

# Sm 和 U 原子光电离截面的模型势计算

史桂珍 周大凡

(中国科学院长春应用化学研究所)

罗 军\* 潘守甫

(吉林大学 原子与分子物理研究所, 长春)

## 提 要

本文给出了使用四种不同形式的势对 Sm 基态光学电子所属壳层光电离截面计算的结果, 同时给出了 U 原子三个激发态参量形式的极化修正模型势光电离截面的计算结果。我们的结果与其他作者使用相同形式的势计算的结果较好地符合。使用参数形式的极化模型势计算光电离截面是一种有效的方法。  
关键词: 光电离截面, 模型势、波函数。

## 一、引 言

光电离截面在光学与光谱学、在激光物理与激光化学、在原子与分子物理、天体物理、等离子体物理等领域具有重要的意义。

单粒子近似下的中心势方法主要基于 HF 势和 HFS 势, 未考虑粒子间的相关作用及忽略了电子电离后残余束缚电子的“弛豫效应”, 适合要求大量的截面数据的场合。使用这种方法计算的光电离截面在电离阈值附近、特别是对于重原子与实验数据有一定的差异, 这是由于电子相关作用在电离阈值附近效应显著。我们知道, HF 近似只考虑了电子间交换作用这一量子效应, 其它相关效应均未考虑, 它对闭壳的原子实是用球对称组态处理的, 忽略了价电子对原子实的极化效应。然而通过一定的光谱数据, 用带有经验参数的模型势来拟合这种极化效应, 在计算碱金属原子价电子跃迁的振子强度<sup>[1]</sup>和光电离截面<sup>[2]</sup>时取得了与实验测量值一致性较好的结果。这种参数形式的模型势可以部分反映价电子与原子实的相关作用。一旦确定了这种模型势中的经验参数, 就能在一个比较大的能量范围内计算价电子跃迁的振子强度及光电离截面。因为镧系元素与锕系元素在结构和性质上很相似, 可以采用相同的物理图象来处理, 所以我们以 Sm 和 U 原子为例说明我们的计算方法。本文采用带有经验参数并且附加有极化势修正的模型势对价电子的单电子轨道(束缚态及连续态)进行了处理, 从而求得了原子吸收单光子, 发生单电子跃迁过程中 Sm 基态入射光子能量在 0~1500 eV 范围内和 U 原子的  $5f^3 7s^2 7p^5 K_6$ 、 $5f^3 6d 7s 7p^7 L_8$  和  $5f^4 7s 7p^7 K_8^0$  三个激发态入射光子能量在 3.21 eV~12.00 eV 范围内光学电子被电离的光电离截面值; 同时给出了 Sm 原子基态的未考虑极化势修正的 HFS 势、 $\alpha_s$  势及 Cooper 定义的中心势<sup>[3]</sup>计算的

结果。并对这几种形式的势计算的结果进行了比较,同时给出了其他作者用相同形式的势计算的结果<sup>[4]</sup>

## 二、理论方法

对于原子的价电子跃迁, Hameed<sup>[5]</sup>使用定态微扰理论将原子实的极化畸变对价电子偶极跃迁的影响用一带有极化修正的等效偶极矩算符来代替原来的偶极矩算符,原子实的极化对价电子轨道的影响用带有极化势修正的单电子模型势作为价电子运动的势场,从而原子的价电子跃迁可简化为一个单电子跃迁的问题。

对于原子实中的电子采用“绝热”近似,它们的坐标用  $\mathbf{r}_i (i=1, 2, \dots, N; N$  为原子实的电子总数)。价电子坐标用  $\mathbf{r}$  表示,类似于 Born-Oppenheimer 近似。原子实的本征函数为  $x_0(\mathbf{r}_i|\mathbf{r})$ ,价电子本征函数为  $\psi_{nl}(\mathbf{r})$ ,原子波函数可写成下列参数形式

$$\Phi_{nl}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}) = x_0(\mathbf{r}_i|\mathbf{r})\psi_{nl}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

式中  $x_0(\mathbf{r}_i|\mathbf{r})$  是实的反对称化波函数。

本文除特殊声明外,能量采用里德堡单位。其它物理量均采用原子单位。

束缚态价电子波函数的径向部分满足下列方程

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - 2V(r) + E_{nl} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] P_{nl}(r) = 0, \quad (2)$$

式中,  $E_{nl} < 0$ 。

连续态价电子波函数的径向部分满足下列方程

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - 2V(r) + \epsilon - \frac{l'(l'+1)}{r^2} \right] P_{\epsilon, l'}(r) = 0, \quad (3)$$

式中,  $\epsilon > 0$ ,  $l' = l \pm 1$  (选择定则)。

假定在电子被电离前后价电子所受的势场完全相同,方程(2)和(3)中的势  $V(r)$  具有相同的形式。若原子核电荷为  $Z$ ,势  $V(r)$  具有下列形式

$$V(r) = -\frac{Z}{r} + \sum_i \left\langle x_0(\mathbf{r}_i|\infty) \left| \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}|} \right| x_0(\mathbf{r}_i|\infty) \right\rangle + V_1(r) = V_c(r) + V_1(r). \quad (4)$$

式中,  $V_c(r)$  是原子核及原子实所产生的势场,  $V_1(r)$  是原子实被极化而产生的极化势。 $V_1(r)$  采用下列形式

$$V_1(r) = -\frac{1}{2} \alpha_s r^{-4} \left\{ 1 - \exp \left[ -\left( \frac{r}{r_1} \right)^6 \right] \right\} - \frac{1}{2} \lambda r^{-8} \left\{ 1 - \exp \left[ -\left( \frac{r}{r_1} \right)^8 \right] \right\} + (c_1 + c_2 r) \exp \left( -\frac{r}{r_0} \right). \quad (5)$$

这里,  $\alpha_s$  为原子实的电偶极化率,非线性参数  $r_0$  及  $r_1$  由开始算确定,线性参数  $\lambda$ ,  $c_1$  和  $c_2$  是经验参数,由原子光谱确定。

我们用这种方法对卤族元素和惰性气体元素进行了计算,获得的结果与实验结果相符(关于这几种元素的计算结果将在另一文中发表)。

对于多电子原子镧系 Sm 和铀系 U,束缚态光学电子的径向函数及连续态光学电子的

径向函数分别满足方程(2)和(3),但是,  $V(r)$  采用下列形式<sup>[6]</sup>

$$V(r) = -\frac{Z}{r} + \frac{1}{r} \int_0^r \rho_1(r_1) dr_1 + \int_r^\infty \frac{\rho_1(r_1)}{r_1} dr_1 + V_{\infty}(r) + V_{pol}(r), \quad (6)$$

式中

$$V_{\infty}(r) = -\frac{1}{r} \left[ \frac{6r \rho_2(r)}{\pi^3} \right]^{1/3} F(r), \quad F(r) = \frac{1}{2} e^{-r/r_1}, \quad (7)$$

(7)式中,  $r_1$  为经验参数。在本文中,我们调整  $r_1$ ,使每一  $|SLJ\rangle$  态有与实验相一致的电离能,这样,  $S$ 、 $L$  相同,  $J$  值不同的原子能级,由于实验电离能不同,光电离截面也不同,从而使超精细结构也部分地被考虑在内;其中的

$$\rho_1(r) = \rho(r) - \rho_e(r), \quad \rho_2(r) = \rho(r) - [\min(\omega, z)] \rho_e(r),$$

这里,  $\rho(r)$  为原子的电荷密度,  $\rho_e(r)$  为价电子电荷密度,它们由 MCHF 程序<sup>[7]</sup>确定,  $\omega$  为光学电子所属  $n\rho$  壳层等价电子的数目;价电子与原子实的相关-极化修正模型势为<sup>[6]</sup>

$$V_{pol}(r) = -\frac{1}{2} \alpha_d r^2 / (r_0^2 + r^2)^3. \quad (8)$$

式中,  $\alpha_d$  为原子实的电偶极极化率,  $r_0$  为原子实最外壳层轨道平均半径。

对于 Sm 和 U 原子,单电子偶极跃迁算符与碱金属原子和卤族及惰性气体原子的不同,应修改成

$$Q = -r [1 - \alpha_d (r^2 + r_0^2)^{-3/2}]. \quad (9)$$

计算光电离截面采用下面的公式<sup>[4]</sup>

$$\sigma_{nl}(h\nu) = \frac{4\pi^2 \alpha a_0^2}{3} \frac{N_{nl}}{2l+1} h\nu [lR_{l-1}^2 + (l+1)R_{l+1}^2]. \quad (10)$$

式中,  $\alpha$  为精细结构常数,  $a_0$  为玻尔半径,  $N_{nl}$  为  $nl$  壳层中电子的占居数,  $h\nu$  是入射光子的能量,  $R_{l\pm 1}$  为初态(束缚态)与末态(连续态)之间单电子跃迁径向矩阵元,其具体形式如下

$$R_{l\pm 1} = \int_0^\infty P_{nl}(r) Q P_{e,l\pm 1}(r) dr, \quad (11)$$

这里,  $P_{nl}(r)$  和  $P_{e,l\pm 1}(r)$  分别满足方程(2)和(3),  $Q$  是偶极跃迁算符  $Q$  的径向部分。

束缚态单电子径向函数按下列形式归一

$$\int_0^\infty P_{nl}^2(r) dr = 1. \quad (12)$$

连续态单电子径向函数按下列形式归一<sup>[3]</sup>

$$P_{e,\nu}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \pi^{-1/2} \epsilon^{-1/4} \sin \left[ \epsilon^{1/2} r - \frac{l'\pi}{2} - Z_c \epsilon^{-1/2} \ln 2\epsilon^{1/2} r + \delta_{l'} \right]. \quad (13)$$

式中,  $Z_c = -(Z - N' + 1)$ ,  $N'$  为核外电子总数,  $\delta_{l'}$  是与  $r$  无关的常数相移,这里忽略了由于极化势产生的附加相移(由此引起的误差是小的)。

### 三、结果与讨论

表 1 给出了用四种形式的势计算的 Sm 原子处于基态光学电子被电离的光电离截面值, Sm 的第一电离势的计算值为 5.64373 eV, 实验值为  $5.6437 \pm 0.001$  eV<sup>[8]</sup>; 表 2 给出了 U 原子三个激发态:  $5f^3 7s^2 7p \ ^5K_6$ 、 $5f^3 6d 7s 7p \ ^7L_6$  和  $5f^4 7s 7p \ ^7K_6^0$  的极化模型势光电离截

Table 1 Photoionization cross sections of the outermost subshell for ground-state Samarium (in Mb)

$\frac{\sigma_{6s}}{h\nu} - E(\text{eV})$	4.80376 <sup>a</sup>	4.8 <sup>b</sup>	4.13127 <sup>c</sup>	4.60742 <sup>d</sup>	5.64373 <sup>e</sup>
5.650			0.4164E-1		0.8474E-1
5.675			0.3926E-1		0.7501E-1
5.700			0.3699E-1		0.6559E-1
5.725			0.3482E-1		0.5766E-1
5.750			0.3274E-1		0.4999E-1
5.775			0.3076E-1		0.4295E-1
5.800			0.2887E-1		0.3654E-1
5.825			0.2707E-1		0.3071E-1
5.850			0.2535E-1		0.2546E-1
5.875			0.2371E-1		0.2076E-1
5.900			0.2215E-1		0.1659E-1
5.925			0.2067E-1		0.1293E-1
5.950			0.1926E-1		0.9768E-2
5.975			0.1792E-1		0.7079E-1
6.000			0.1664E-1		0.4849E-2
6.025			0.1543E-1		0.3060E-2
6.050			0.1429E-1		0.1695E-2
6.150			0.1028E-1		0.1851E-3
6.250			0.7108E-2		0.4315E-2
6.300			0.5796E-2		0.8240E-2
6.400			0.3657E-2		0.1935E-1
6.500			0.2087E-2		0.3428E-1
7.100			0.7597E-3		0.1763E+0
10.20	0.2246E-1	0.2000E-1	0.3556E-1	0.1255E+0	0.1019E+1
16.70	0.8024E-1	0.7700E-1	0.5367E-1	0.1259E+0	0.1533E+1
21.20	0.8646E-1	0.8900E-1	0.5150E-1	0.1051E+0	0.1492E+1
26.80	0.8329E-1	0.8000E-1	0.4722E-1	0.8353E-1	0.1338E+1
40.80	0.6444E-1	0.6200E-1	0.3811E-1	0.5177E-1	0.9334E+0
80.00	0.3008E-1	0.3100E-1	0.2150E-1	0.2206E-1	0.3301E+0
132.3	0.1561E-1	0.1400E-1	0.1081E-1	0.1042E-1	0.8981E-1
151.4	0.1299E-1	0.1300E-1	0.8864E-2	0.8366E-2	0.5594E-1
200.0	0.8630E-2	0.9200E-2	0.5911E-2	0.5330E-2	0.1558E-1
300.0	0.4574E-2	0.4990E-2	0.3242E-2	0.2969E-2	0.1222E-3
600.0	0.1516E-2	0.1600E-2	0.1073E-2	0.1050E-2	0.4353E-2
800.0	0.9383E-3	0.8100E-3	0.6634E-3	0.6472E-3	0.4763E-2
1041.0	0.6069E-3	0.5400E-3	0.4290E-3	0.3702E-3	0.4205E-2
1253.6	0.4351E-3	0.3900E-3	0.3078E-3	0.2670E-3	0.3484E-2
1486.6	0.3266E-3	0.2900E-3	0.2321E-3	0.2040E-3	0.2876E-2

a. Results are calculated with the HFS potential.

b. Results are calculated by Yeh and Lindau<sup>[4]</sup>.

c. Results are calculated with  $X_{\alpha}$  potential ( $\alpha=0.6965$ ).

d. Results are calculated with Cooper's model potential.

e. Results are calculated with corrected polarization model potential

(the first ionization potential of Sm is  $5.6437 \pm 0.0010$  eV)

面计算值,这三个激发态的电离能计算值依次分别为 4.14762、4.04153 和 3.20943 eV,实验值依次分别为 4.14761、4.04147 和 3.20966 eV(从能级数据<sup>[11]</sup>得到);表 3 给出了计算 U 原子这三个激发态的初态波函数时所需要的  $F^k$  和  $G^k$  积分系数值;表 4 给出了 Sm 和 U 的有关参数。

Table 2 Photoionization cross sections for UI  $5f_37s^27p^5K_6$ ,  $5f^36d7s7p^7L_6$  and  $5f^47s7p^7K_5^0$  (in Mb)

$\sigma_{nl}$	config. and term	$5f^37s^27p$	$5f^36d7s7p$	$5f^47s7p$
		$5K_6$	$7L_6$	$7K_5^0$
$h\nu$ (eV)				
3.21				0.2335E+2
3.25				0.2265E+2
3.50				0.1879E+2
3.75				0.1573E+2
4.00				0.1327E+2
4.05			0.1688E+2	0.1284E+2
4.15	0.1931E+2	0.1566E+2		0.1202E+2
4.25	0.1799E+2	0.1455E+2		0.1128E+2
4.50	0.1515E+2	0.1219E+2		0.9639E+1
4.75	0.1285E+2	0.1028E+2		0.8282E+1
5.00	0.1097E+2	0.8732E+1		0.7150E+1
5.25	0.9413E+1	0.7461E+1		0.6200E+1
5.50	0.8123E+1	0.6409E+1		0.5396E+1
5.75	0.7042E+1	0.5533E+1		0.4713E+1
6.00	0.6131E+1	0.4798E+1		0.4131E+1
6.25	0.5360E+1	0.4179E+1		0.3631E+1
6.50	0.4703E+1	0.3653E+1		0.3201E+1
6.75	0.4140E+1	0.3206E+1		0.2829E+1
7.00	0.3657E+1	0.2823E+1		0.2506E+1
7.25	0.3240E+1	0.2494E+1		0.2226E+1
7.50	0.2880E+1	0.2211E+1		0.1981E+1
7.75	0.2567E+1	0.1966E+1		0.1767E+1
8.00	0.2294E+1	0.1754E+1		0.1579E+1
8.25	0.2056E+1	0.1570E+1		0.1414E+1
8.50	0.1848E+1	0.1409E+1		0.1269E+1
8.75	0.1666E+1	0.1269E+1		0.1142E+1
9.00	0.1506E+1	0.1146E+1		0.1029E+1
9.25	0.1365E+1	0.1039E+1		0.9294E+0
9.50	0.1241E+1	0.9452E+0		0.8413E+0
9.75	0.1131E+1	0.8626E+0		0.7634E+0
10.00	0.1034E+1	0.7901E+0		0.6943E+0
10.25	0.9488E+0	0.7264E+0		0.6331E+0
10.50	0.8732E+0	0.6703E+0		0.5787E+0
10.75	0.8062E+0	0.6210E+0		0.5305E+0
11.00	0.7469E+0	0.5775E+0		0.4877E+0
11.25	0.6944E+0	0.5393E+0		0.4497E+0
11.50	0.6480E+0	0.5057E+0		0.4160E+0
11.75	0.6068E+0	0.4761E+0		0.3862E+0
12.00	0.5704E+0	0.4502E+0		0.3597E+0

由表 1 可见: 其中使用 HFS 势计算的结果与 Yeh 和 Lindau 使用相同的势计算的结果<sup>[4]</sup>较好地一致; 当入射光子能量大于 10.2 eV 时, 前四种形式的势计算的结果趋于一致。但是在电离阈值附近, 不同形式的势计算的结果有较大的差异, 这说明了当用不同形式的定域势描写价电子所受的势场时, 不同程度近似地反映了价电子实际所受的势场; 同时说明当入射光子能量大到一定值时, 在不同的势函数条件下, 光电离截面值较一致, 这体现了在高能作用下, 电子间的相关作用对光电离截面影响不大。而在电离阈值附近光电离截面对势场是敏感的, 这体现了在此附近电子间的相关作用对光电离截面有很大的影响。使用极化修正的模型势计算的光电离截面值在入射光子能量较大处下降趋势比用另外几种形式的势计算的结果下降趋势慢, 前者比后者大一个数量级。但是, 使用极化修正的模型势, 根据实验参数进行拟合来调整模型势中的经验参量, 这已经部分地考虑了粒子间的相关作用。所以在有一定数量的光谱数据的情况下, 尤其是在阈值附近(粒子间相关作用较强), 用参数拟合

Table 3 The Slater integral coefficients in expression of energy

config.	term	coeff. of $F^k$	coeff. of $G^k$
$5f^3 7s^2 7p$	$5K$	$f^2(ff)=-0.324320$	$g^2(fp)=-0.402857$
		$f^4(ff)=-0.210901$	$g^4(fp)=0.042328$
		$f^6(ff)=-0.096421$	
		$f^2(fp)=0.026667$	
$5f^3 6d 7s 7p$	$7L$	$f^2(ff)=-0.324320$	$g^1(fd)=-0.471429$
		$f^4(ff)=-0.210901$	$g^3(fd)=-0.114286$
		$f^6(ff)=-0.096421$	$g^5(fd)=-0.051161$
		$f^2(fd)=0.038095$	$g^3(fs)=-0.214286$
		$f^4(fd)=-0.004329$	$g^2(fp)=-0.042857$
		$f^2(fp)=-0.066667$	$g^4(fp)=-0.105820$
		$f^2(dp)=-0.200000$	$g^2(ds)=-0.100000$
			$g^1(sp)=-0.166667$
			$g^1(dp)=0.266667$
			$g^3(dp)=-0.042857$
$5f^4 7s 7p$	$7K^0$	$f^2(ff)=-0.396115$	$g^2(fp)=-0.411429$
		$f^4(ff)=-0.259852$	$g^4(fp)=0.021164$
		$f^6(ff)=-0.159179$	$g^3(fs)=-0.285714$
		$f^2(fp)=-0.026667$	$g^1(sp)=-0.166667$

Table 4 Samarium and uranium core electric dipole polarizability  $\alpha_d$  and the adjustable parameters  $r_1$  (in atomic units)

atom	term	$\alpha_d$	$r_1$
Sm	$7F_0$	15.31935	3.05690
	$5K_6$	24.63144	3.59480
U	$7L_6$	24.63144	5.56829
	$7K_5^0$	24.63144	2.67029

和带有相关极化修正的模型势方法计算光电离截面,比其它复杂的理论方法用的机时少,而且模型同样合理;使用这种方法计算光电离截面是一种非常有效的方法。(本文中用作参考数据的 U 原子第一电离势实验值为  $6.1941 \pm 0.0005 \text{ eV}^{[9,10]}$ 。)

### 参 考 文 献

- [1] J. C. Weisheit, A. Dalgarno; *Chem. Phys. Lett.*, 1971, **9**, No. 6(Jun), 517~520.
- [2] J. C. Weisheit; *Phys. Rev., A*, 1972, **5**, No. 4 (Apr), 1621~1630.
- [3] J. W. Cooper; *Phys. Rev.*, 1962, **128**, No. 2 (Oct), 681~693.
- [4] J. J. Yeh, I. Lindau; *Atom. Data and Nucl. Data Tables*, 1985, **32**, No. 1 (Jan), 1~10.
- [5] S. Hameed, A. Herzenberg *et al.*; *J. Phys. B.*, 1968, **1**, No. 5 (Sep), 822~830.
- [6] J. Migdalek, R. Marcinek; *JQSRT.*, 1984, **32**, No. 4 (Oct), 269~277.
- [7] C. F. Fischer; *Comp. Phys. Comm.*, 1978, No. 14, 145~153.
- [8] W. C. Martin, R. Zalubas *et al.*; *NBSDS-NBS 60*, (U. S. Government Printing Office, Washington, 1978), 32.
- [9] R. W. Solarz, C. A. May; *Phys. Rev., A*, 1976, **14**, No. 3 (Sep), 1129~1136.
- [10] A. Coste, R. Avril; *J. O. S. A.*, 1982, **72**, No. 1 (Jan), 103~109.
- [11] J. Blaise, L. J. Radziemski, Jr.; *J. O. S. A.*, 1976, **66**, No. 7 (Jul), 644~659.

## Model potential calculations of photoionization cross sections for Sm and U

SHI GUIZHEN AND ZHOU DAFAN

*(Changchun Institute of Applied Chemistry, Academia Sinica)*

LUO JUN AND PAN SHOUFU

*(Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun)*

(Received 13 October 1989; revised 6 March 1990)

### Abstract

This paper presents the calculated results of photoionization cross sections of the outer-most subshell for ground-state Sm using four kinds of potential and for three excited states U with the parameterized model potential of included polarization correction. These results are comparable to the ones calculated by other authors. It is shown that the parameterized model potential method of included polarization correction is effective to calculate photoionization cross sections.

**Key words:** photoionization cross section; model potential; wave function.