

УЧЕТ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ПОПРАВОК В ТЕОРИИ ИОНИЗАЦИИ ОРБИТАЛЬНО-ПОЛЯРИЗОВАННОГО АТОМА ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

И.Ю.Юрова, Н.К.Шевякина

Санкт-Петербургский государственный университет,
Ульяновская ул.1, Петродворец, Санкт-Петербург 198504, Россия.
e-mail: inna.yurova@IJ15700.spb.edu

Теоретически исследовалась ионизация атома электронным ударом в первом борновском приближении. Электронная волновая функция связанного состояния находилась с учетом релятивистских поправок в первом порядке теории возмущений с применением вариационного принципа. Кроме того, учитывалось заданная орбитальная поляризация атома в начальном состоянии, для чего было введено фиксированное направление оси квантования в лабораторной системе координат. В качестве примера рассмотрены особенности теории ионизации 3p-возбужденного поляризованного атома натрия.

В настоящей работе рассматривается процесс ионизации атома электронным ударом в случае, когда энергия вторичных электронов мала по сравнению с энергией первичных электронов и потому обменные эффекты несущественны. Энергии ионизирующих электронов в интервале от сотни до нескольких тысяч эВ. Сечение ионизации вычисляемое в первом борновском приближении [1], определяется согласно следующей формуле (здесь и далее используются атомные единицы):

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 d\varepsilon_2} = \frac{4kp_1}{p_0} \cdot |f_{ion}|^2, \quad (1)$$

где p_0 – импульс первичного электрона в начальном состоянии, p_1 – импульс первичного электрона в конечном

состоянии, \mathbf{k} – импульс ионизованного электрона, f_{ion} – амплитуда ионизации

$$f_{ion} = -\frac{2}{q^2} \langle \psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\vec{r}) | e^{i(\mathbf{q}\vec{r})} | \varphi_0(\vec{r}) \rangle \quad (2)$$

Здесь $\mathbf{q} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1$ – переданный импульс, $\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\vec{r})$ – кулоновская волновая функция ионизованного электрона, $\varphi_0(\vec{r})$ – волновая функция связанного состояния электрона в атоме. В настоящей работе для $\varphi_0(\vec{r})$ используется приближение эффективного заряда [2]. С учётом релятивистских поправок к потенциалу взаимодействия атомного электрона с полем эффективного заряда – Z/r экранированного ядра атома радиальная часть волновой функции электрона в атоме $\varphi(r)$ удовлетворяет следующему уравнению [3]:

$$\left[-\left(\frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{Z}{r} + W_1 + W_2 + W_3 \right] \varphi = E \varphi \quad (3)$$

Релятивистские поправки W_1, W_2, W_3 определены следующим образом:

$$W_1 = \frac{\pi Z}{2c^2} \delta(r)$$

$$W_2 = - \frac{\left(E + \frac{Z}{r}\right)^2}{2c^2} \quad (4)$$

$$W_3 = Z (4c^2 r^3)^{-1} (j(j+1) - l(l+1) - 3/4) \quad (5)$$

где j – квантовое число полного момента электрона, l – орбитальный момент, c – скорость света. Полная волновая функция в связанном состоянии равна произведению радиальной $\varphi(r)$ и угловой части. Угловая часть волновой функции $\Phi_{l, \frac{1}{2}jm}$ (ϑ, φ, m_s) определена формулой (64.11) в работе [3]. В настоящей работе релятивистские взаимодействия (4, 5) учитываются по теории возмущений. Поправка первого порядка к радиальной волновой функции $\varphi_0(r)$ ищется в виде:

$$\Delta\varphi = f\varphi_0, \quad (6)$$

где функция f определяется из условия минимизации следующего функционала [4]:

$$J = \int \varphi_0^2 \left\{ (W - E_0)f + \frac{1}{4}(\text{grad } f)^2 \right\} dv,$$

$$W = W_1 + W_2 + W_3. \quad (7)$$

В настоящей работе предлагается искать функцию f в следующем виде:

$$f = (c_0 + c_1 r + c_2 r^2) \exp(-ar).$$

Параметры c_0, c_1, c_2, a определяются из условия минимума функционала (7), что сводится к решению системы уравнений:

$$\frac{\partial J}{\partial c_i} = 0, \quad i = 1, 2, 3; \quad \frac{\partial J}{\partial a} = 0 \quad (8)$$

Изложенный выше метод применяется к вычислению сечения ионизации орбитально-поляризованного атома натрия в состоянии $3p_m$, где $m = \pm 1$ – магнитное квантовое число. С учетом экспериментального метода возбуждения атома натрия поляризованным излучением лазера [5], $3p \pm 1$ - состояния возможно получить, переводя атом натрия в состояния тонкой структуры с квантовыми числами $j=3/2, m_j = \pm 3/2$. Таким образом, для построения волновой функции атомных электронов необходимо учесть спин-орбитальное взаимодействие, то есть поправку (5). В дальнейшем мы предполагаем рассмотреть ионизацию внутренних оболочек, поэтому вклады релятивистских поправок (4), могут оказаться существенными. В настоящей работе данные поправки тоже будут учтены.

Волновые функции связанных состояний атомных электронов будут представляться в виде произведений соответствующих координатных и спиновых функций, причем направление оси квантования орбитального и спинового момента атомных электронов выбирается вдоль импульса ионизованного электрона \mathbf{k} . Чтобы учесть заданное в лабораторной системе координат направление оси квантования, например, направлением поляризации возбуждающего атом лазерного излучения, необходимо выполнить преобразование вращения в пространстве угловых функций [6]:

$$\Phi_{l\pm 1, \frac{3}{2}\pm \frac{3}{2}}(\vartheta, \varphi) = \sum_{m_j, m_j'} D_{m_j' \pm \frac{3}{2}, m_j}^{\frac{3}{2}}(\alpha, \beta, \gamma) \Phi_{l, \pm \frac{3}{2} m_j'}(\vartheta', \varphi') \quad (9)$$

Здесь $D_{m_j' \pm \frac{3}{2}, m_j}^{\frac{3}{2}}(\alpha, \beta, \gamma)$ – D -функция Вигнера, зависящая от углов Эйлера α, β, γ поворота атомной системы координат до совмещения с лабораторной системой; углы ϑ, φ описывают положение атомного электрона в лабораторной системе координат, углы ϑ', φ' – в атомной системе. Преобразованные функции (9) в произве-

дении с уточненной релятивистскими поправками радиальной функцией подставляются в формулу (1) для вычисления тройного дифференциального сечения ионизации. Конкретные вычисления можно провести для ионизации поляризованного в возбужденное состояние $3p_{3/2}$ с проекциями полного момента $\pm 3/2$ атома натрия.

Література

1. Р.К.Петеркоп, Теория ионизации атомов электронным ударом (Зинатне, Рига, 1975).
2. К.Оmidwar, Н.Kyle, Т.Sullivan, Phys. Rev. A 5, 1174 (1075).
3. А.С.Давыдов, Квантовая механика (Физматгиз, Москва, 1963).
4. Г.Веселов, М.Адамов, ДАН СССР, 57, 235 (1947).
5. F.Dorn, A.Elliott *et.al.*, Phys.Rev.Lett. 80, 257 (1998).
6. Д.А.Варшалович, А.Н.Москалев, В.К.Херсонский. Квантовая теория углового момента (Наука, Ленинград, 1975).

THEORETICAL CONSIDERATION OF RELATIVISTIC EFFECTS IN ELECTRON IMPACT IONIZATION OF ORBITAL POLARIZED ATOMS

I.Yu.Yurova, N.K.Shevyakina

Fock Institute of Physics, St. Petersburg State University,
Ulyanovskaya ul.1, Petrodvorets, St. Petersburg, 198504 Russia
e-mail: inna.yurova@IJ15700.spb.edu

A theoretical method of calculation of the triple cross section for ionization of orbital polarized atoms by electron impact is considered. The first Born approximation is applied. A relativistic correction of atomic wave function is considered in the first perturbation order. The correction term is established by means of variation method. A direction of the quantization axis is introduced. A rotational transformation of the atomic wave function is considered. An example of ionization of p-excited orbital polarized atomic sodium is considered.

