ewald G, *et al.* Nuclear Charge Radii of ^{9,11}Li: The Influence of Halo Neutrons [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 96: 033002.

[5] Thierfelder C, Schwerdtfeger P. Quantum electrodynamic corrections for the valence shell in heavy many – electron atoms [J]. *Phys. Rev.* A, 2010, 82: 062503.

[6] Grant I P. *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules: Theory and Computation* [M]. New York: Springer, 2007.

[7] Ichihara A, Shirai T, Eichler J. Radiative electron capture in relativistic atomic collisions [J]. *Phys. Rev.* A, 1994, 49: 1875.

[8] Liu X B, Xing Y Z. The calculation of atomic relativistic wave function on average self – consistent field [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2017, 24: 1255 (in Chinese) [刘晓斌, 邢永忠. 原子相对论波函数的平均自洽场计算 [J]. 原子与分子物理学报, 2017, 24: 1255]

[9] Dyall K G, Grant I P, Johnson C T, *et al.* Grasp: A general – purpose relativistic atomic structure program [J]. *Comput. Phys. Commun.*, 1989, 55: 425.

[10] Li J M, Zhao Z X. Variation in L, M, N inner – shell electron binding energies of rare – earth elements in valence transition [J]. *Acta Phys. Sin*, 1982, 31: 97 (in Chinese) [李家明, 赵中新. 变价稀土元素 L, M, N 内壳层电子束缚能的变化 [J]. 物理学报, 1982, 31: 97]

[11] Mei Z Y. *Nuclear Physics* (3rd ed.) [M]. Beijing: Science Press, 1983 (in Chinese) [梅镇岳. 原子核物理学 [M]. 三版. 北京: 科学出版社, 1983]

[12] Zeng J Y. Radius of nuclear charge distribution and nuclear binding energy [J]. *Acta Phys. Sin.*, 1957, 13: 357 (in Chinese) [曾谨言. 原子核电荷分布半径及结合能 [J]. 物理学报, 1957, 13: 357]

[13] Zeng J Y. The $Z^{1/3}$ of radius for nuclear charge [J]. *Acta Phys. Sin.*, 1975, 24: 151 (in Chinese) [曾谨言. 原子核电荷半径的 $Z^{1/3}$ 律 [J]. 物理学报, 1975, 24: 151]

[14] Zhang S Q, Meng J, Zhou S G, *et al.* A new formula of nuclear charge radii [J]. *High Energ. Phys.*, 2002, 26: 252 (in Chinese) [张双全, 孟杰, 周善贵, 等. 原子核电荷半径的新公式 [J]. 高能物理与核物理, 2002, 26: 252]

[15] Ginges J S M, Berengut J C. Atomic many – body effects and Lamb shifts in alkali metals [J]. *Phys. Rev.* A, 2016, 93: 052509.

[16] Zheng S D, Li B W, Li J G, *et al.* The influences of the finite nuclear size effects on the energy levels and wavefunctions of hydrogen – like ions [J]. *Acta Phys. Sin.*, 2009, 58: 1556 (in Chinese) [郑曙东, 李博文, 李冀光, 等. 原子核的有限体积效应对高离化态离子能级和波函数的影响 [J]. 物理学报, 2009, 58: 1556]

[17] Shabaev V M. Finite nuclear size corrections to the energy levels of the multicharged ions [J]. *J. Phys.* B: *At. Mol. Opt. Phys.*, 1993, 26: 1103.

[18] Liu X B, Shi Y L, Dong C Z. The 2p photoionization of ground – state sodium in the vicinity of Cooper minima [J]. *J. Phys.* B: *At. Mol. Opt. Phys.*, 2016, 49: 135001.

[19] Kim Y S, Pratt R H, Ron A. Overlap of shape resonance and Cooper – minimum structure in photoionization [J]. *Phys. Rev.* A, 1981, 24: 1626.

[20] Gillaspy J D. Highly charged ions [J]. *J. Phys.* B: *At. Mol. Opt. Phys.*, 2001, 34: R93.

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net