ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИОНИЗАЦИИ ОРБИТАЛЬНО- ПОЛЯРИЗОВАННЫХ АТОМОВ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ С ТРЁХМЕРНЫМИ ИЗОБРАЖЕНИЯМИ РЕЗУЛЬТАТОВ

И.Ю. Юрова, И.Д.Бориспольский

Санкт-Петербургский государственный университет,
Научно-исследовательский институт физики,
ул. Ульяновская, 1, Петергоф, Санкт-Петербург, 198504, Россия
e-mail: inna.yurova@IJ15700.spb.edu , Igorische22@rambler.ru

Исследуется ионизация атомов с фиксированной проекцией орбитального момента m на выделенную ось (орбитальная поляризация) электронным ударом. Для амплитуды ионизации в первом борновском приближении с борн-кулоновским матричным элементом получены аналитические выражения для $2p_m$ и $3p_m$, $m = 0,\pm1$, начальных состояний атомного электрона. Результаты вычислений двойных дифференциальных сечений представлены в виде трёхмерных изображений. Рассмотрен пример ионизации p-возбужденных атомов Na и Li.

Исследования ионизации газов электронным ударом занимают неотъемлемую часть физики атмосферы и плазмы [1]. Распределения вторичных электронов при ионизации изучались неоднократно экспериментально [2] и теоретически [3]. Особое внимание последнее время уделяют так называемому дихроизму при ионизации, заключающемуся в различии угловых распределений электронов для различных значений проекций m орбитального момента l атома в начальном состоянии [4]. Возможность получать атомы в подобных состояниях достигается путём облучения исследуемых атомов лазером с определённой длиной волны и поляризацией [5].

Как известно, количественной величиной, позволяющей охарактеризовать процесс ионизации, является сечение ионизации: полное сечение $\sigma_{tot}(E_0)$ и различные дифференциальные сечения, например, двойные: $\mathrm{DDCSE1} = d^2\sigma/d\Omega_1/d\Omega_2$, $\mathrm{DDCS1} = d^2\sigma/d\Omega_1/de_2$, $\mathrm{DDCS2} = d^2\sigma/d\Omega_2/de_2$ и тройное $\mathrm{TDCS} = d^3\sigma/d\Omega_1/d\Omega_2/de_2$. Для исследования дихроизма при ионизации мы выбрали двойное дифференциальное сечение DDCS2, проинтегрированное по углам рассеяния налетающих (первичных) электронов. Данный выбор сечения основан на доступности экспериментального исследования DDCS2, проводившегося еще с начала 1970-х гг. [2, 6]. Не смотря на то, что в настоящее время явление дихроизма при ионизации орбитально-поляризованных атомов электронным ударом наблюдалось только в TDCS [4], в настоящей работе показано, что явление дихроизма можно наблюдать и в DDCS2. Кроме того, результаты расчёта DDCS2 можно наглядно представить в виде объёмных изображений сечений ионизации и их разрезов, как это сделано в данной работе.

Дифференциальные сечения ионизации зависят от энергии и углов рассеяния налетающего электрона, а также от энергии и углов вылета вторичного электрона:

$E_0, \grave{e}_1, \varphi_1, e2\grave{e}_2, \varphi_2$. Если же мы исследуем зависимость сечения ионизации от квантового магнитного числа m, характеризующего начальное состояние ионизируемого атома, необходимо ввести в рассмотрение ещё один параметр – угол, фиксирующий направление оси квантования орбитального момента. Например, это может быть угол ω между осью квантования (QA) и направлением пучка первичных электронов. В качестве метода теоретического исследования ионизации было выбрано первое борновское приближение с борн-кулоновским матричным элементом (FBA). Такой выбор неизбежно ограничивает снизу энергию налетающего электрона от 90-100 эВ, а энергию вторичного электрона сверху (не более 20-30 эВ) [7]. Преимуществом FBA является простота вычисления полного сечения и возможность аналитического вычисления матричных элементов. Тройное дифференциальное сечение, следуя работе [8], в рамках FBA задаётся следующей формулой (здесь и далее используются атомные единицы):

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 de_2} = \frac{4kk_1}{k_0 q^4} \left| M_{bc}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \omega) \right|^2, \quad (1)$$

где $M_{bc}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \omega) = \left\langle \mathbf{k}_{\text{ort}} \left| exp(i\mathbf{qr}) \right| nlm \right\rangle$ – борн-кулоновский матричный элемент. Матричный элемент зависит от $\mathbf{k}$ – импульса вторичного электрона, от переданного импульса $\mathbf{q} = \mathbf{k_0} - \mathbf{k_1}$, равного разности импульсов налетающего электрона до ($\mathbf{k_0}$) и после ($\mathbf{k_1}$) рассеяния. Кроме того, матричный элемент зависит от ориентации Z_{int} – оси z атомной системы A_{int}, на которую проектируется орбитальный момент атома. В матричном элементе кулоновская ортогонализованная волновая функция $\left| \mathbf{k}_{\text{ort}} \right\rangle$ равна [9]:

$$\left| \mathbf{k}_{\text{ort}} \right\rangle = \left| \mathbf{k} \right\rangle - \left\langle nlm \middle| \mathbf{k} \right\rangle \cdot \left| nlm \right\rangle. \quad (2)$$

$\left| \mathbf{k} \right\rangle$ –это кулоновская функция с единичным зарядом:

$$\Psi_k^{(-)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\cdot\pi)^{3/2}} \cdot e^{\frac{\pi}{2k}} \cdot \Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} {}_1F_1\left(-\frac{i}{k}, 1, -ik\cdot r - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right) \quad (3)$$

В формуле (2) $\left| nlm \right\rangle$ – функция атомного электрона в начальном состоянии.

Впервые аналитическое выражение для сечения (1) в случае 1s ионизации было получено в работе [10]. Данное вычисление не требовало введения оси квантования QA ввиду симметрии состояния 1s. Введение данной оси также не потребуется, если рассчитывать полные сечения для любых начальных состояний [11,12]. В этих работах ось квантования QA направлена вдоль вектора $\mathbf{k}$ - момента импульса вторичного электрона.

Для вычисления угловых зависимостей сечений ионизации для начальных состояний с $m \neq 0$ необходимо ввести в рассмотрение лабораторную систему координат и фиксировать в ней направление оси квантования. При этом возникает необходимость вычисления $M_{bc}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \omega)$ с произвольно направленной QA (не вдоль $\mathbf{k}$, как это было сделано в [9,12]). Попытки введения оси квантования в теории ионизации уже были сделаны [13,14], но численных результатов в этих работах не было получено. На данный момент нам известна одна работа [4] с численными результатами, подтверждающая проявление дихроизма в ионизации в частном случае направления QA. В работе [4] теоретически и экспериментально исследовалась TDCS ионизации $3p_{\pm 1}$ возбуждённого атома Na.

В качестве волновой функции $|nlm\rangle$ мы использовали водородоподобную функцию с эффективным зарядом Z_{eff}, который вычисляли по формуле: $Z_{eff} = \frac{3n^2 - l(l+1)}{\bar{r}_{nl}}$, где n – главное квантовое число. Значение среднего радиуса $\bar{r}_{nl}$ начального атомного состояния вычислялось с более точной, чем водородоподобная, волновой функцией: $\bar{r}_{nl} = \langle nl^{pres}|r|nl^{pres}\rangle$, которая находилась как численное решение уравнения Шредингера с эффективным потенциалом [15]. Мы использовали следующие значения:
$\bar{r}_{Na(3p)} = 5.76a_0$, $Z_{eff}(Na(3p)) = 2.17$.

Несмотря на простоту водородоподобной функции, полученные с ней результаты довольно точны: проверка точности производилась сравнением результатов для полного сечения ионизации атома кислорода при $E_0 = 100ev$, рассчитанного с функциями Клементи-Роетти. Это было отмечено в [9] и подтверждено в данной работе.

Для того, чтобы вычислить матричный элемент из (1) с произвольно направленной осью квантования QA, мы воспользовались свойством преобразования угловой части одноэлектронной волновой функции атомного электрона, которая представляет собой сферическую функцию $Y_{lm}(\theta,\varphi)$, при повороте системы координат:

$$Y^{lab}_{lm}(\theta_{lab},\varphi_{lab}) = \sum_{m'=-l}^{l} D^{l}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)Y_{lm'}(\theta,\varphi) \qquad (4).$$

Функция $D^{l}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ представляет собой функцию Вигнера, зависящую от углов Эйлера α,β,γ, переводящих атомную систему координат X_a, Y_a, Z_a в лабораторную $X_{lab}, Y_{lab}, Z_{lab}$. Ось Z_a атомной системы координат направлена вдоль вектора **k**, ось X_a лежит в плоскости, задаваемой векторами **k** и **q**. Ось Z_{lab} лабораторной системы координат направлена вдоль $\mathbf{k_0}$ – вектора импульса первичного электрона, ось X_{lab} принадлежит плоскости, заданной векторами $\mathbf{k_0}$ и **o**, где **o** – единичный вектор, направленный вдоль оси квантования. Нами были вычислены углы Эйлера:

$$\cos(\alpha) = \frac{(\mathbf{q},\mathbf{o}) - (\mathbf{k},\mathbf{q})(\mathbf{k},\mathbf{o})}{\sin(\Psi)\sin(\Phi)},$$

$$\cos(\beta) = \frac{(\mathbf{k},\mathbf{o})}{k}, \qquad (5)$$

где Ψ - угол между векторами **k** и **q**, Φ - угол между векторами **k** и **o**. Угол γ для расчётов не потребовался, знак $sin(\alpha)$ определяется из выражения

$$sign(\sin(\alpha)) = sign((\mathbf{o},[\mathbf{k},\mathbf{q}])). \qquad (6)$$

Таким образом, DDCS2 рассчитывалось нами с матричным элементом $M_{bc}(\mathbf{q},\mathbf{k},\omega)$, в котором угловая зависимость водородоподобной функции определялась выражением (4) (см. Приложение).

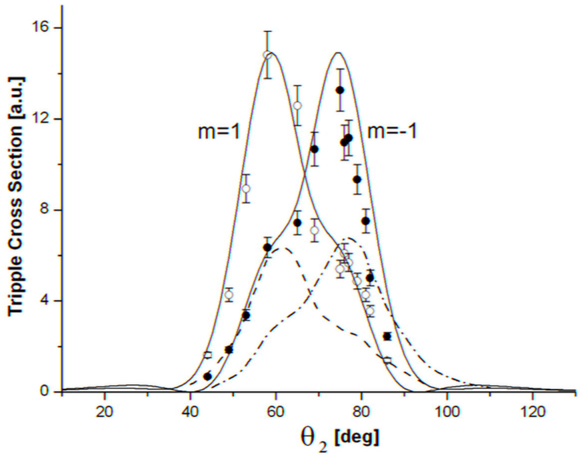

Рис.1 Сравнение рассчитанных $d^2\sigma / d\grave{U}2/ de_2$ для 3p-возбуждённого атома Na с работой [4]: $\omega = 90^0, E_0 = 150\,\mathrm{eV},\; e2 = 20\,\mathrm{eV}, \theta_1 = 20^0,$ $\varphi_1 = 90^0, \varphi_2 = 270^0$ Сплошные линии – наши результаты, пунктир – расчёты [4], черные и белые кружки – эксперимент [4], нормированный на наши результаты для m=-1 и m=1 соответственно.

Для сравнения с [4] нами было рассчитано TDCS ионизации 3p-возбуждённого атома Na для $m = 0,\pm 1$ (рис. 1). Экспериментальные данные нормированы на результаты настоящей работы, сечение для m=0 равно 0 в силу геометрии эксперимента. Для обнаружения дихроизма при ионизации результаты расчётов DDCS2 представлены на рис. 2, 3 в виде трёхмерных изображений и на рис.4, 5 в виде их разрезов в плоскости, перпендикулярной оси квантования. Расчёты показали, что наиболее существенная разница сечений для m=1 и m=-1 наблюдается при $\omega = 90^0$. Как видно из рис.4, дихроизм более значителен при меньших энергиях первичного электрона. В качестве примера была рассмотрена ионизация 2p-возбуждённого атома Li с $Z_{eff}(Li(2p)) = 1.08$. Результаты расчётов DDCS2 представлены на рис. 6,7 в виде трёхмерных изображений и на рис.8 в виде их разрезов в плоскости, перпендикулярной оси квантования.

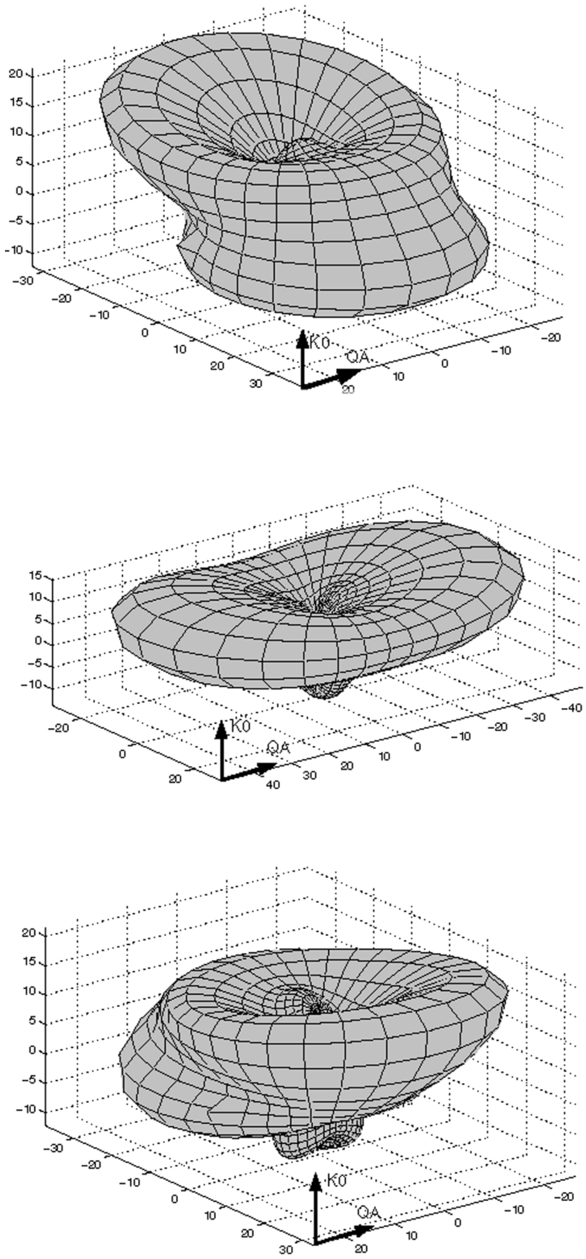

Рис. 2 Трёхмерное изображение $d^2\sigma / d\grave{U}2/ de_2 (10^{-19} cm^2 ster^{-1} ev^{-1})$ для 3p-возбуждённого атома Na.
$0^0 < \theta_2 < 180^0, 0^0 < \varphi_2 < 360^0,$
$\omega = 90^0, E_0 = 150 ev, e2 = 3 ev.$
m=1, m=0, m=- сверху вниз соответственно.

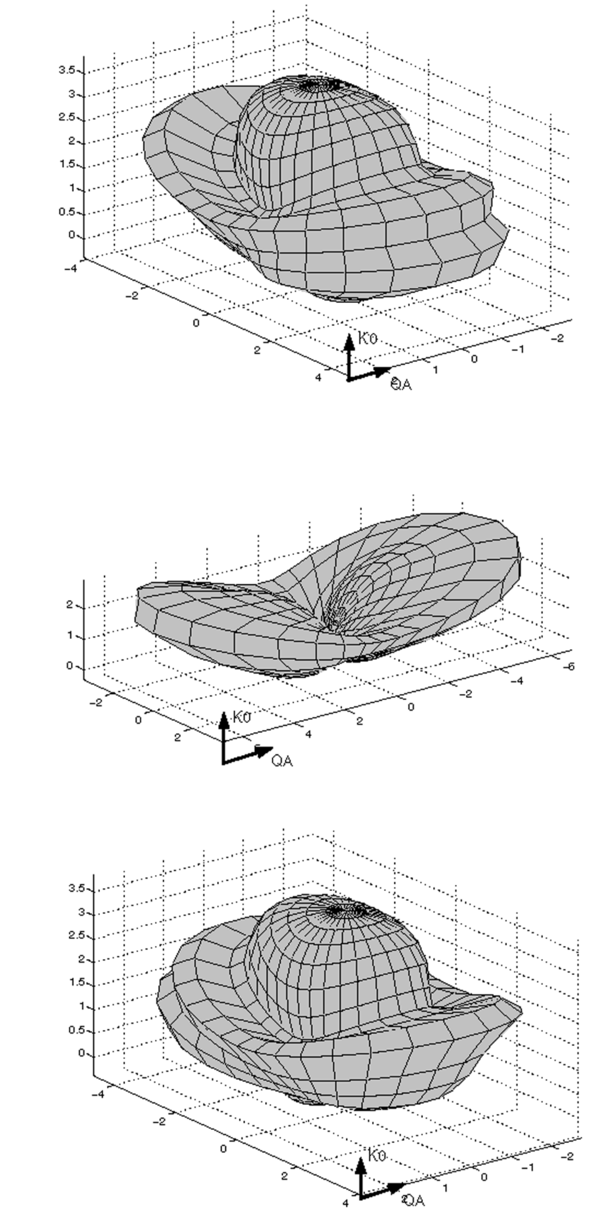

Рис. 3 Трёхмерное изображение $d^2\sigma / d\grave{U}2/ de_2 (10^{-19} cm^2 ster^{-1} ev^{-1})$ для 3р-возбуждённого атома Na. $0^0 < \theta_2 < 180^0, 0^0 < \varphi_2 < 360^0$, $\omega = 90^0, E_0 = 150ev, e2 = 20ev$.

m=1, *m*=0, *m*=- сверху вниз соответственно.

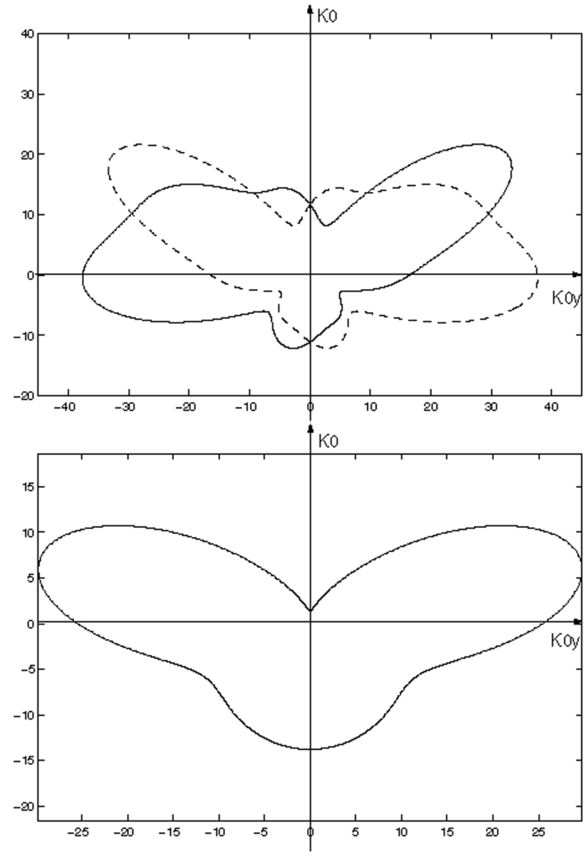

Рис. 4 Разрез трёхмерного изображения $d^2\sigma / d\grave{U}2/ de_2 (10^{-19} cm^2 ster^{-1} ev^{-1})$ для 3р-возбуждённого атома Na в плоскости, перпендикулярной QA. $\omega = 90^0, E_0 = 150ev, e2 = 3ev$. Сплошная линия: *m*=-1, пунктир: *m*=1 Нижний график для *m*=0.

Критерием достоверности наших расчётов может служить график сравнения с результатами [4] на рис.1. Кроме того, в рамках данной работы было рассчитано полное сечение, усреднённое по *m,* и оно было сравнено с [16]. Результаты сравнения оказались удовлетворительными. Таким образом, в настоящей работе предложен метод, позволяющий изучать явление дихроизма в DDCS и в TDCS на примере трёхмерных изображений сечений, при этом матричный элемент $M_{bc}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \omega)$ вычисляется аналитически, что обеспечивает быстрое выполнение расчётов на PC.

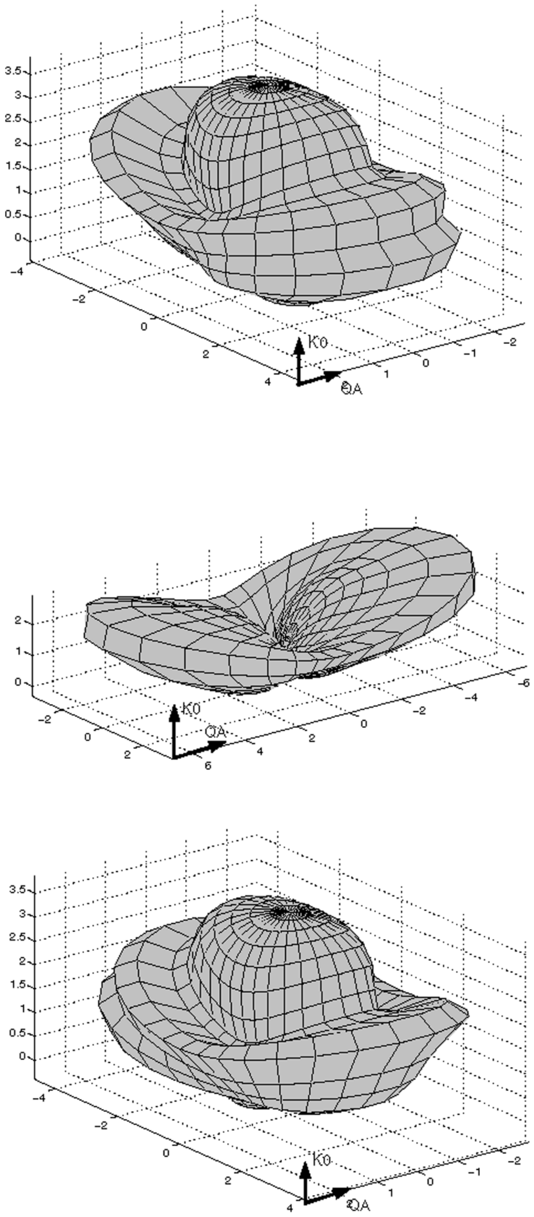

Рис. 5 Разрез трёхмерного изображения $d^2\sigma/d\grave{U}2/de_2(10^{-19}cm^2ster^{-1}ev^{-1})$ для 3р-возбуждённого атома Na в плоскости, перпендикулярной QA. $\omega = 90^0, E_0 = 150ev, e2 = 20ev$. Сплошная линия: *m*=-1, пунктир: *m*=1 Нижний график для *m*=0.

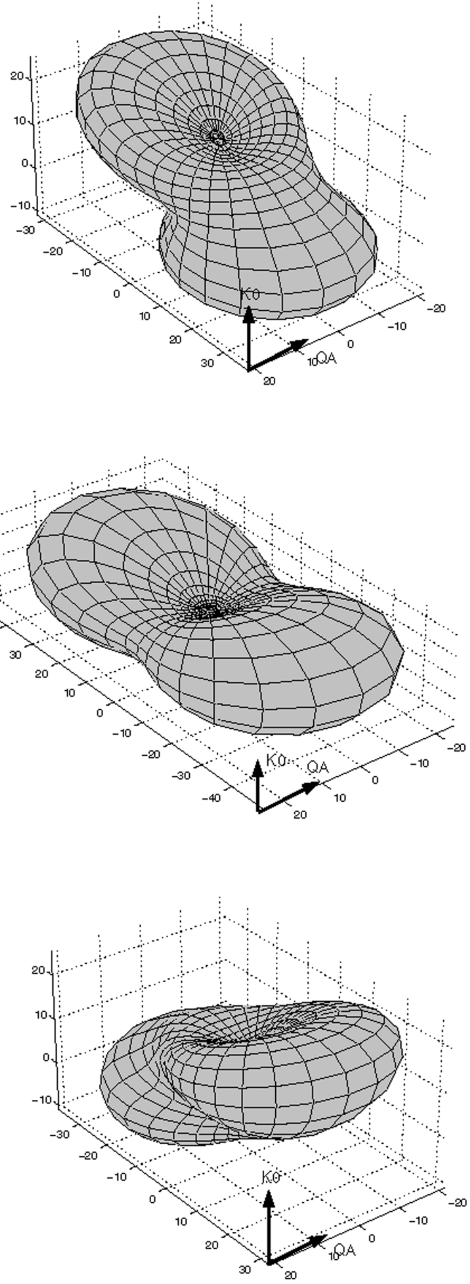

Рис. 6 Трёхмерное изображение $d^2\sigma/d\grave{U}2/de_2(10^{-19}cm^2ster^{-1}ev^{-1})$ 2р-возбуждённого атома Li.

$$0^0 < \theta_2 < 180^0, 0^0 < \varphi_2 < 360^0,$$

$$\omega = 90^0, E_0 = 150ev, e2 = 3ev.$$

m=1, *m*=0, *m*=- сверху вниз соответственно.

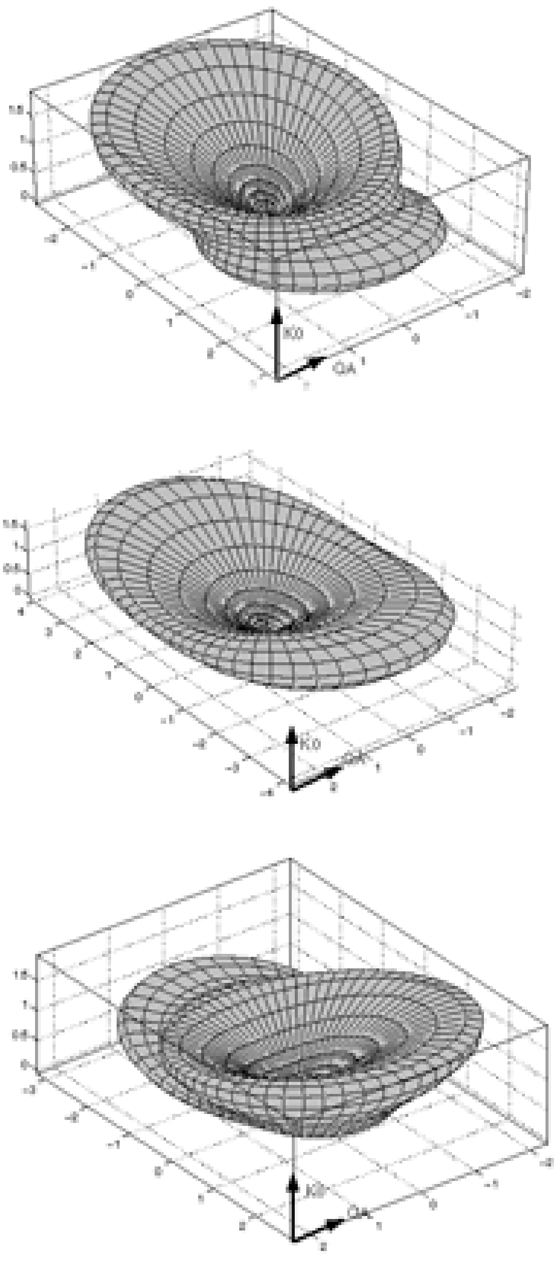

Рис. 7 Трёхмерное изображение $d^2\sigma / d\grave{U}2/ de_2 (10^{-19} cm^2 ster^{-1} ev^{-1})$ 2р-возбуждённого атома Li.

$0^0 < \theta_2 < 180^0, 0^0 < \varphi_2 < 360^0$,

$\omega = 90^0, E_0 = 150ev, e2 = 20ev$.

m=1, *m*=0, *m*=-1 сверху вниз соответственно.

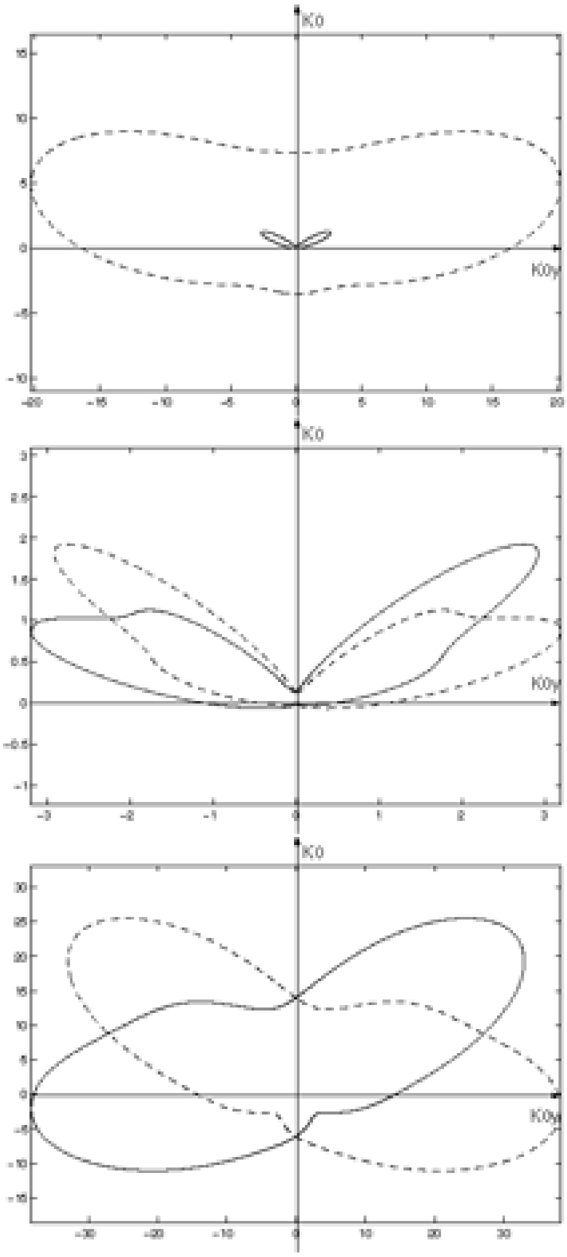

Рис. 8 Разрез трёхмерного изображения $d^2\sigma / d\grave{U}2/ de_2 (10^{-19} cm^2 ster^{-1} ev^{-1})$ 2р-возбуждённого атома Li в плоскости, перпендикулярной QA. $\omega = 90^0, E_0 = 150ev$.

Верхний график: *m*=0, сплошная линия: $e2 = 20ev$, пунктир: $e2 = 3ev$. Средний график: сплошная линия: *m*=-1, пунктир: *m*=1, $e2 = 20ev$. Нижний график: сплошная линия: *m*=-1, пунктир: *m*=1, $e2 = 3ev$.

Приложение

В качестве примера приведём выражение для матричного элемента с функцией $|31\pm1\rangle$, которое получается после подстановки (4) и (2) в $M_{bc}(\mathbf{q},\mathbf{k},\omega)$:

$$M_{bc}(\mathbf{q},\mathbf{k},\omega)=$$

$$=\mp e^{\mp i\gamma}\cdot\Big(\frac{\sin(\beta)}{\sqrt{2}}\langle\mathbf{k}|\exp(i\mathbf{qr})|310\rangle+(\cos(\beta)\cos(\alpha)\pm i\sin(\alpha))\cdot\langle\mathbf{k}|\exp(i\mathbf{qr})|311\rangle+$$

$$+\langle\mathbf{k}|310\rangle\cdot\left\{\frac{\sin(\Psi)\cos(\Psi)}{\sqrt{2}}(\cos(\beta)\cos(\alpha)\pm i\sin(\alpha))\big[\langle 311|\exp(i\mathbf{qr})|311\rangle-\langle 310|\exp(i\mathbf{qr})|310\rangle\big]\right\}-$$

$$-\langle\mathbf{k}|310\rangle\cdot\left\{\frac{\sin(\beta)}{\sqrt{2}}\big[\sin^2(\beta)\langle 311|\exp(i\mathbf{qr})|311\rangle+\cos^2(\beta)\langle 310|\exp(i\mathbf{qr})|310\rangle\big]\right\}\Big).$$

$$\langle 31\pm1|\exp(i\mathbf{qr})|31\pm1\rangle=\frac{4t^2-3t+1}{(1+t)^5},\quad t=\frac{q^2}{4\alpha^2},\ \alpha=\frac{Z_{eff}}{3},$$

$$\langle 310|\exp(i\mathbf{qr})|310\rangle=\frac{41t^2-18t-20t^3+1}{(1+t)^6},$$

$$\langle\mathbf{k}|\exp(i\mathbf{qr})|310\rangle=\alpha^{\frac{5}{2}}e^{\frac{\pi}{2k}}\frac{\Gamma(1-\frac{i}{k})}{4\pi\sqrt{3}}\Big[A_0J_0+A_1J_1+A_2J_2+A_3J_3\Big],$$

$$\langle\mathbf{k}|\exp(i\mathbf{qr})|31\pm1\rangle=\mp iq\sin(\Psi)\alpha^{\frac{5}{2}}e^{\frac{\pi}{2k}}\frac{\Gamma(1-\frac{i}{k})}{2\pi\sqrt{6}}\Big[B_1J_1+B_2J_2+B_3J_3\Big],\text{ где}$$

$$A_0=\frac{24\alpha-16y}{y^4},\qquad A_1=\frac{16xy-36x\alpha+4\alpha}{y^3},\qquad A_2=\frac{y(2-2x^2)-\alpha-4x\alpha+9x^2\alpha}{y^2},$$

$$A_3=-\frac{\alpha}{2y}(x^3-x^2-x+1),\qquad B_1=\frac{2y-3\alpha}{y^2},$$

$$B_2=\frac{1}{2}-\frac{\alpha}{y}+\frac{q^2\sin^2(\Psi)}{2y^2}\Big(\frac{3\alpha}{y}-1\Big),$$

$$B_3=\frac{\alpha}{8}\left\{1-\frac{2q^2\sin^2(\Psi)}{y^2}\left[1-\frac{q^2\sin^2(\Psi)}{2y^2}\right]\right\},\qquad J_0=\int_0^\infty e^{-\lambda\xi}{}_1F_1\Big(\frac{i}{k},1,ik\xi\Big)d\xi=\frac{\lambda^{\frac{i}{k}-1}}{(\lambda-ik)^{\frac{i}{k}}},$$

$$J_1=\int_0^\infty\xi e^{-\lambda\xi}{}_1F_1\Big(\frac{i}{k},1,ik\xi\Big)d\xi=\frac{\lambda^{\frac{i}{k}-2}}{(\lambda-ik)^{\frac{i}{k}+1}}(\lambda-ik-1),$$

$$J_2=\int_0^\infty\xi^2 e^{-\lambda\xi}{}_1F_1\Big(\frac{i}{k},1,ik\xi\Big)d\xi=\frac{\lambda^{\frac{i}{k}-3}}{(\lambda-ik)^{\frac{i}{k}+2}}(1+2\lambda^2-2k^2+3ik-4ik\lambda-4\lambda),$$

$$J3=\int_0^{\infty}\xi^3 e^{-\lambda\xi}{}_1F_1(\frac{i}{k},1,ik\xi)d\xi=\frac{6\lambda^{\frac{i}{k}-4}}{(\lambda-ik)^{\frac{i}{k}}}\left[\frac{2k^2+3ik-1}{6(\lambda-ik)^3}+\frac{3(1-ik)}{2(\lambda-ik)^2}-\frac{3}{\lambda-ik}+1\right]$$

$$x=\frac{q^2\sin^2(\Psi)}{y^2},\ y=\alpha+i(q\cos(\Psi)-k),\ \lambda=\frac{\alpha^2+p^2}{2y},\ p^2=q^2+k^2-2qk\cos(\Psi).$$

Литература

1. M.A.Coplan, J.H.Moore, J.P.Doering, Rev. Mod. Phys. 66, 985 (1994).
2. R.Goruganthu, W.Wilson, R.Bonham, Phys. Rev. A 35, 540 (1987).
3. A.Green, T.Savada, J.Atmospheric Terr. Phys. 31, 1719 (1972).
4. A.Dorn, A.Elliot, J.Lower, E.Weigold, J.Berakdar, Phys. Rev. Letters 80, 257 (1998).
5. J.Nijland, J.D.Gouw, H.Dijkerman, H.Nej-deman, J. Phys. B 25, 2841 (1992).
6. C.Opal, E.Beaty, W.Peterson, Atomic Data 4, 209 (1972).
7. M.E. Rudd, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 56, 162 (1991).
8. R.Petercop, Theory of Ionization of Atoms by Electrons Impact (Zinarne,Riga, 1975).
9. K.Omidvar, H.Kyle, E.Sullivan, Phys. Rev. A 5, 1174 (1972).
10. H.Massey, C.Mohr, Proc. Roy. Soc. A 140, 613, (1933).
11. G.Peach, J. Phys. B 1, 1088 (1968).
12. P.Barlett, A.Stelbovics, Phys. Rev. A 66, 012707 (2002).
13. D.Belkic, J.Phys. B 17, 3629 (1984).
14. K.Glemza, A.Kupliauskene, Lithuanian J. Phys. 45, 339 (2005).
15. G.Peach, J. Phys. B 1, 1088 (1968).
16. P.Barlett, A.Stelbovics, Atomic Data 86, 235 (2004).

THEORETICAL STUDIES OF IONIZATION OF ORBITALLY POLARIZED ATOMS BY ELECTRON IMPACT WITH 3-D IMAGING OF THE RESULTS

I.Yu.Yurova, I.D.Borispolsky

St. Petersburg State University, Institute of Physics, Ulyanovskaya str.1, Peterhof, St-Petersburg, 198504, Russia
e-mail: inna.yurova@IJ15700.spb.edu , Igorische22@rambler.ru

Electron-impact ionization of atoms with fixed projection of orbital moment$m$ on a distinguished axis (orbital polarization) is studied. Analytical expressions for the ionization amplitude in the first Born approximation with Born-Coulomb matrix element are obtained for $2p_m$ and $3p_m$, $m=0,\pm1$, the initial states of the atomic electron. The results of double differential cross-section calculations arepresented as 3-D images. The example of ionization of$p$-excited Na and Li atoms is considered.