

氢负离子在微腔中的光剥离研究*

唐田田 王德华[†] 黄凯云

(鲁东大学物理学院, 烟台 264025)

(2010年7月11日收到; 2010年7月16日收到修改稿)

利用闭合轨道理论,研究了氢负离子在金属面和弹性界面组成的微腔中的光剥离截面. 结果表明,微腔的上下表面对氢负离子的光剥离截面产生很大影响. 若固定金属面与氢负离子之间的距离不变,当弹性界面与氢负离子之间的距离很大时,弹性界面对氢负离子光剥离截面的影响很小,光剥离截面的振荡幅度和振荡频率与只有金属面时的情况类似. 随着弹性界面和氢负离子之间距离的不断减小,光剥离截面的振荡幅度增大,振荡频率减小. 若保持氢负离子和弹性界面之间的距离不变,随着金属面和氢负离子之间距离 d_0 的不断增大,金属面的影响越来越弱;当 d_0 增大到 500 a. u. 时,氢负离子的光剥离截面趋近于只有弹性界面的情况. 因此可以通过改变微腔上下表面的距离来调控氢负离子的光剥离. 本结果对于研究负离子体系在界面附近和微腔结构中的光剥离问题具有一定的参考价值.

关键词: 光剥离截面, 闭合轨道理论, 微腔

PACS: 32. 80. Gc, 03. 65. Sq, 34. 35. + a

1. 引言

随着光剥离显微技术和表面物理的发展,原子或负离子体系在外场和表面附近光剥离的研究引起了人们的广泛关注^[1-3]. 早期的实验和理论表明,氢负离子在外场存在时的光剥离截面中包含一系列的振荡结构. 许多人采用不同的方法对光剥离截面的振荡结构进行了分析,其中 Du 等人提出的闭合轨道理论对理解外场中的负离子的光剥离截面的振荡现象提供了一个清晰的理论物理图像解释^[4,5]. 他们发现在光剥离截面中出现的振荡结构是由于从氢负离子向外传播的波与被外场返回的波的干涉引起的. 另一方面,由于氢负离子被用来探测被吸附物的态寿命和反向散射中的电荷转移,表面附近氢负离子的光剥离问题也引起了人们极大地兴趣. 首先, Yang 等人利用闭合轨道理论和理论模型成像方法研究了氢负离子在弹性界面附近氢负离子的光剥离^[6-8]. 在这些研究中,他们认为电子与界面的碰撞为弹性碰撞,忽略了电子与界面之间的相互作用. 但是弹性界面只是一个理想模型,它与实际表面有很大不同. 对于金属面附近负离子

的光剥离,由于剥离电子会受到金属面所形成的像电荷的镜像势的影响,其运动情况变得较为复杂. 最近, Yang 等人研究了金属面存在时氢负离子的光剥离^[9,10]. 他们的研究表明,氢负离子的光剥离截面的振荡结构只出现在剥离阈附近的很小能量范围内. 因此,如何对氢负离子在金属面附近的光剥离进行调制研究引起了人们的广泛关注. 一方面,人们发现可以通过外加的电场或磁场对氢负离子在金属面附近的光剥离进行调控研究^[11-14];另一方面,我们发现利用一个金属微腔结构也可改变氢负离子的光剥离截面^[15]. 但是,在金属微腔结构中,剥离电子的成像情况非常复杂,相应的理论分析比较困难. 因此,在本文中,我们改变了微腔结构的组成,用一个弹性的上表面代替金属面,此时剥离电子的成像情况比较简单,相应的理论分析比较清楚. 借助于闭合轨道理论,我们研究了氢负离子在金属面和弹性界面组成的微腔结构中的光剥离. 计算结果表明,微腔的上下表面对氢负离子的光剥离截面产生很大影响. 因此,可以通过改变微腔上下表面的距离来调控氢负离子的光剥离. 我们的结果对于实验研究原子或离子体系在界面附近的光吸收和光剥离问题可以提供一定的理论指导.

* 国家自然科学基金(批准号: 11074104, 10604045)和山东省高等学校科技计划(批准号: J09LA02)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: jnwdh@sohu.com

2. 理论分析

2.1. 体系的哈密顿量和闭合轨道

该体系中的微腔是由两个相互平行的金属面和弹性界面组成的,其物理模型如图 1 所示,氢负离子位于坐标原点. 微腔的上表面为弹性界面,距离原点的距离为 d_1 ,下表面为金属面,距离原点的距离为 d_0 . 假定激光的极化方向沿 z 轴正向.

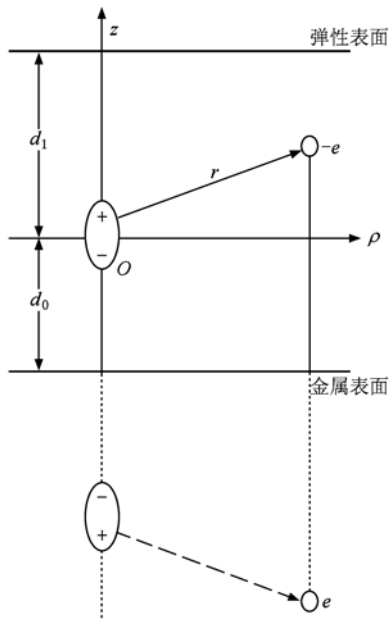


图 1 微腔中氢负离子光剥离的物理图像

氢负离子在此微腔中的光剥离过程如下:当用一束激光照射氢负离子,氢负离子吸收光子之后,电子发生剥离,并且以一定的速度从原子核出发向外运动. 根据镜像法^[10,16],金属面对剥离电子的作用可以用一个像电荷来代替. 当电子运动一定距离,电子会在弹性表面和像电荷的吸引作用力的影响下回到原子核处,从而形成闭合轨道. 金属面附近剥离电子的势能可以记为 $V = V_b + V_c + V_i$,其中, V_b 是剥离电子和氢原子之间的短程球对称势, V_c 是剥离电子与像原子核的相互作用势能,它也是一个短程势, V_i 是剥离电子与像电荷之间相互作用势能: $V_i = -\frac{1}{4(d_0 + z)}$. 根据闭合轨道理论,当电子与原子核之间的距离大于 10 a. u. 时,短程势的影响可以忽略不计. 因此剥离电子运动的哈密顿量可以写为(采用柱坐标系和原子单位制)

$$H = \frac{1}{2} \left(P_\rho^2 + \frac{L_z^2}{\rho^2} \right) + \frac{1}{2} P_z^2 - \frac{1}{4(d_0 + z)} + \frac{1}{4d_0}, \quad (1)$$

其中 $\frac{1}{4d_0}$ 的引入是为了保证 $V(z = 0) = 0$. 由于体系的柱对称性, ϕ 方向的运动已经被分离出去,角动量的 z 分量为守恒量,可令其为 0,即 $l_z = 0$. 通过解哈密顿运动方程,我们发现 ρ 方向的运动为自由运动,即

$$\rho(t) = R \sin \theta + k \sin \theta t, \quad (2)$$

其中, R 是初始球面半径 ($R \approx 10$ a. u.), θ 是剥离电子的出射角, $k = \sqrt{2E}$ 是剥离电子的动量. 根据闭合轨道理论,剥离电子的每一条返回到原点附近的闭合轨道都会在剥离截面中产生振荡. 因为 ρ 方向的运动为自由运动,因此只有沿 z 轴向上的轨道可以被弹性表面返回或被像电荷产生的势拉回到原点,从而形成一条闭合轨道. 假定剥离电子的能量为 $E = k^2/2$,出射角为 $\theta = 0$. 根据(1)式,我们有

$$P_z = \sqrt{2 \left(E - \frac{1}{4d_0} + \frac{1}{4(d_0 + z)} \right)}. \quad (3)$$

当电子到达闭合轨道的顶端 z_{top} 时,它的动量为 $P_z = 0$. 代入上式得

$$z_{\text{top}} = \frac{4Ed_0^2}{1 - 4Ed_0}. \quad (4)$$

在我们的体系中根据弹性界面到原点的距离 d_1 和 z_{top} 的大小,闭合轨道可以分为两种情况. 1) 如果微腔上表面距离原点较远,即 $d_1 > z_{\text{top}}$ 时,剥离电子还没碰到弹性界面就返回原点形成闭合轨道;2) 如果微腔上表面距离原点小于最大值,即 $d_1 < z_{\text{top}}$ 时,电子在达到 z_{top} 之前就被弹性界面弹回而形成闭合轨道. 图 2 给出了剥离电子运动的一些轨迹.

由于可在两种情况下形成闭合轨道,所以沿 z 轴方向的闭合轨道的回归周期 T 和作用量 S 也分为两种情况. 当只有金属面时,剥离电子的能量有一临界值^[10]: $E_c = \frac{1}{4d_0}$,但是在微腔中,电子的能量取值范围增大. 因此,可以根据电子的能量取值对闭合轨道的周期和作用量进行计算.

1) 剥离电子能量低于电子的临界能量 ($E_c = \frac{1}{4d_0}$)、微腔上表面即弹性界面到原点距离 $d_1 > z_{\text{top}}$ 时,闭合轨道的周期和作用量计算如下:

$$T = 2 \int_0^{z_{\text{top}}} \frac{1}{p_z} dz, \quad (5)$$

$$S = 2 \int_0^{z_{\text{top}}} p_z dz. \quad (6)$$

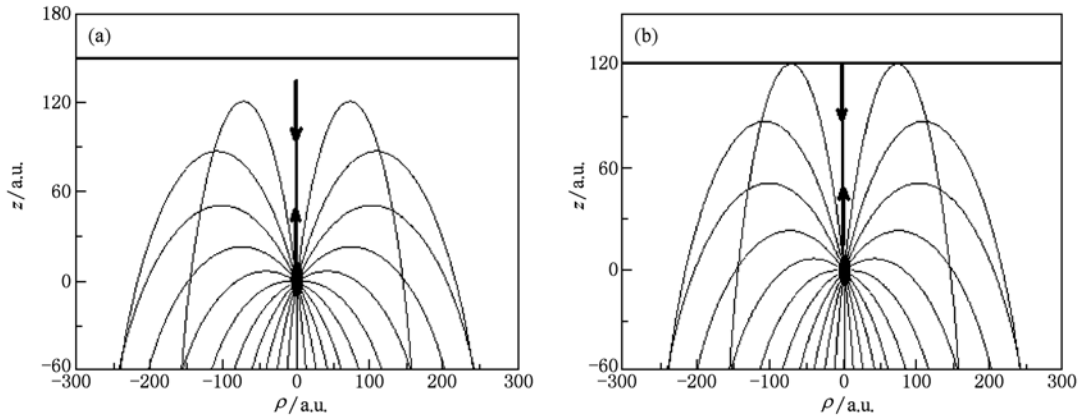


图2 剥离电子在微腔中的运动轨迹,氢负离子到金属面的距离为 60 a.u. (a)剥离电子没有碰到弹性界面时的闭合轨道,氢负离子到弹性界面的距离为 150 a.u.,剥离电子能量为 0.16 eV; (b)剥离电子碰到弹性界面时的闭合轨道,氢负离子到弹性界面的距离为 120 a.u.,剥离电子能量为 0.15 eV

2) 剥离电子能量低于电子的临界能量 ($E_c = \frac{1}{4d_0}$)、但是微腔上表面到原点距离 $d_1 < z_{top}$ 时,闭合轨道的周期和作用量为

$$T = 2 \int_0^{d_1} \frac{1}{p_z} dz, \quad (7)$$

$$S = 2 \int_0^{d_1} p_z dz. \quad (8)$$

当剥离电子能量大于电子的临界能量 ($E_c = \frac{1}{4d_0}$) 时,此时仍然能够形成闭合轨道,并且轨道的周期和作用量的计算与上面的情况 2 相同.

图 3 给出了当金属面到原点的距离 $d_0 = 60$ a.u. 一定,改变弹性界面到原点的距离 d_1 时,闭合轨道的周期 T ,作用量 S 随光子能量变化的图像.

从图 3 可以看出,当弹性界面到氢负离子的距离 $d_1 = 100$ a.u. 时(粗实线),因为 $d_1 < z_{top}$,剥离电子需要很短的回归周期和作用量就可被弹性界面弹回而形成第二种情况下的闭合轨道.所以当 d_1 较小时 T 和 S 都较小.随着弹性界面到氢负离子的距离 d_1 的增大,电子在像电荷作用力的影响或是被弹性界面弹回形成闭合轨道的周期和相应作用量增大.这对我们下面要计算的光剥离截面会产生很大的影响.

2.2. 氢负离子在微腔中的光剥离截面

根据闭合轨道理论^[4],沿闭合轨道传播的电子出射波与返回波的叠加干涉,导致光剥离截面中出现振荡.光剥离截面可以分为两个部分:

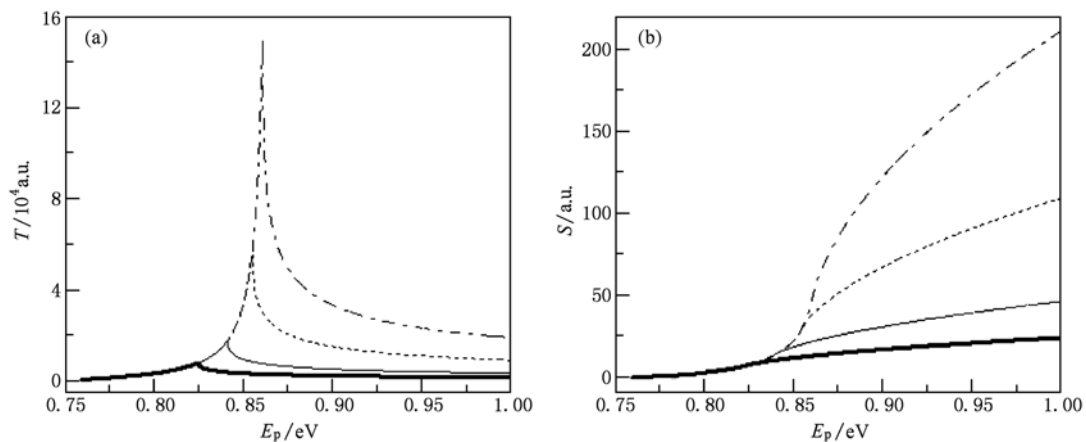


图3 剥离电子在微腔中的闭合轨道的周期 T 和作用量 S ((a), (b)中粗实线均表示 $d_1 = 100$ a.u.,细实线均表示 $d_1 = 200$ a.u.,点线均表示 $d_1 = 500$ a.u.,虚点线均表示 $d_1 = 1000$ a.u.)

$$\sigma(E) = \sigma_0(E) + \sigma^{\text{osc}}(E), \quad (9)$$

其中, $\sigma_0(E)$ 是没有外场和金属面存在时的光滑项, 且 $\sigma_0 = \frac{16\pi^2 \sqrt{2} B^2 E^{3/2}}{3c(E_b + E)^3}$. $\sigma^{\text{osc}}(E)$ 是振荡项, 对应于由于干涉而在光剥离截面中产生的振荡

$$\sigma^{\text{osc}}(E) = -\frac{4\pi}{c}(E + E_b) \text{Im} \langle D\psi_{\text{ini}} | \psi_{\text{ret}} \rangle, \quad (10)$$

其中, $\psi_{\text{ini}} = Be^{-k_b r}/r$ 是剥离电子的初始波函数, $E_b = k_b^2/2$ 是氢负离子对剥离电子的束缚能, $E_b \approx 0.754 \text{ eV}$, $B = 0.31522$ 为归一化常数, c 为光速. D 为偶极算符, 对于沿 z 方向的偏振光而言, $D = z$. ψ_{ret} 是剥离电子波函数中的返回部分. 定义一个以氢原子核为球心, 半径 $R \approx 10 \text{ a. u.}$ 的球, 则球面上出射波为^[5]

$$\psi_{\text{dir}}(R, \theta, \phi) = -i \frac{4Bk^2}{(k_b^2 + k^2)^2 \cos(\theta)} \frac{e^{i(kR - \pi)}}{kR}. \quad (11)$$

在球面外传播的剥离电子波函数利用半经典方法给出:

$$\psi(\rho, z, \phi) = \sum_j \psi_{\text{dir}}(R, \theta, \phi) A_j e^{i[S_j - \mu_j \pi/2]}, \quad (12)$$

其中, $S_j = \int p dq$ 是沿第 j 个轨道的作用量, μ_j 是 Maslov 指数, A_j 为振幅, 且

$$A_j(\rho, z, \phi) = \left| \frac{J_j(\rho, z, 0)}{J_j(\rho, z, t)} \right|^{1/2} = \frac{R}{R + kT_j}, \quad (13)$$

$J_j(\rho, z, t)$ 是雅克比行列式. T_j 是第 j 个轨道的周期. 因为核附近的返回波是柱对称的, 当返回波到达原子核附近时, 可以看做沿 z 轴传播的平面波

$$\psi_{\text{ret}}^j = N_j e^{-ikz}, \quad (14)$$

其中, N_j 是归一化因子,

$$N_j = A_j(R \rightarrow 0) e^{i(S_j - \frac{\mu_j \pi}{2})} \psi_{\text{dir}}(R, \theta, \phi). \quad (15)$$

将以上各式代入(10)式后对返回波函数和出射波函数积分, 并取其虚部就得到与返回波相关的振荡部分光剥离截面. 因为只有一条闭合轨道, 所以

$$\sigma_{\text{ret}}(E) = -\frac{8\pi^2 B^2 \sqrt{2E}}{c(E_b + E)^3 T} \sin\left(S - \frac{\mu\pi}{2}\right). \quad (16)$$

Maslov 指数 μ 对应闭合轨道上的奇异点的个数^[4]. 在第一种情况下 $\mu = 1$, 所以氢负离子在微腔中的光剥离截面为

$$\sigma = \frac{16\pi^2 \sqrt{2} B^2 E^{3/2}}{3c(E_b + E)^3} + \frac{8\pi^2 B^2 \sqrt{2E}}{c(E_b + E)^3 T} \cos(S), \quad (17)$$

其中, T 和 S 是第一种情况下的沿 z 方向的闭合轨道的回归时间和作用量((5)和(6)式).

而在第二种情况下, 因为与闭合轨道联系的波函数在闭合轨道由弹性界面返回处有 π 的相位损失, 所以 $\mu = 2$. 此种情况下氢负离子在微腔中的光剥离截面为

$$\sigma = \frac{16\pi^2 \sqrt{2} B^2 E^{3/2}}{3c(E_b + E)^3} + \frac{8\pi^2 B^2 \sqrt{2E}}{c(E_b + E)^3 T} \sin(S), \quad (18)$$

其中, T 和 S 是第二种情况下的沿 z 方向的闭合轨道的回归时间和作用量((7)和(8)式).

3. 计算结果和讨论

利用(17)和(18)式, 我们计算了氢负离子在微腔中的光剥离截面. 在我们的计算中, 剥离电子的能量范围从 0 到 0.25 eV. 图 4 给出了当氢负离子与金属面之间的距离 $d_0 = 60 \text{ a. u.}$ 不变, 改变弹性界面到氢负离子之间的距离时的光剥离截面图. 因为 d_0

一定, 所以 $z_{\text{top}} = \frac{4Ed_0^2}{1 - 4Ed_0}$ 由剥离电子的能量唯一

确定. 图 4(a) 是 $d_1 = 10000 \text{ a. u.}$ 时的光剥离截面. 因为 $d_1 \gg z_{\text{top}}$, 电子不可能碰到弹性界面, 所以其影响可以忽略, 光剥离截面与只有金属面时的情况相同^[10]. 图 4(b) 中 $d_1 = 1000 \text{ a. u.}$, 当光子能量大于剥离电子的临界能以后, 光剥离截面的振荡幅度较只有金属面时有所增大, 振荡频率有所减小. 在图 4(c) — (e) 中, 随着 d_1 的减小, 光剥离截面的振荡幅度越来越大, 振荡频率越来越小. 一方面, 由于 d_1 的减小, 形成闭合轨道的周期 T 和作用量 S 减小, 使得出射波源附近的返回波与出射波的干涉效应增强, 从而对光剥离截面产生很大影响. 另一方面, 随着出射电子能量的增大, 剥离电子能达到的 z_{top} 也在增大, 当 $d_1 < z_{\text{top}}$ 时, 电子会碰到弹性界面而被弹回形成闭合轨道, 与只有金属面时的光剥离截面相比较, 可以发现光剥离截面的振荡越来越明显. 图 4(f) 中, d_1 已减小到 60 a. u. , 闭合轨道的回归周期 T 和作用量 S 进一步减小, 干涉效应进一步增强, 剥离电子能量不需要很大就可满足 $d_1 < z_{\text{top}}$, 而被弹性界面弹回形成闭合轨道, 所以光剥离截面的振荡幅度很大.

下面我们来分析当固定微腔上表面, 即保持弹性界面与氢负离子之间的距离 d_1 不变, 改变下表面即金属面与氢负离子之间的距离 d_0 时的光剥离截

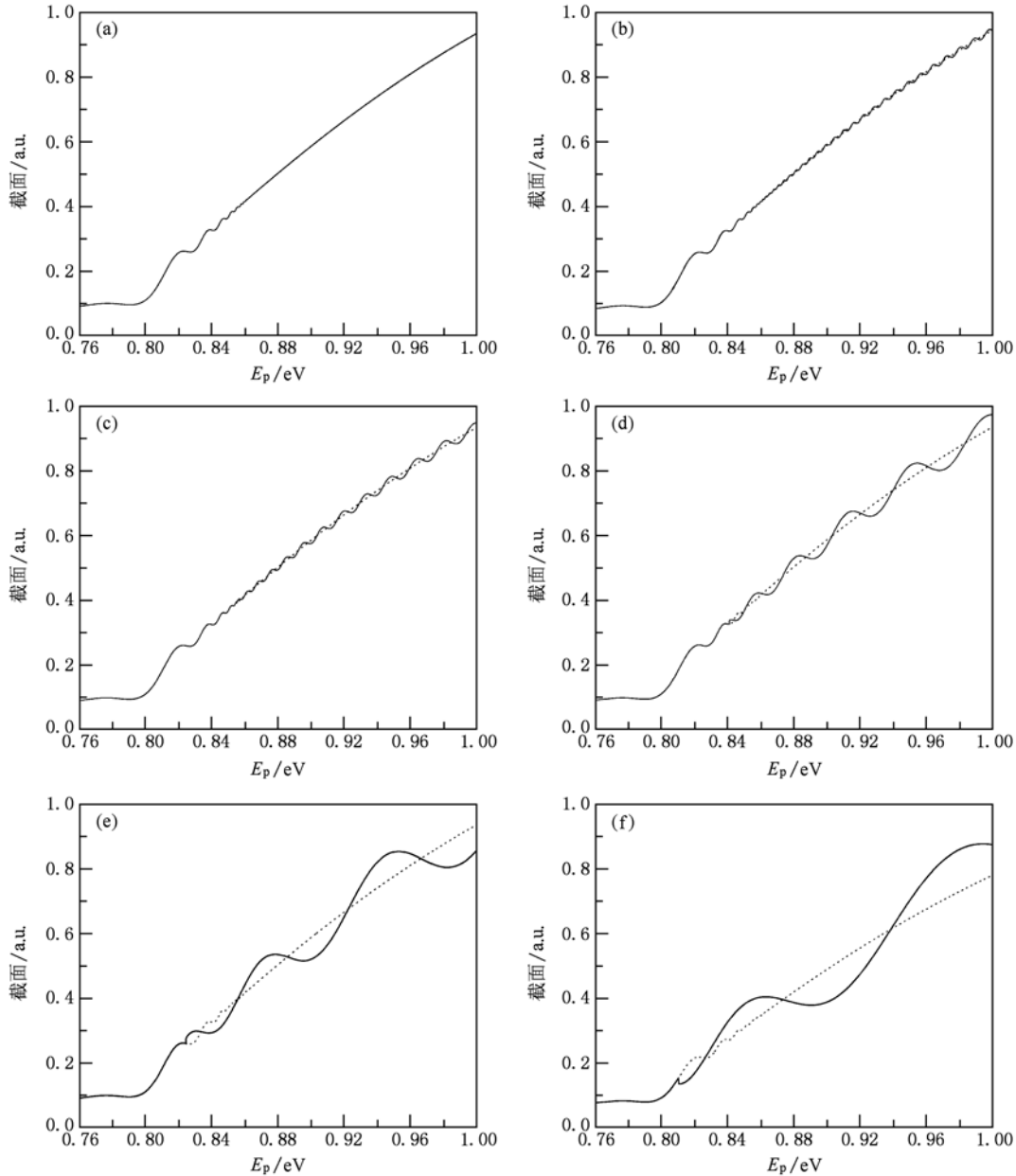


图4 当氢负离子与金属面的距离 $d_0 = 60$ a. u. 不变时,氢负离子在微腔中的光剥离截面随光子能量的变化曲线,光子的能量 $E_p = E + E_b$. 虚线为只有金属面存在时氢负离子的光剥离截面,实线表示氢负离子在微腔中的光剥离截面. 氢负离子与弹性界面的距离分别为(a) $d_1 = 10000$ a. u. , (b) $d_1 = 1000$ a. u. , (c) $d_1 = 500$ a. u. , (d) $d_1 = 200$ a. u. , (e) $d_1 = 100$ a. u. , (f) $d_1 = 60$ a. u.

面的变化. 计算结果如图 5 所示.

比较以上几个图形可以看出,当氢负离子与金属面之间的距离 d_0 比较小时, $d_0 = 50$ a. u. ,此时光剥离截面的振荡幅度很大,相应的振荡频率很小,如图 5(a) 所示. 图 5(b) 为 $d_0 = 100$ a. u. 时的光剥离截面. 与图 5(a) 相比,尤其在临界能量以上它的振荡幅度减小,振荡频率增大. 图 5(c) 为 $d_0 = 200$ a. u. 时,氢负离子的光剥离截面就趋近于只有弹性界面时的情况,金属面的影响减小,光剥离截面越来越

接近只有弹性界面的情况,而图 5(d) 中是 $d_0 = 500$ a. u. 时的情况,此时金属面的影响可以忽略,光剥离截面和只有弹性界面时的情况基本符合^[6]. 因此我们可以得到如下结论:随着氢负离子与金属面之间距离 d_0 的不断增大,光剥离截面振荡的幅度不断减小,振荡的频率不断增大,当距离增大到 500a. u. 时,氢负离子的光剥离截面就趋近于只有弹性界面时的情况了. 这是因为随着 d_0 的增大,剥离电子

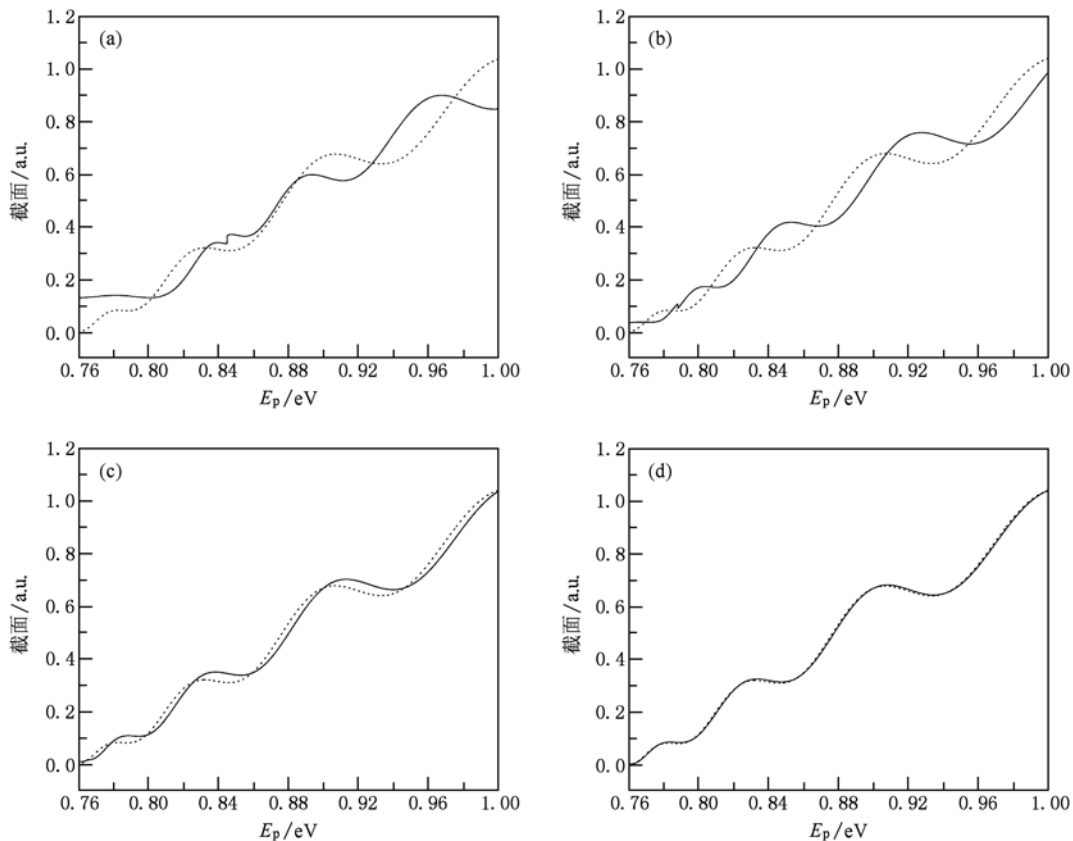


图5 氢负离子与弹性界面的距离 $d_1 = 100$ a. u. 固定时,氢负离子在微腔中的光剥离截面. 虚线为只有弹性界面存在时氢负离子的光剥离截面, 实线表示氢负离子在微腔中的光剥离截面. 氢负离子与金属面的距离 d_0 分别为 (a) $d_0 = 50$ a. u. , (b) $d_0 = 100$ a. u. , (c) $d_0 = 200$ a. u. , (d) $d_0 = 500$ a. u.

与金属界面的相互作用势 $-\frac{1}{4(d_0 + z)}$ 不断减小,对剥离电子的影响也就越小,当 $d_0 = 500$ a. u. 时,镜像势的影响很小,金属面的作用可以忽略,此时的光剥离截面与弹性界面存在时的情况类似.

4. 结 论

根据闭合轨道理论,本文研究了氢负离子在平行的金属面和弹性界面组成的微腔中的光剥离,推导出了光剥离截面的解析表达式,并且对光剥离截

面进行了计算. 结果表明:微腔的上下表面到氢负离子之间的距离对氢负离子的光剥离截面会产生很大的影响. 因此我们可以通过改变微腔的结构和大小来调控氢负离子的光剥离. 剥离阈附近负离子的光剥离可以提供一个很好的自由电子的相关点源,外场或表面可以控制电子波的传播,所以负离子在表面和外场结构中的光剥离是一个非常值得研究的课题. 到目前为止,氢负离子在微腔中的光剥离研究还没有实验报道,所以我们的理论结果可以对界面附近、微腔以及离子囚禁中进行的负离子光剥离实验提供一定的理论指导.

[1] Bryant H C, Mohagheghi A, Stewart J E, Donahue J B, Quick C R, Reeder R A, Yuan V, Hummer C R, Smith W W, Stanley Cohen, William P, Reinhardt, Lillian Overman 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2412

[2] Peters A D, Jaffe C, Delos J B 1997 *Phys. Rev. A* **56** 331
 [3] Song X H, Lin S L 2003 *Acta. Phys. Sin.* **52** 1611 (in Chinese) [宋晓红、林圣路 2003 物理学报 **52** 1611]
 [4] Du M L, Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1896

- [5] Du M L 2004 *Phys. Rev. A* **70** 055402
 [6] Yang G C, Zheng Y Z, Chi X X 2006 *J. Phys. B* **39** 1855
 Yang G C, Zheng Y Z, Chi X X 2006 *Phys. Rev. A* **73** 043413
 [7] Afaq A, Du M L 2007 *J. Phys. B* **40** 1309
 [8] Wang D H, Yu Y J 2008 *Chin. Phys. B* **17** 1231
 [9] Rui K K, Yang G C 2009 *Surf. Sci.* **603** 632
 [10] Zhao H J, Du M L 2009 *Phys. Rev. A* **79** 023408
 [11] Huang K Y, Wang D H 2010 *Acta. Phys. Sin.* **59** 932 (in Chinese)[黄凯云、王德华 2010 物理学报 **59** 932]
 [12] Huang K Y, Wang D H 2010 *Chin. Phys. B* **19** 063402
 [13] Yang B C, Du M L 2010 *J. Phys. B* **43** 035002
 [14] Wang D H, Tang T T, Wang S S 2010 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom* **177** 30
 [15] Huang K Y, Wang D H 2010 *J. Phys. Chem. C* **114** 8958
 [16] Ganesan K, Taylor K T 1996 *J. Phys. B* **29** 1293

Study of the photodetachment of H^- in a microcavity*

Tang Tian-Tian Wang De-Hua[†] Huang Kai-Yun

(College of Physics, Ludong University, Yantai 264025, China)

(Received 11 July 2010; revised manuscript received 16 July 2010)

Abstract

Using the closed orbit theory, we studied the photodetachment cross section of H^- in a microcavity, which is made of two parallel metal and elastic surfaces. The results show that both the upper and lower surfaces of the microcavity have great influence on the photodetachment cross section of H^- . If we fix the distance between the metal surface and H^- , when the distance between the elastic surface and H^- is large, the influence of the elastic surface on the photodetachment cross section is small. The oscillation amplitude and the oscillation frequency of the cross section approach to the case of the photodetachment of H^- near a metal surface. With the decrease of the distance between the elastic surface and H^- , the oscillation amplitude is increased and the oscillation frequency is decreased. If we fix the distance between the elastic surface and H^- , with the increase of the distance d_0 between the metal surface and H^- , the influence of the metal surface is decreased. When the d_0 is increased to 500 a. u. the cross section approaches to the case of the photodetachment of H^- near an elastic surface. So we can change the distance between the upper and lower surface of the microcavity to control the photodetachment of H^- . This study provides a new understanding on the photodetachment process of H^- in the presence of surfaces and microcavity.

Keywords: photodetachment cross section, closed orbit theory, microcavity

PACS: 32.80.Gc, 03.65.Sq, 34.35.+a

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11074104, 10604045) and the University Science & Technology Planning Program of Shandong Province (Grant No. J09LA02).

[†] Corresponding author. E-mail: jnwdh@sohu.com