

文章编号: 1000-0364(2008)02-0412-05

原子光电离过程中的 Cooper 最小

刘晓斌¹, 董晨钟², 邢永忠¹

(1. 天水师范学院物理与信息科学学院, 天水 741000;

2. 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

摘要: 利用 Dirac-Slater 相对论自洽场理论, 研究了入射光子能量较小时 Na 和 K 原子最外层电子的光电离截面的变化规律及其 *s* 和 *p* 壳层的 Cooper 最小, 在论述 Cooper 最小的产生原因及其基本特征的基础上, 分析了影响 Cooper 最小的主要因素原子实、主量子数、角量子数以及总量子数等, 并对这种影响进行了较为详细的理论说明.

关键词: 相对论理论; 光电离; 截面; Cooper 最小

中图分类号: O562.4

文献标识码: A

The Cooper-minimum structure in atomic photoionization cross sections

LIU Xiao-Bin¹, DONG Chen-Zhong², XING Yong-Zhong¹

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

2. College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

Abstract: Based on Dirac-Slater relativistic self-consistent field, the examples of cooper-minimum in photoionization have been found in numerical calculations within a single-electron model at low energies. In these calculations for photoionization of Na and K we find cooper-minimum in the *s* and *p* subshells. Our calculated results indicate that the main factors what influence the position of cooper-minimum are atomic core, principal quantum number, angular momentum operator and so on. Finally the theoretical explains of these influence of cooper-minimum in photoionization cross section are given.

Key words: relativistic self-consistent field, photoionization, cross section, Cooper minimum

1 引言

在相对论独立粒子近似模型下, 对于氢和类氢离子的单光子光电离及其逆过程的研究表明, 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, 这主要是由于电子运动在纯库仑势场中, 入射光子的能量比相关电子的电离能大的多时电子被共振电离就会变的较为困难^[1]. 对存在节点的轨道, 当入射光子的能量连续减小、以至

趋于相关电子的电离能时, 情况则有所不同; 入射光子的能量较时光电离截面随光子能量的增加而减小; 但当入射光子的能量减小到一定值时, 光电离截面就会出现一极大值, 此后截面随入射光子能量的减小而减小, 直至出现一极小值即 Cooper 最小^[2-8]. 这是一种比较复杂的过程; 光电离截面随入射光子的能量的增加呈现非单调性变化.

Cooper 最小不是连续态的特征, 而是单光子矩阵元的特征, 是由相应跃迁矩阵元的符号变化而

收稿日期: 2006-12-04

基金项目: 国家自然科学基金(10376026, 10447006)

作者简介: 刘晓斌(1974-), 男, 甘肃天水人, 讲师, 主要从事原子结构与光电离方面的研究. E-mail: Liuxb-tstc@sohu.com

引起的^[7];由于原子实或核对电子连续态波函数的影响而发生的相移使跃迁矩阵元在此特殊的连续能量区的符号出现了变化,即由正转变为负,或由负正转变为正,其结果是跃迁矩阵元必要经历一个零值点,由于光电离截面正比于跃迁矩阵元的平方,所以跃迁矩阵元随入射光子能量的变化将会出现“下凹”的极小值,此即 Cooper 最小. 其物理过程为:初束缚态电子的平均半径相对于末连续态电子非常小,原子实或核对波函数的影响都比较大,当电子吸收入射光子的能量而被电离时,电子将离开其初始的半径位置,其运动方向一般只能是远离或靠近核;当电子以靠近核的方向运动时,一旦越过核其实也就是远离核的运动,此时电子就有可能回到其初始位置,与吸收入射光子能量而向外运动的电子波函数发生干涉,如果电子的相对相移合适就有可能发生干涉相消,电子波函数不再会向外传播,此时就出现了 Cooper 最小. 一般情况下, Cooper 最小倾向于出现在高 Z 和中 Z 原子外壳层的光电离过程,这是因为初束缚态电子的轨道贯穿使其感受到的有效核电荷随半径的减小而迅速增加,屏蔽效应变得越来越小,就有可能使靠近核运动的电子相对于远离核运动的电子的波函数有较大的相移,从而更有可能发生干涉相消而出现 Cooper 最小. 如果在出现 Cooper 最小的同时又有形状共振,则 Cooper 最小处截面不一定为 0^[2].

利用 Dirac-Slater 相对论自洽场理论,本文详细研究了钠和钾原子光电离截面随入射光子能量变化时 Cooper 最小出现的规律,分析了影响 Cooper 最小的主要因素,并对这种变化规律做了相关的理论说明. 在本文中,我们全部采用了相对论单位: $\hbar = c = m_e = 1$.

2 理论方法

单电子原子体系的光电离过程可以表示为:

$$A^{(q-1)+}(n_i l_i) + h\nu \rightarrow A^{q+} + e_{\epsilon_0 l_0}^- \quad (1)$$

其中 $q = Z$ 为原子的核电荷数; ϵ_0 、 l_0 和 $h\nu = \epsilon$ 分别为自由电子的动能、角量子数以及入射光子的能量; n_i 和 l_i 为电离前束缚电子的主量子数及角量子数. 在这一过程中,原子中的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时电子即被电离,由束缚态跃迁到自由态.

当光子的能量 $\epsilon = h\nu = \omega$ 一定时,原子体系中单电子所对应的微分光电离截面为^[9-11]:

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

这里对光电离前束缚态电子的角动量投影 μ_b 、入射偏振光分别进行了平均,而对电子的自旋投影 m_s 则进行了求和. 对角动量投影 μ_b 和自旋投影 m_s 的求和意味着入射光无论取哪一偏振方向,其计算结果都一样,这就等价于只取一种偏振^[9,11]. 其相应的跃迁矩阵元为:

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

α 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,在具体的理论计算过程中如果提前对入射光子的方向进行了定义,则在公式中就没有必要再出现; \vec{k} 为波矢, φ_{P,m_s}^+ 为自由电子的波函数 φ_{P,m_s} 的共轭函数, $\varphi_{j_b, \mu_b}(\vec{r})$ 是束缚态电子的波函数. 可以看出,光电离截面的计算最终归结为对初末态波函数的处理,在(2)式中束缚态和连续态波函数均由 A^{q+} 离子的 Dirac-Slater 相对论自洽场方法获得^[12],对其角度进行积分即可得到光电离的总截面 σ_{ph} (barn: 10^{-28} m^2).

3 结果与讨论

利用上述方法,本文研究了当入射光子的能量较低时钠和钾原子光电离截面随入射光子能量变化规律及其与 Cooper 最小相关的一般规律,具体包括以下三方面:

3.1 Cooper 最小的一般特征

为了说明原子中电子被光电离时 Cooper 最小的一般规律,我们选择了 K 的 $4s$ 与 Na 的 $3p$ 电子为研究对象. 由图 1 可以看出,当入射光子的能量连续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变化呈非单调性,出现了极小值即 Cooper 最小,这与入射光子的能量较大时光电离截面与入射光子能量的变化关系有很大的不同^[1]. 长期以来,人们一直认为 Cooper 最小可能只存在于激光电离中,但近年来发现对于原子电离、辐射复合甚至分子电离也存在 Cooper 最小^[3],而且有些原子和分子的光电离截面随入射光子能量的变化会出现振荡,即存在多个 Cooper 最小,图 1 所示的只是单个 Cooper 最小的情况.

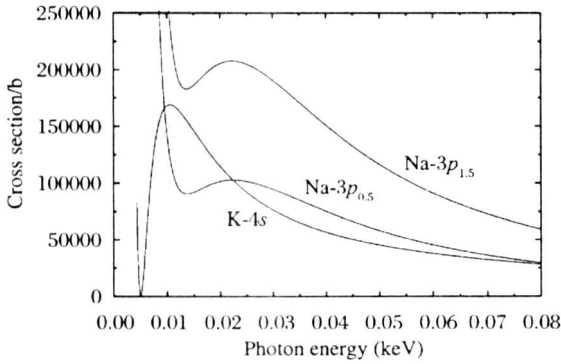


图1 K的4s与Na的3p电子被光电离时电离截面随入射光子能量的变化,当入射光子能量较小时均出现了Cooper最小

Fig. 1 Variation of cross section with photon energy when 4s of K and 3p of Na are photoionized, the cooper minimum is occurred at low energy of photon

3.2 总量子数和原子实对Cooper最小的影响

图2所示的是Na和K的4p电子被光电离时截面随入射光子能量的变化关系,为便于比较,我们将K的4p_{1.5}电子的光电离截面乘了系数0.5.由于总量子数较大时其所对应的量子态较多,所以当入射光子能量相同时,总量子数较大的电子所对应的截面也较大,即总量子数较大时其所对应的光电离截面曲线相对于总量子数较小时的曲线要高一些,但两曲线的变化趋势几乎完全一致.也就是说,总量子数较大时Cooper最小的位置将会变高,但对发生Cooper最小时入射光子的能量却几乎没有影响.可以设想,如果没有原子实的影响,图(a)和(b)中相同总量子数的曲线应该完全相同,而实际情况并非完全如此.由于原子实不同,两图中4p电子的电离能也不同,其具体值如下表所示.

表1 不同原子实外不同总量子数的4p电子的电离能/eV
Table 1 The ionization energy of 4p with different total angular momentum quantum number for different atomic core/eV

(a) $1s^2 2s^2 2p^6 4p$		(b) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4p$	
4p _{0.5}	4p _{1.5}	4p _{0.5}	4p _{1.5}
3.3088	3.3048	2.7370	2.7295

不同原子实外相同量子态电子的电离能一般是不同的,原子实较大时,相关电子的平均半径就

大,而电子的电离能则较小.对 $1s^2 2s^2 2p^6 4p$ 和 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4p$ 中4p电子,后者的平均半径要比前者大^[1],其4p电子的电离能则应该小一些.比较图2中的(a)和(b),可以看出对同一总量子数,(b)中的曲线相对(a)有一个向右的平移,而且曲线的位置也要低很多.这是因为,电子的电离能较大时,其所感受到的库仑势就强,较小能量的光子(但必须保证光子的能量大于等于电子的电离能)也可以使电子离开其初始位置而发生很小的位移,而在较强的库仑场中,即使电子的位移很小也可以产生较大的相移,从而使远离与靠近核的电子波函数更容易产生干涉相消,这就Cooper最小;当总量子数相同,图(a)中4p电子的电离能比(b)中的要大,即(a)入射光子能量与4p电子的电离能之差要比(b)的小,而一般情况下光子的能量越是接近电子的电离能电子就越容易被光电离,所以(a)中的曲线比(b)中的高.

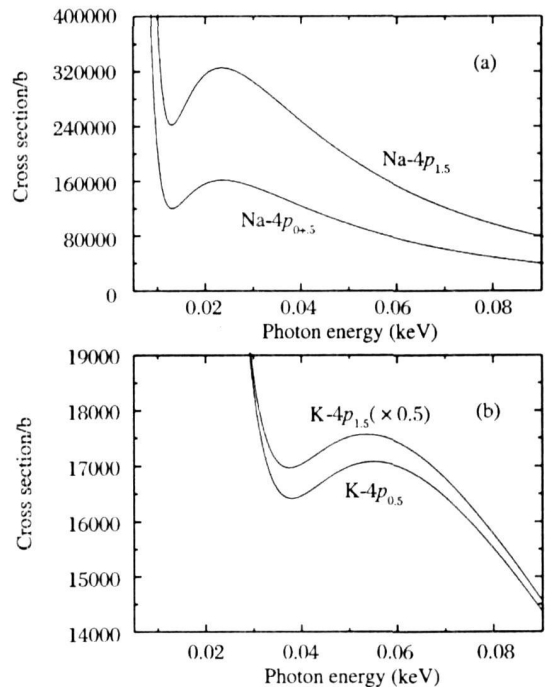


图2 Na和K不同总量子数的4p电子被光电离时电离截面随入射光子能量的变化.为便于比较,对K的4p(j=1.5)电子的截面乘了0.5

Fig. 2 Variation of cross section with photon energy when 4p of Na and K are photoionized for different total angular quantum numbers. For compare, the cross section of 4p (j=1.5) for K multiplied by 0.5, respectively

3.3 主量子数和角量子数对 Cooper 最小位置的影响

由图 3(a)可以看出,主量子数 n 越大,出现 Cooper 最小的入射光子能量就越大,即随主量子数的增大 Cooper 最小的位置向右平移,而且图(b)中的 $4p$ 和 $5p$ 光电离截面曲线的 Cooper 最小位置相对于(a)中的 $4s$ 和 $5s$ 也向右发生了平移.我们认为,这是由于对同一原子的电子,随主量子数以及角量子数的增加,电子的电离能就会减小,从而使 Cooper 最小的位置右移,这与图 2 中的情况完全一样.

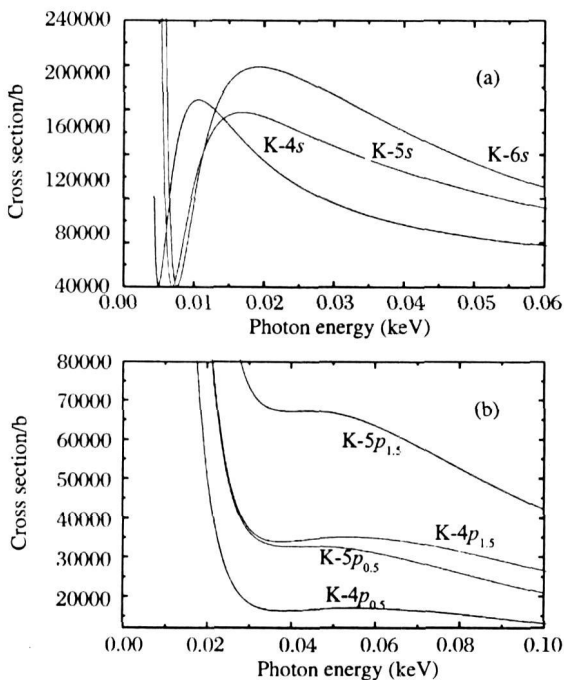


图 3 主量子数和角量子数不同时 K 的最外层电子的光电离截面随入射光子能量的变化

Fig. 3 Variation of cross section with photon energy when the outmost electron of K are photoionized for different principal quantum numbers and angular quantum numbers

4 结 语

本文在相对论框架内研究了较为简单的钠和钾原子最外层电子在入射光子的能量较低时光电离截面与入射光子能量的变化规律及 Cooper 最小的基本特征,分析了影响 Cooper 最小位置的主要因素.研究表明:影响钠和钾原子最外层电子光电离过程中 Cooper 最小位置的主要因素为原子实、主量子数、角量子数以及总量子数等.这些量的变化可影响原子体系中相关电子的平均半

径、电离能(也就是电子所感受到的库仑势场)以及量子态数等的变化,并最终影响到跃迁矩阵元,从而使 Cooper 最小的位置发生各种移动.对于不存在节点的轨道,由于其高度对称性,当电子吸收入射光子的能量而离开原子时,其靠近核方向的运动由于核的影响而变得较为复杂,几乎不可能与远离核方向运动的电子波函数发生干涉相消,从而形不成 Cooper 最小.

参考文献:

- [1] Liu X B, Dong C Z, Ding X B. Relativistic theoretical study on RR (radiative recombination) cross section in electron-ion collision [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2005, 22, 316(in Chinese)[刘晓斌,董晨钟,丁晓彬.电子与离子碰撞过程中辐射复合截面的相对论理论研究[J].原子与分子物理学报,2005,22,316]
- [2] Young S K, Pratt R H. Over of shape resonance and Cooper-minimum structure in photoionization [J]. *Phys. Rev. A*, 1981, 24, 1626
- [3] Chen B Z, Gu J S, Kuang Y, et al. The effects of Cooper minima on the multiphoton ionization spectra of ground state neutral atoms [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2005, 22, 316(in Chinese)[陈炳周,谷建生,旷冶,刘俊超. Cooper 极小值对基态原子多光子电离谱的影响[J].原子与分子物理学报,1999,16,418]
- [4] Shanthi N, Deshmukh P C. Xenon $4p$ photoionization near the $4d$ Cooper minimum; interchannel coupling effects [J]. *Phys. Rev. A*, 1989, 40, 2400
- [5] Masatoshi U, Norihisa T, Yuji C, et al. Optical threshold excitation functions of Xe $5s$, $5p$ photoionization satellites near the $5s^{-1}$ Cooper minimum [J]. *Phys. Rev. A*, 1992, 45, R15
- [6] Lindle D W, Ferrett T A, Heimann P A, et al. Photoemission from Xe in the vicinity of the $4d$ Cooper minimum [J]. *Phys. Rev. A*, 1988, 37, 3080
- [7] Adam M Y, Morin P, Wendin G. Photoelectron satellite spectrum in the region of the $3s$ Cooper minimum of argon [J]. *Phys. Rev. A*, 1985, 31, 1426
- [8] Duncan D I, Boer J D, Muller H G, et al. Above-threshold ionization in K via a Cooper minimum in the continuum [J]. *Phys. Rev. A*, 1997, 56, 4985
- [9] Ichihara A, Shirai T, Eichler J. Radiative electron capture in relativistic atomic collisions [J]. *Phys. Rev. A*, 1994, 49, 1875
- [10] Eichler J, Meyerhof W E. *Relativistic atomic collisions* [M]. San Diego: Academic Press, 1995.
- [11] Stöhlker Th, Kozhuharov C, Mokler P H, et al. Ra-

diative electron capture studied in relativistic heavy-ion-atom collisions [J]. *Phys. Rev. A*, 1995, 51: 2098

[12] Li J M, Zhao Z X. Variation in L, M, N inner-shell electron binding energies of rare-earth elements in va-

lence 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]