

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 $3p_m$, $m = 0, \pm 1$, 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: $DDCS1 = d^2\sigma/d\Omega_1/d\Omega_2$, $DDCS1 = d^2\sigma/d\Omega_1/de_2$,

$DDCS2 = d^2\sigma/d\Omega_2/de_2$ и тройное $TDCS = d^3\sigma/d\Omega_1/d\Omega_2/de_2$. 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:

$E_0, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_1, \varphi_2$. 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):

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 de_2} = \frac{4kk_1}{k_0q^4} \left| M_{bc}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \omega) \right|^2, \quad (1)$$

где $M_{bc}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \omega) = \langle \mathbf{k}_{\text{ort}} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | nlm \rangle$ – 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 $|\mathbf{k}_{\text{ort}}\rangle$ равна [9]:

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

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

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

В формуле (2) $|nlm\rangle$ – 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 ко-

ординат 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:

$$Z_{eff} = \frac{3n^2 - l(l+1)}{\bar{r}_{nl}}, \text{ где } n - \text{главное}$$

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:

$$\bar{r}_{Na(3p)} = 5.76a_0, \quad Z_{eff}(Na(3p)) = 2.17.$$

Несмотря на простоту водородоподобной функции, полученные с ней результаты довольно точны: проверка точности производилась сравнением результатов для полного сечения ионизации атома кислорода при $E_0 = 100\text{eV}$, рассчитанного с функциями Клементи-Роегги. 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:

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

Функция $D_{m'm}^l(\alpha, \beta, \gamma)$ 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 \mathbf{k} , ось X_a лежит в плоскости, задаваемой векторами \mathbf{k} и \mathbf{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 \mathbf{o} , где \mathbf{o} – единичный вектор, направленный вдоль оси квантования. Нами были вычислены углы Эйлера:

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

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

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

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

Таким образом, DDSCS2 рассчитывалось нами с матричным элементом $M_{bc}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \omega)$, в котором угловая зависимость водородоподобной функции определялась выражением (4) (см. Приложение).

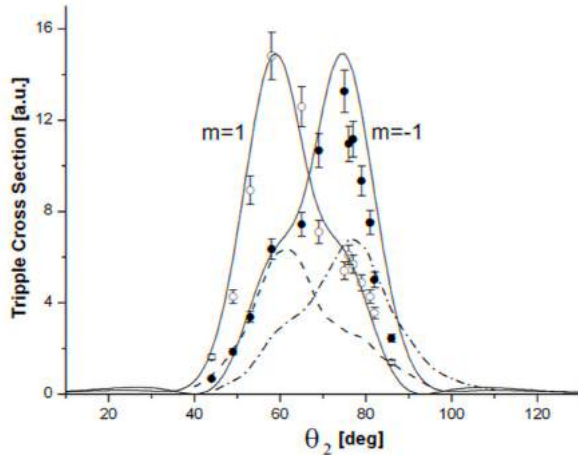


Рис.1 Сравнение рассчитанных $d^2\sigma/d\Omega_2/de_2$ для 3p-возбуждённого атома Na с работой [4]: $\omega = 90^\circ, E_0 = 150\text{eV}, e_2 = 20\text{eV}, \theta_1 = 20^\circ, \varphi_1 = 90^\circ, \varphi_2 = 270^\circ$ Сплошные линии – наши результаты, пунктир – расчёты [4], черные и белые кружки – 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 $\omega = 90^\circ$. 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.

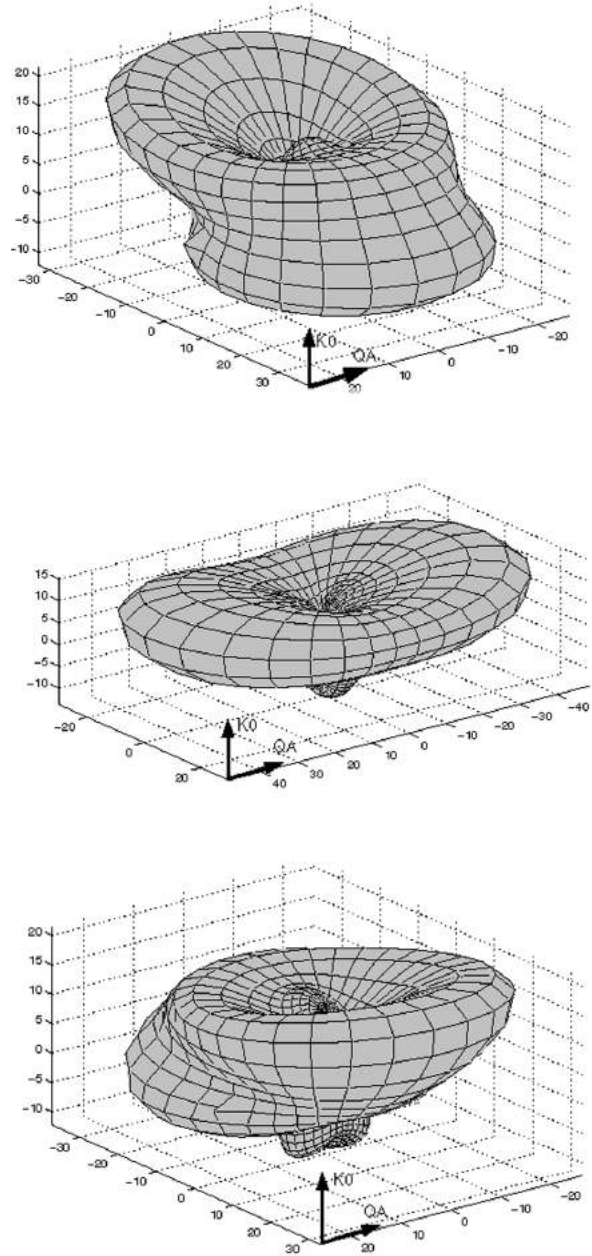


Рис. 2 Трёхмерное изображение $d^2\sigma/d\Omega_2(10^{-19}\text{cm}^2\text{ster}^{-1}\text{ev}^{-1})$ для 3p-возбуждённого атома Na. $0^\circ < \theta_2 < 180^\circ, 0^\circ < \varphi_2 < 360^\circ, \omega = 90^\circ, E_0 = 150\text{eV}, e_2 = 3\text{eV}.$ $m=1, m=0, m=-$ сверху вниз соответственно.

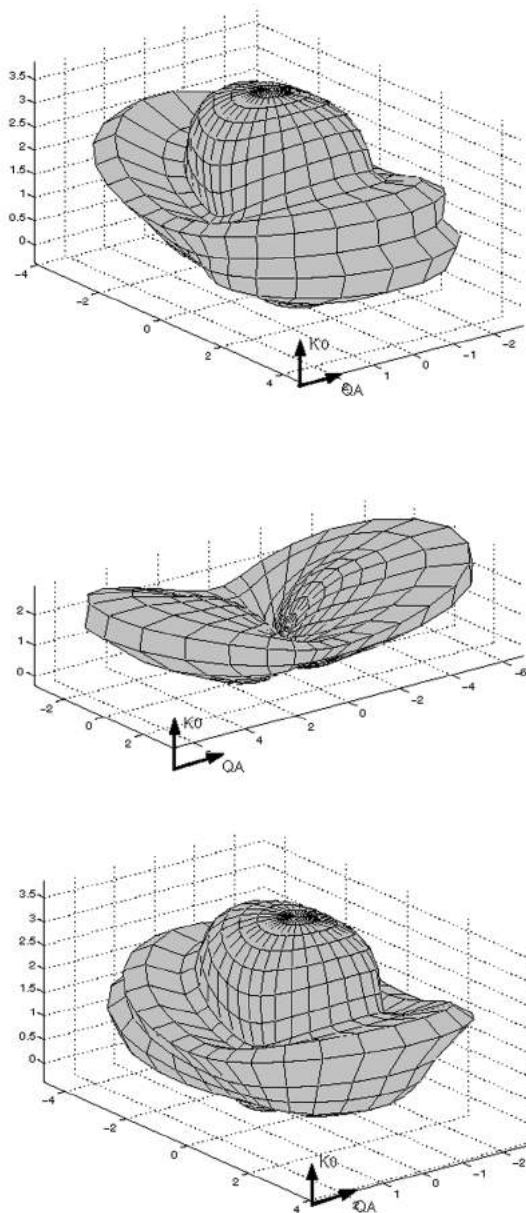


Рис. 3 Трёхмерное изображение $d^2\sigma/dU_2/de_2$ ($10^{-19} \text{ cm}^2 \text{ ster}^{-1} \text{ ev}^{-1}$) для 3p-возбуждённого атома Na. $0^0 < \theta_2 < 180^0, 0^0 < \varphi_2 < 360^0$, $\omega = 90^0, E_0 = 150 \text{ ev}, e_2 = 20 \text{ ev}$.

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

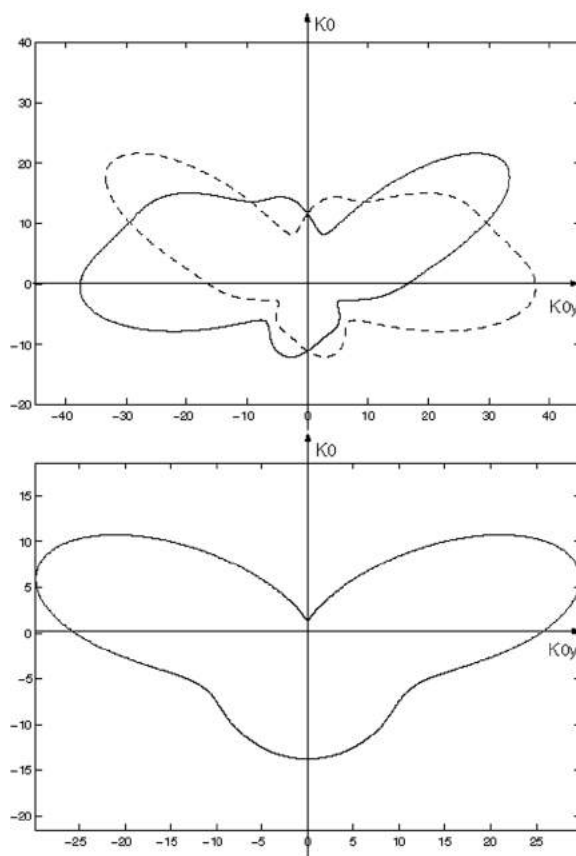


Рис. 4 Разрез трёхмерного изображения $d^2\sigma/dU_2/de_2$ ($10^{-19} \text{ cm}^2 \text{ ster}^{-1} \text{ ev}^{-1}$) для 3p-возбуждённого атома Na в плоскости, перпендикулярной QA. $\omega = 90^0, E_0 = 150 \text{ ev}, e_2 = 3 \text{ ev}$. Сплошная линия: $m=-1$, пунктир: $m=1$ Нижний график для $m=0$.

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 РС.

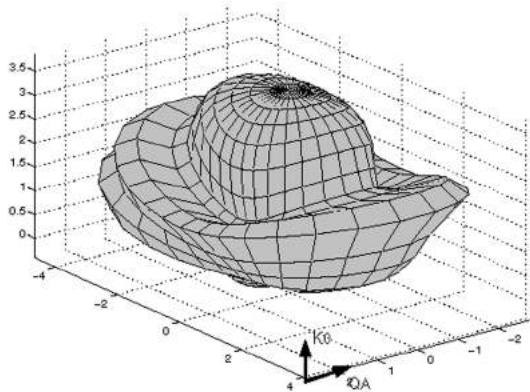
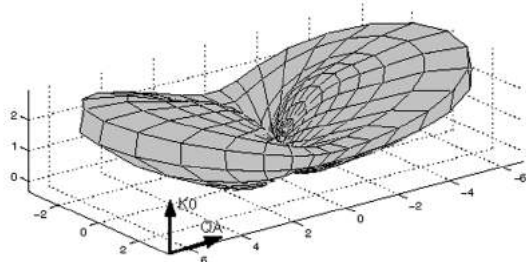
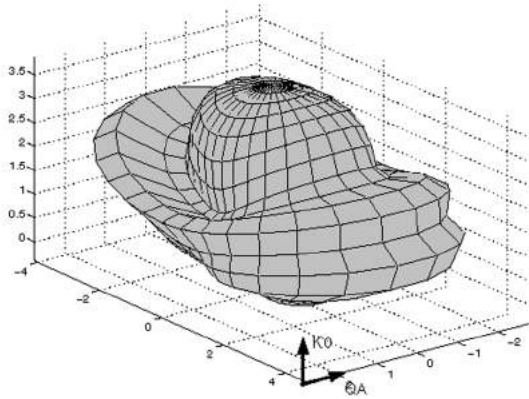


Рис. 5 Разрез трёхмерного изображения $d^2\sigma/d\dot{U}^2/de_2(10^{-19} cm^2 ster^{-1} ev^{-1})$ для 3p-возбуждённого атома Na в плоскости, перпендикулярной QA. $\omega = 90^0, E_0 = 150ev, e2 = 20ev$. Сплошная линия: $m=-1$, пунктир: $m=1$ Нижний график для $m=0$.

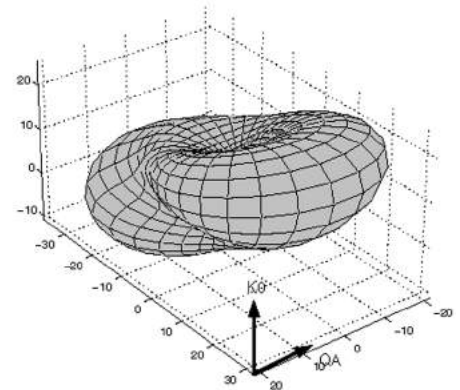
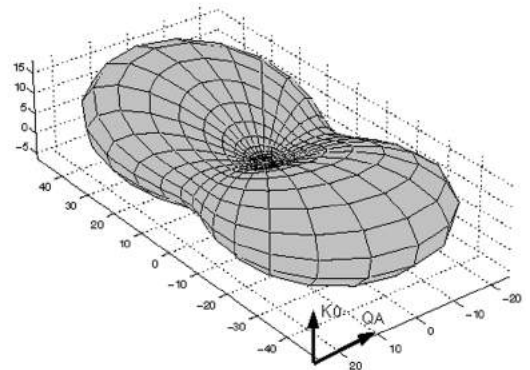
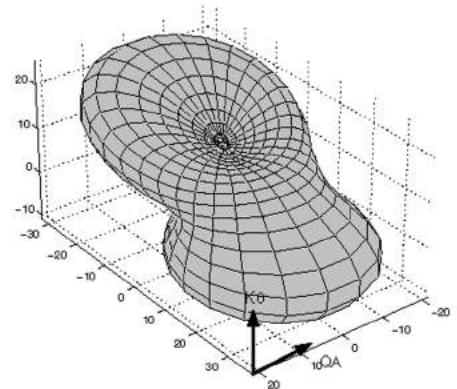


Рис. 6 Трёхмерное изображение $d^2\sigma/d\dot{U}^2/de_2(10^{-19} cm^2 ster^{-1} ev^{-1})$ 2p-возбуждённого атома Li. $0^0 < \theta_2 < 180^0, 0^0 < \varphi_2 < 360^0$, $\omega = 90^0, E_0 = 150ev, e2 = 3ev$. $m=1, m=0, m=-$ сверху вниз соответственно.

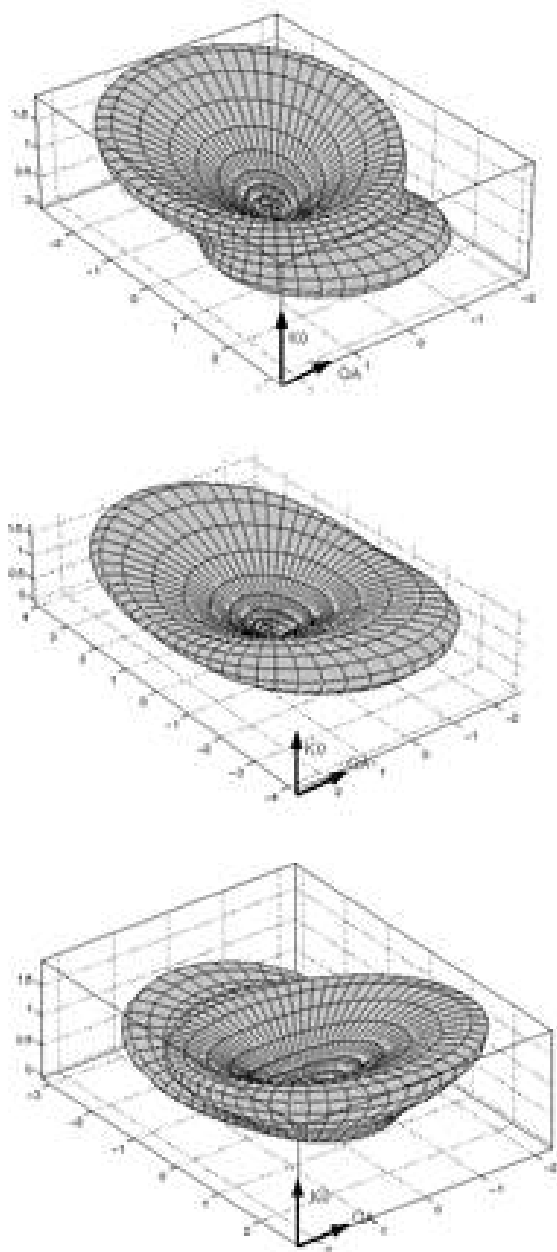


Рис. 7 Трёхмерное изображение $d^2\sigma/d\Omega^2$ ($10^{-19} \text{ cm}^2 \text{ ster}^{-1} \text{ ev}^{-1}$) 2p-возбуждённого атома Li.

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

$$\omega = 90^0, E_0 = 150 \text{ ev}, e_2 = 20 \text{ ev}.$$

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

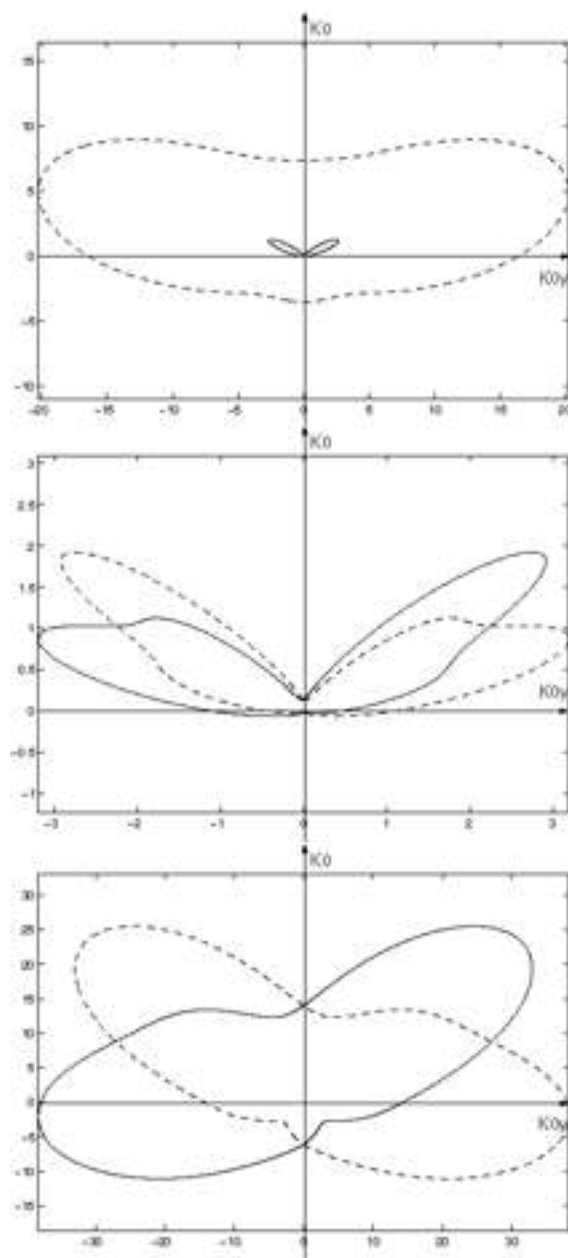


Рис. 8 Разрез трёхмерного изображения $d^2\sigma/d\Omega^2$ ($10^{-19} \text{ cm}^2 \text{ ster}^{-1} \text{ ev}^{-1}$) 2p-возбуждённого атома Li в плоскости, перпендикулярной QA. $\omega = 90^0, E_0 = 150 \text{ ev}$.

Верхний график: $m=0$, сплошная линия: $e_2 = 20 \text{ ev}$, пунктир: $e_2 = 3 \text{ ev}$. Средний график: сплошная линия: $m=-1$, пунктир: $m=1, e_2 = 20 \text{ ev}$. Нижний график: сплошная линия: $m=-1$, пунктир: $m=1, e_2 = 3 \text{ ev}$.

Приложение

В качестве примера приведём выражение для матричного элемента с функцией $|31\pm 1\rangle$, которое получается после подстановки (4) и (2) в $M_{bc}(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \omega)$:

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

$$= \mp e^{\mp i\gamma} \cdot \left(\frac{\sin(\beta)}{\sqrt{2}} \langle \mathbf{k} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | 310 \rangle + (\cos(\beta) \cos(\alpha) \pm i \sin(\alpha)) \cdot \langle \mathbf{k} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | 31\uparrow \rangle + \right.$$

$$+ \langle \mathbf{k} | 310 \rangle \cdot \left\{ \frac{\sin(\Psi) \cos(\Psi)}{\sqrt{2}} (\cos(\beta) \cos(\alpha) \pm i \sin(\alpha)) [\langle 31\uparrow \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | 31\uparrow \rangle - \langle 310 \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | 310 \rangle] - \right.$$

$$\left. - \langle \mathbf{k} | 310 \rangle \cdot \left\{ \frac{\sin(\beta)}{\sqrt{2}} [\sin^2(\beta) \langle 31\uparrow \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | 31\uparrow \rangle + \cos^2(\beta) \langle 310 \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | 310 \rangle] \right\} \right\}.$$

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

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

$$\langle \mathbf{k} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | 310 \rangle = \alpha^{\frac{5}{2}} e^{2k} \frac{\Gamma(1 - \frac{i}{k})}{4\pi\sqrt{3}} [A_0 J_0 + A_1 J_1 + A_2 J_2 + A_3 J_3],$$

$$\langle \mathbf{k} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | 31\pm 1 \rangle = \mp i q \sin(\Psi) \alpha^{\frac{5}{2}} e^{2k} \frac{\Gamma(1 - \frac{i}{k})}{2\pi\sqrt{6}} [B_1 J_1 + B_2 J_2 + B_3 J_3], \text{ где}$$

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

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

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

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

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

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

$$J_3 = \int_0^\infty \xi^3 e^{-\lambda \xi} {}_1F_1\left(\frac{i}{k}, 1, ik\xi\right) d\xi = \frac{6\lambda^{\frac{i}{k}-4}}{(\lambda-ik)^{\frac{i}{k}}} \left[\frac{2k^2 + 3ik - 1}{6(\lambda-ik)^3} + \frac{3(1-ik)}{2(\lambda-ik)^2} - \frac{3}{\lambda-ik} + 1 \right]$$

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

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.Nejdeman, 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 momentum 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 $3p_m$, $m = 0, \pm 1$, the initial states of the atomic electron. The results of double differential cross-section calculations are presented as 3-D images. The example of ionization of p -excited Na and Li atoms is considered.