

类钠离子光电子角分布的非偶极效应

马堃 颀录有 张登红 蒋军 董晨钟

Non-dipole effects in the angular distributions of photoelectrons on sodium-like ions

Ma Kun Xie Lu-You Zhang Deng-Hong Jiang Jun Dong Chen-Zhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 66, 043201 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.043201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.043201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I4>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

超短超强激光脉冲辐照超薄碳膜电离状态研究

[Ionization state of ultra-thin carbon film irradiated by ultra-short intense laser pulse](#)

物理学报.2016, 65(11): 113201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.113201>

氖原子光电子角分布的理论计算

[Theoretical calculation of the photoelectron angular distribution of neon](#)

物理学报.2016, 65(8): 083201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.083201>

三态 K_2 分子飞秒含时光电子能谱的理论研究

[Theoretical investigation of femtosecond-resolved photoelectron spectra of three-level ladder \$K_2\$ molecules](#)

物理学报.2015, 64(14): 143303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.143303>

类钠离子光电子角分布的非偶极效应*

马堃^{1)†} 颀录有²⁾ 张登红²⁾ 蒋军²⁾ 董晨钟^{2)‡}

1)(黄山学院信息工程学院, 黄山 245041)

2)(西北师范大学物理与电子工程学院, 甘肃省原子分子物理与功能材料重点实验室, 兰州 730070)

(2016年8月28日收到; 2016年11月24日收到修改稿)

基于密度矩阵理论和多组态 Dirac-Fock 方法, 系统地研究了不同入射光子能量下类钠离子 ($20 \leq Z \leq 92$) 3s, $2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 子壳层的光电离过程, 讨论了辐射场与电子相互作用的多极项对光电子角分布的影响, 并给出了光电子角分布的偶极和非偶极参数. 结果表明, 非偶极项对光电子角分布的影响不仅与入射光子能量有关, 而且与靶离子的原子序数、被电离电子的壳层等有着密切的关系. 总体上, 非偶极项对 $2p_{1/2,3/2}$ 子壳层光电子角分布的影响大于对 3s 子壳层光电子角分布的影响; 电偶极近似下, 入射光子能量、靶离子核电荷数对 s 子壳层光电子角分布轮廓影响不大, 对 p 子壳层光电子角分布影响较大, 在低能光子入射下, 低 Z 离子的 p 子壳层光电子角分布出现反常的角分布情况; 考虑非偶极项之后, p 子壳层的反常光电子角分布消失.

关键词: 类钠离子, 光电子角分布, 非偶极效应**PACS:** 32.80.Fb, 33.60.+q**DOI:** 10.7498/aps.66.043201

1 引言

原子光电离过程是光与物质相互作用的基本物理过程之一, 广泛地存在于天体等离子体和实验室高温等离子体环境中. 原子光电离过程的截面、速率系数等原子数据, 对于模拟和诊断等离子体的温度、密度以及分析等离子体中的能量输运和等离子体平衡等性质是必不可少的^[1-4]. 近年来, 随着先进光源、离子源等实验装置的发展, 特别是位置敏感测量技术的进步, 除光电离的总截面外, 人们更加关注光电子角分布实验测量和计算. 与光电离总截面相比, 光电子角分布携带了更加细致的光电离过程的动力学信息, 这些信息不仅可以甄别光电离过程的量子力学通道, 还可以揭示辐射场与物质相互作用的物理机制, 同时, 也是研究固体和材料表面的物理和化学性质的重要工具^[5].

早期, 人们主要在电偶极近似下分析光电子角分布的实验数据, 并认为入射光子能量小于 5 keV 时, 电偶极近似足以描述光电子角分布. 在电偶极近似下, 人们成功地解释了早期光电子角分布的一些实验测量^[6]. 电偶极近似忽略了辐射场的非偶极项, 如电四极 (E2)、磁偶极 (M1) 等, 我们把光电离过程这些非偶极项对的影响称为非偶极效应, 非偶极效应随着入射光子能量的增加而增大. 最近, 人们在新的实验平台上观察到低能光子入射时光电子角分布违背电偶极近似的情况, 如 Krässig 等^[7]在美国阿贡国家实验室的 APS 平台上对 Ar 原子 1 s 光电子、Jung 等^[8]在布鲁克黑文国家实验室的同步辐射光源上对 Ar 原子 K 壳层和 Kr 原子 L 壳层光电子、Hemmers 等^[9]在 ALS 光源上对 Ne 原子 2s 和 2p 光电子的角分布进行了测量, 这些测量结果中均出现了较为明显的非偶极效应; 2014 年,

* 国家自然科学基金 (批准号: 11274254, U1332206, U1331122, 11464042, 11564036)、安徽省高校优秀青年人才支持计划重点项目 (批准号: gxyqZD2016301)、安徽省高校自然科学基金项目 (批准号: KJHS2015B01) 和黄山学院自然科学基金项目 (批准号: 2016xskq003) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: makun@hsu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

Holste 等^[10]在德国 DORIS III 同步辐射光源上, 采用能量为 93.1 eV 的光子入射 Kr 原子, 测量了 Kr 原子 4p 光电子的角分布, 并观察到了更高的电八极贡献. 人们在越来越低的光子入射能量下观察到了非偶极项对光电子角分布的影响. 因此, 系统地研究非偶极项对光电子角分布的影响以及电偶极近似的适用范围是十分必要的.

与光电离总截面不同^[11,12], 光电子角分布的计算不仅与跃迁矩阵元的振幅有关, 而且与跃迁通道的相位有关, 因此, 光电子角分布的计算对理论模型的精确度要求更高. 最近, 我们课题组基于多组态 Dirac-Fock (MCDF) 理论框架^[13-15]发展了计算原子光电离过程中产生的光电子角分布的相对论方法和计算程序, 该程序可以系统地研究复杂原子体系光电离过程中光电子角分布, 包括入射光极化性质、辐射场与电子相互作用中的多极干涉效应, 电子关联效应以及高离化态离子中相对论效应、QED 效应等对光电子角分布的影响^[13]. 本文基于该计算方法和程序, 系统地开展类 Na 离子态-态光电离过程中光电子角分布的研究, 重点讨论光电离过程中的非偶极项对光电子角分布的影响与入射光子能量、电离壳层以及靶离子离化度等因素的相关性, 我们期望目前的计算结果能够为实验测量提供理论支持.

2 理论方法

文献^[16]详细地给出了计算原子光电离过程中产生的光电子角分布理论方法, 这里仅给出主要的计算过程和计算公式.

考虑一频率为 ν 的光束与靶离子 A^{q+} 相互作用, 其光电离过程可以用下式表示

$$h\nu + A^{q+} \rightarrow A^{(q+1)+} + e_{\text{ph}}, \quad (1)$$

式中 e_{ph} 表示光电子, 取入射光方向为 Z 轴方向, 根据密度矩阵理论^[17,18]和 Racah 代数方法^[19], 可以导出的光电子角分布的一般性计算式,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma}{4\pi} \left[\sum_{k=0}^{\infty} B_k P_k(\cos \theta) - \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k(k-1)} B_k^{\varphi} P_k^2(\cos \theta)(\cos 2\varphi) \right], \quad (2)$$

式中, σ 是光电离总截面, $P_k(\cos \theta)$ 和 $P_k^2(\cos \theta)$ 分别表示勒让德多项式和缔合勒让德多项式, θ 是相

对于入射光方向的极角, φ 是相应的方位角. B_k 和 B_k^{φ} 是含有光电离通道相位信息的动力学参数, 其具体形式如下:

$$B_k = \sum_{LL'pp'} \sum_{\kappa\kappa'JJ'} (-1)^{J_f - J_0 + 1/2} \times [LL'JJ'jj'\ell\ell']^{1/2} \langle \ell 0 \ell' 0 | k 0 \rangle \times \begin{Bmatrix} j & \ell & 1/2 \\ \ell' & j' & k \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j & J & J_f \\ J' & j' & k \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J' & L' & J_0 \\ L & J & k \end{Bmatrix} \times \langle \gamma J || R || \gamma_0 J_0 \rangle \langle \gamma' J' || R || \gamma_0 J_0 \rangle^* \times \langle L1L' - 1 | k 0 \rangle [1 + (-1)^f] + P_3(1 - (-1)^f), \quad (3)$$

$$B_k^{\varphi} = \sum_{LL'pp'} \sum_{\kappa\kappa'JJ'} (-1)^{J_f - J_0 + 1/2} \times [LL'JJ'jj'\ell\ell']^{1/2} \langle \ell 0 \ell' 0 | k 0 \rangle \times \begin{Bmatrix} j & \ell & 1/2 \\ \ell' & j' & k \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j & J & J_f \\ J' & j' & k \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J' & L' & J_0 \\ L & J & k \end{Bmatrix} \times \langle \gamma J || R || \gamma_0 J_0 \rangle \langle \gamma' J' || R || \gamma_0 J_0 \rangle^* \times (-1)^{p'} \langle L1L'1 | k 2 \rangle \left[\frac{k(k-1)}{(k+2)(k+1)} \right]^{1/2} \times P_1[1 + (-1)^f], \quad (4)$$

式中, $J(J')$ 表示光电离系统的总角动量, $\ell(\ell')$ 和 $j(j')$ 分别表示光电子的轨道角动量和总角动量, $J_0(J_f)$ 表示靶离子初(末)态总角动量, $L(L')$ 表示辐射场的多极展开, $\gamma(\gamma')$ 是确定量子态的其他量子数, $f = L + L' + p + p' - k$, $P_{1,3}$ 是描述光子极化性质的 Stokes 参数. 约化矩阵元中的 $R = \sum_{i=1}^N \alpha_i \mathbf{u}_\lambda e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}$ 是电子在辐射场下的跃迁算符, 具体可以采用如下的多极展开的形式:

$$\mathbf{u}_\lambda e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} = \sqrt{2\pi} \sum_L \sum_{p=0,1} i^L \sqrt{2L+1} (i\lambda)^p A_{L\lambda}^p, \quad (5)$$

其中, $\lambda = \pm 1$ 为光子的螺旋度, $A_{L\lambda}^{(e,m)} \equiv A_{L\lambda}^{p=1,0}$ 表示电(磁)多极辐射场.

从(3)式和(4)式可以看出, B_k 来自非极化光和圆极化光的贡献, B_k^{φ} 来自线极化光的贡献. 需要指出的是, 计算(2)式中的 B_k^{φ} 做了归一化处理, 即在电偶极的贡献占主导的情况下, B_k 和 B_k^{φ} 的数值相等. 例如, 对于 $k=2$ 的纯电偶极贡献, 有

$$P_2(\cos \theta) - \frac{1}{2} P_2^2(\cos \theta)(\cos 2\varphi)$$

$$= -2P_2(\cos \theta). \quad (6)$$

令 $\beta = -2B_2(E1E1)$, 从而可以得到电偶极近似下光电子角分布的表达式

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma}{4\pi}(1 + \beta P_2 \cos \theta). \quad (7)$$

类似地, 当 k 的值取到 4 时, 可以得到二级非偶极近似下光电子角分布的参数化计算式 [20,21]:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma}{4\pi} [& 1 + (\beta + \Delta\beta)P_2(\cos \theta) \\ & + (\delta + \gamma \cos^2 \theta) \sin \theta \cos \varphi \\ & + \eta P_2(\cos \theta) \cos 2\varphi + \mu \cos 2\varphi \\ & + \xi(1 + \cos 2\varphi)P_4(\cos \theta)]. \end{aligned} \quad (8)$$

(6) 式和 (8) 式中的 θ 是相对于入射光极化方向的极角; φ 是相应的方位角; $P_2(\cos \theta)$ 和 $P_4(\cos \theta)$ 分别表示二阶和四阶勒让德多项式, 与光电离过程的几何关系有关; $\beta, \delta, \gamma, \xi, \Delta\beta, \eta$ 和 μ 是光电子角分布参数, 反映了光电离过程中的动力学信息, 它们与 B_k 和 B_k^φ 的具体关系式已在文献 [16] 中给出.

值得指出的是, 光电子角分布的计算 (2) 式包括辐射场与电子相互作用展开中所有项的贡献, 可

以处理任意极化性质的入射光, 任意复杂原子或者高电荷态离子的任意壳层光电子角分布, 具有较为广泛的应用前景.

3 光电子角分布的计算

3.1 B_k 和 B_k^φ 参数的理论计算

从光电子角分布的计算表达式 (2) 可以看出, B_k 和 B_k^φ 参数是光电子角分布的关键性参数, 它包含了光电子角分布的所有动力学信息. 首先, 利用我们课题组近期开发的用于计算光电子角分布的程序 [16], 具体计算了不同入射光子能量下类钠离子 3s 和 2p 子壳层光电子的角分布的动力学参数 B_k 和 B_k^φ . 据我们所知, 目前仅有光电子能量为 $v/c = 0.4$ 时类钠钡的数据可以参考, 表 1 中给出了类钠钡离子 3s 子壳层光电子角分布的 B_k 和 B_k^φ 参数, 第一行是本文计算的结果, 第二行是文献 [22] 的结果, 第三行是两者的绝对差. 从表中可以看出, 本文的计算结果与文献 [22] 的结果符合得很好, 验证了本文计算方法和计算程序的可靠性.

表 1 类钠离子 3s 子壳层光电子角分布 B_k 和 B_k^φ 参数
Table 1. B_k and B_k^φ parameters of 3s photoelectron distribution of sodium-like Ba^{45+} ions.

	B_1	B_2	B_2^φ	B_3	B_3^φ	B_4	B_4^φ
Ours	0.672	-0.725	-0.940	-0.607	-0.653	-0.260	-0.265
Ref. [22]	0.673	-0.707	-0.947	-0.584	-0.662	-0.247	—
Diff.	0.001	0.018	0.007	0.023	0.009	0.013	—

3.2 偶极和非偶极参数的理论计算

实验上, 虽然不能直接测量光电子角分布的 B_k 和 B_k^φ 参数, 但 (8) 式中偶极和非偶极参数是可以测量的. 利用文献 [16] 中 B_k 和 B_k^φ 参数与 (8) 式中参数的对应关系, 可以进一步得到类 Na 离子 3s 和 2p 子壳层光电子角分布的偶极和非偶极参数.

图 1—图 3 分别给出了类 Na 离子 3s 和 2p 子壳层光电子角分布的电偶极参数、一级非偶极参数以及二级非偶极参数随核电荷数的变化关系.

图 1 给出了态-态光电离过程中 3s 和 2p 光电子角分布的 β 参数与靶离子核电荷数 Z 的变化关系, 根据文献 [16] 的 (14) 式可知, β 参数来自纯电

偶极贡献, 因此 β 也称为电偶极参数. 从图 1 可以看出, 类钠等电子系列离子体系 ($20 \leq Z \leq 92$), s 子壳层的 β 参数值在较低的光电子动能下 ($v/c = 0.1$) 为 1.9 左右, 在较高的光电子动能下 ($v/c = 0.1$) 为 1.75 左右, 且随核电荷数的增加, 基本保持不变; p 子壳层随核电荷数的增加而变大, 低能时, 从 1 逐渐增加到 1.4—1.6, 在高能时, 从 0 增加到 1.2, 这说明 p 壳层的非偶极效应比 s 子壳层明显, 且随着核电荷数和入射光子能量的增加, p 子壳层非偶极效应变强. s 和 p 子壳层光电子角分布的 β 参数随核电荷数变化规律的差异可能是由两者的电子云分布不同导致的, s 壳层呈球对称性分布, 而 p 壳层是纺锤形分布.

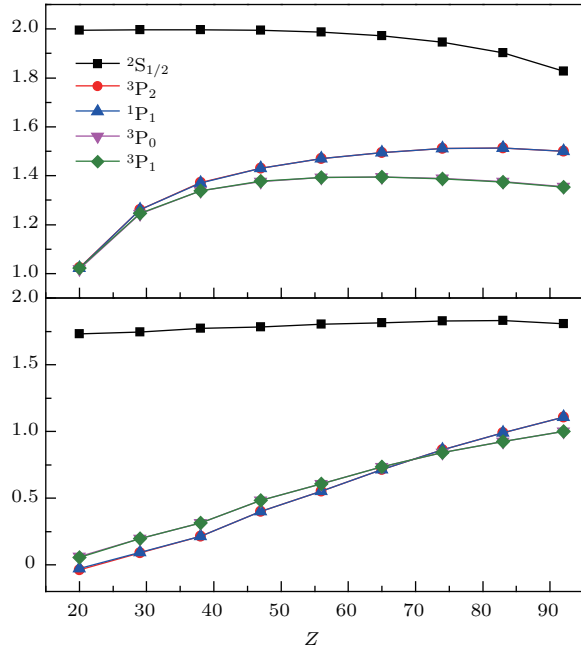


图1 (网刊彩色) 类钠离子 3s 和 2p 光电子角分布电偶极参数 (上图 $v/c = 0.1$, 下图 $v/c = 0.4$)

Fig. 1. (color online) Electric dipole parameters of the photo-electron angular distribution for Na-like ions. Upper panel with the photo-electron energy at $v/c = 0.1$, bottom panel with the photo-electron energy at $v/c = 0.4$.

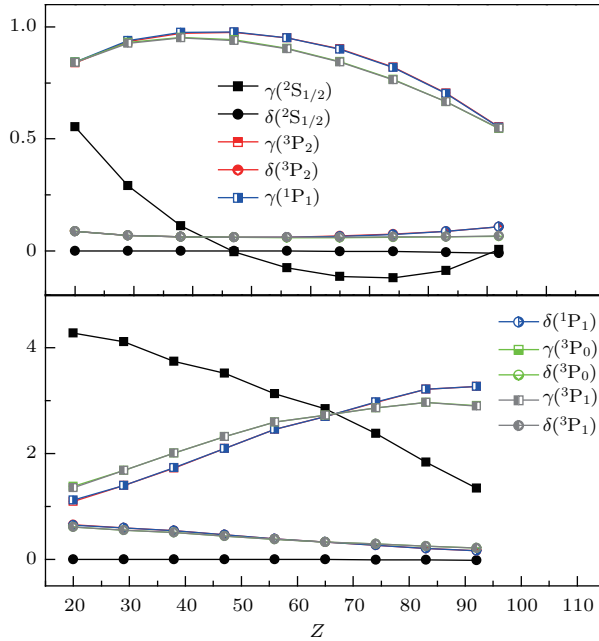


图2 (网刊彩色) 类钠离子 3s 和 2p 光电子一级非偶极参数 (上图 $v/c = 0.1$, 下图 $v/c = 0.4$)

Fig. 2. (color online) Same as the Fig. 1 expect for the first order non-dipole parameters.

图2给出了态-态光电离过程产生的 3s 和 2p 光电子角分布的 γ 和 δ 参数与靶离子核电荷数 Z 的变化关系, 根据文献[16]的 (16) 和 (17) 式可知, δ 参

数来自磁偶极 M1 以及电四极 E2 与电偶极 E1 之间的干涉效应, γ 参数来自电四极 E2 与电偶极 E1 之间的干涉效应, 通常将 δ 和 γ 参数称为一级非偶极参数. 从图2中可以看出, γ 参数比 δ 参数对靶离子核电荷数敏感性更强, 如随核电荷数的增加, 低能时 s 子壳层光电子角分布的 γ 参数先减小再增大, p 子壳层先增大再减小, 高能时 s 子壳层光电子角分布的 γ 参数随核电荷数增大而减小, p 子壳层光电子角分布的 γ 参数随核电荷数增大而增大, 这说明在低能时, 电四极 E2 项对光电子角分布的影响与核电荷数之间的关系是非单调的, 而高能时, 是单调的, 我们分析认为这是由于在低能时光电子的动能较小, 与靶态离子之间相互作用较强, 而高能时, 光电子具有足够的动能脱离靶离子的影响导致的; 同时我们发现 δ 参数整体偏小, 尤其对于 s 子壳层, 其 δ 参数近似为零, 但是, 从光电子角分布的计算 (8) 式可以看出, δ 与 $\gamma \cos^2 \theta$ 直接相加, 因此, 在具体计算时 δ 仍然是不可以忽略的.

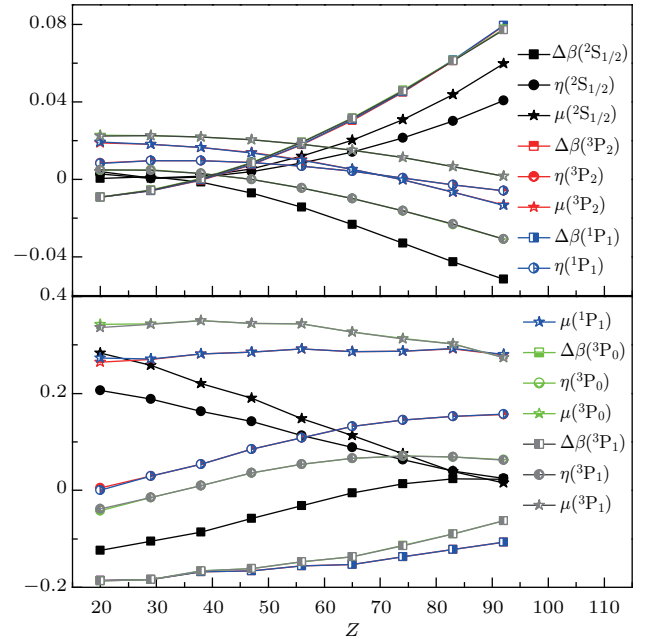


图3 (网刊彩色) 类钠离子 3s 和 2p 光电子二级非偶极参数 (上图 $v/c = 0.1$, 下图 $v/c = 0.4$)

Fig. 3. (color online) Same as the Fig. 1 expect for the second order non-dipole parameters.

图3给出了态-态光电离过程产生的 3s 和 2p 光电子角分布的二级非偶极参数 $\Delta\beta$, η 和 μ 及其与靶电子核电荷数 Z 的变化关系, 根据文献[16]的 (19) 式可知, ξ 来自纯的电四极项 E2 以及电偶极 E1 和电八极 E3 之间的干涉项, $\Delta\beta$ 比 ξ 多了纯的磁偶极项 M1 以及电四极 E2 和磁偶极 M1 干涉项的

贡献, 而 η 和 μ 参数在 $\Delta\beta$ 的基础上, 又多了电偶极E1和磁四极M2干涉项的贡献, 这些参数通常被称为二级非偶极参数. 因为 $\xi = -\eta - \mu$, 因此图3中并没有给出 ξ 的结果. 与图2比较, 可以看出二级非偶极参数普遍比一级非偶极参数小一个数量级, 这是由于二级非偶极参数来自辐射场与电子相互作用展开式中更高阶项的干涉贡献. s子壳层光电电子角分布的二级非偶极参数随着靶离子核电荷数的变化规律较为一致, 低能时, s子壳层光电电子的二级非偶极参数的数值随着 Z 的增加而增大, 高能时, s光电电子的二级非偶极参数的值随着 Z 的增加减小; p子壳层光电电子角分布的各个二级非偶极参数随着靶离子核电荷数的变化规律各不相同, 低能光子入射时, 随着靶离子核电荷数的增加, p子壳

层光电电子的 $\Delta\beta$ 增大, η 和 μ 减小, 高能光子入射时, $\Delta\beta$ 减小, η 增大, μ 基本保持不变. 与电偶极参数 β 类似, s和p子壳层光电电子角分布的二级非偶极参数随核电荷数变化规律的差异性, 可能来源于s子壳层电子云呈球对称性分布, 而p壳层是纺锤形分布.

3.3 类Na离子光电电子的角分布

利用第2节中计算的光电子角分布偶极和非偶极参数, 我们进一步给出类Na离子3s和2p光电电子的角分布, 为了展示光电离过程中辐射场与电子相互作用的非偶极项对光电子角分布的影响, 分别给出了电偶极近似下的结果以及包括到二级非偶极项之后的结果.

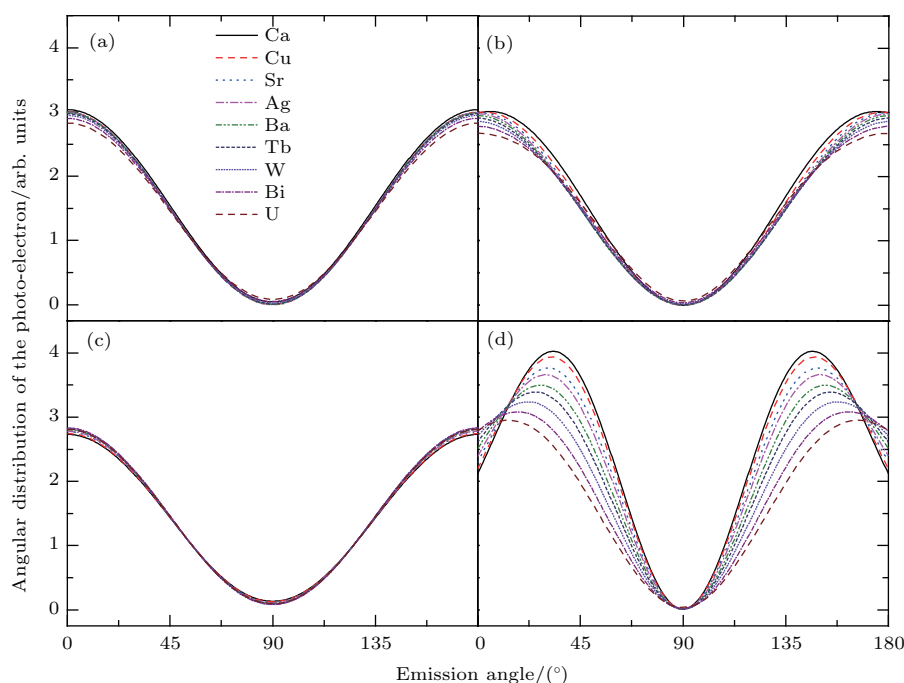


图4 (网刊彩色) 类Na离子3s光电电子角分布 (a) $v/c = 0.1$, 电偶极近似; (b) $v/c = 0.4$, 电偶极近似; (c) $v/c = 0.1$, 包括非偶极项; (d) $v/c = 0.4$, 包括非偶极项

Fig. 4. (color online) Photoelectron angular distribution of 3s in sodium-like ions: (a) PE energy at $v/c = 0.1$, dipole approximation; (b) PE energy at $v/c = 0.1$, non-dipole effects have been included; (c) PE energy at $v/c = 0.4$, dipole approximation; (d) PE energy at $v/c = 0.4$, non-dipole effects have been included.

图4给出了类Na离子3s光电电子的角分布情况, 其中图4(a)和图4(b)表示光电电子动能为 $v/c = 0.1$ 的情况, 图4(c)和图4(d)表示光电电子动能为 $v/c = 0.4$ 的情况, 左列的两幅图是仅考虑电偶极近似下的光电电子分布, 右列的两幅图是包括到二级非偶极项之后的光电电子分布. 可以看出, 在电偶极近似下, 入射光子能量、靶离子核电荷数对

光电电子角分布轮廓的影响不大, 而考虑非偶极项之后, 不同核电荷数的靶离子光电电子角分布轮廓出现分离, 且随着入射光子能量的增加差异变得更大; 从光电电子角分布强度来看, 如果仅考虑电偶极近似, 光电电子角分布在 90° 方向出现极小值, 在 0° 和 180° 方向出现极大值, 即此时光电电子沿着入射光的极化方向做对称分布, 且在极化方向光电电子

分布极大, 入射光方向分布极小, 而考虑非偶极项之后, 在低能时, 光电子角分布仍按照这个规律分布, 但高能时光电子角分布在 90° 方向出现极小值, 而极大值出现在 45° 和 135° 附近, 即光电子不再沿着入射光极化方向做对称分布, 而是沿着入射光方向做前向不对称分布, 这种不对称分布来源于非偶极效应, 且随着原子序数的增加而变弱, 这一点与图 1 的分析结果一致.

类 Na 离子 2p 子壳层电子被电离之后, 靶离子

产生 3P_2 , 3P_1 , 3P_0 和 1P_1 四个末态离子态, 由于这四个态的角分布差别不大, 因此在图 5 中仅给出了 3P_2 末态的光电子角分布情况. 其中图 5(a) 和图 5(c) 是电偶极近似下的结果, 图 4(b) 和图 4(d) 是考虑非偶极项之后的光电子角分布. 从图中可以看出, 与 3s 子壳层光电子角分布不同, 无论是否考虑非偶极项, 靶离子的核电荷数对 p 壳层光电子角分布的轮廓均有较大的影响, 且这种差异随着入射光子能量的增加而增大.

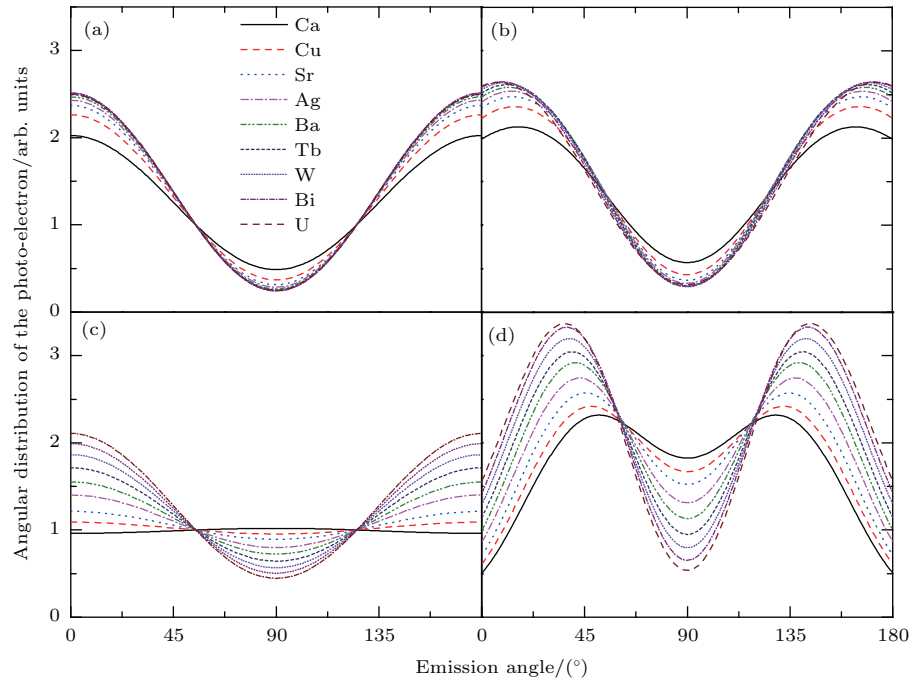


图 5 (网刊彩色) 与图 4 类似的类 Na 离子 2p (光电离末态为 3P_2) 光电子角分布

Fig. 5. (color online) Same as the Fig. 4. expect for 2p (3P_2) in sodium-like ions.

在光电子动能为 $v/c = 0.4$ 时, 如果仅考虑电偶极近似, 低离化度的靶离子 p 子壳层光电子近似各向同性分布, 尤其在 $Z = 20$ 时, 光电子角分布呈现反常分布, 即光电子在入射光子方向附近散射分布最大, 在入射光子极化方向散射分布极小, 考虑非偶极项之后, 这种光电子的反常分布消失, 仍然在入射光子方向散射分布极小. 同时我们还发现, 非偶极项明显地加强了光电子的各向异性分布.

4 总 结

本文在我们基于密度矩阵理论和 MCDF 方法基础上开发的计算光电子角分布的方法和计算程序的基础上, 系统地开展了类钠离子光电离过程中

产生的光电子角分布的计算研究, 具体计算了类钠离子 ($20 \leq Z \leq 92$) 3s, $2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 子壳层光电子的角分布的电偶极、一级非偶极和二级非偶极参数, 基于这些参数分别给出了电偶极近似下和包括非偶极项之后的角分布. 重点讨论了辐射场与电子相互作用过程中非偶极项对光电子角分布的影响与靶原子的核电荷数、电离壳层以及入射光子能量的关系.

结果表明, 非偶极项对光电子角分布的影响与靶离子离化度、被电离电子的壳层以及入射光子能量等因素有关. 具体地, 非偶极项对 s 壳层的影响比对 p 壳层影响小, 较低能量的光子入射时, 非偶极项对 s 和 p 子壳层光电子角分布的影响随着靶离子核电荷数的增大而增大, 而高能时, 非偶极项

对光电子角分布的影响随着靶离子的原子序数的增大而增减小; 另外, 我们还发现, 光电子能量在 $v/c = 0.4$ 时, 如果仅考虑电偶极近似, 低 Z 离子 p 子壳层光电子几乎是各向同性分布, 随着 Z 的增加, 逐渐地过度到各向异性分布. 在 $Z = 20$ 时, p 子壳层的光电子出现了反常分布, 即光电子角分布在入射光子方向分布最大, 这与光电子分布的一般规律不相符, 而考虑非偶极项之后, 光电子角分布出现明显的各向异性的特点, 且反常分布消失, 光电子分布的极大值在 45° 和 135° 附近, 即沿着入射光方向做前向散射分布. 这些规律为进一步深入研究原子光电子角分布的一般规律以及为解释相关实验提供一定的理论参考.

参考文献

- [1] Jablonski A, Powell C J 2015 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **199** 27
- [2] Ricz S, Buhr T, Kövér Á, Holste K, Borovik A, Schippers S, Varga D, Müller A 2014 *Phys. Rev. A* **90** 013410
- [3] Ma K, Dong C Z, Xie L Y, Qu Y Z 2014 *Chin. Phys. Lett.* **31** 103201
- [4] Ma K, Dong C Z, Xie L Y, Ding X B, Qu Y Z 2014 *Chin. Phys. Lett.* **31** 053201
- [5] Guillemin R, Hemmers O, Lindle D W, Manson S T 2006 *Radiat. Phys. Chem.* **75** 2258
- [6] Schmidt V 1992 *Rep. Prog. Phys.* **55** 1483
- [7] Krässig B, Jung M, Gemmell D S, Kanter E P, LeBrun T, Southworth S H, Young L 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 4736
- [8] Jung M, Krässig B, Gemmell D S, Kanter E P, LeBrun T, Southworth S H, Young L 1996 *Phys. Rev. A* **54** 2127
- [9] Hemmers O, Fisher G, Glans P, Hansen D L, Wang H, Whitfield S B, Wehlitz R, Levin J C, Sellin I A, Perera R C C, Dias E W B, Chakraborty H S, Deshmukh P C, Manson S T, Lindle D W 1997 *J. Phys. B* **30** L727
- [10] Holste K, Borovik A A, Buhr T, Ricz S, Kövér Á, Bernhard D, Schippers S, Varga D, Müller A 2014 *J. Phys. Confer. Ser.* **488** 022041
- [11] Ma K, Xie L Y, Zhang D H, Dong C Z 2015 *Chin. Phys. B* **24** 073402
- [12] Li C Y, Han X Y, Wang J G, Qu Y Z 2013 *Chin. Phys. B* **22** 123201
- [13] Grant I P 1970 *Adv. Phys.* **19** 747
- [14] Jönsson P, He X, Fischer C F, Grant I P 2007 *Comput. Phys. Commun.* **177** 597
- [15] Fritzsche S 2012 *Comput. Phys. Commun.* **183** 1525
- [16] Ma K, Xie L Y, Zhang D H, Dong C Z, Qu Y Z 2016 *Acta Phys. Sci.* **65** 083201 (in Chinese) [马堃, 颀录有, 张登红, 董晨钟, 屈一至 2016 物理学报 **65** 083201]
- [17] Blum K 2012 *Density Matrix Theory and Applications* (Vol. 3) (Berlin: Springer) pp61–162
- [18] Balashov V V, Grum-Grahimailo A N, Kabachnik N M 2000 *Polarization and Correlation in Atomic Collisions* (New York: Kluwer Academic/Plenum) pp45–97
- [19] Rose M E 1957 *Elementary Theory of Angular Momentum* (New York: Wiley) pp32–94
- [20] Derevianko A, Hemmers O, Oblad S, Glans P, Wang H, Whitfield B, Wehlitz R, Sellin I A, Johnson W R, Lindle D W 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2116
- [21] Jablonski A 2013 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **189** 81
- [22] Scofield J H 1989 *Phys. Rev. A* **40** 3054

Non-dipole effects in the angular distributions of photoelectrons on sodium-like ions^{*}

Ma Kun^{1)†} Xie Lu-You²⁾ Zhang Deng-Hong²⁾ Jiang Jun²⁾ Dong Chen-Zhong^{2)‡}

1) (School of Information Engineering, Huangshan University, Huangshan 245041, China)

2) (Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics and Functional Materials of Gansu Province, College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

(Received 28 August 2016; revised manuscript received 24 November 2016)

Abstract

Photoionization processes widely exist in the astrophysical plasma and the high temperature laboratory plasma. Compared with the traditional photoelectron energy spectrum, the photoelectron angular distribution is not only related to the amplitude of the photoionization channels, but also sensitive to the phases of these channels. So the photoelectron angular distribution contains much more quantum information about the photoionization processes and is used to provide stringent tests of our understanding of basic physical processes underlying gas- and condensed-phase interaction with radiation, as well as a tool to probe physical and chemical structure in solids and surfaces. For a long time, the dipole approximation has been the basis in the study of the photoelectron angular distribution, but with the progress of light source, such as the fourth generation synchrotron facilities, more and more attention is paid to the non-dipole effect of the photoelectron angular distribution. In this present work, the photoionization processes of sodium-like ions ($20 \leq Z \leq 92$) are studied for the different incident photon energies based on the multiconfiguration Dirac-Fock method and the density matrix theory. The influences of the non-dipole terms on the photoelectron angular distributions, which arise from the multipole expansion of the electron-photon interaction, are discussed in detail. The relationship between the dipole and non-dipole parameters of the photoelectron angular distribution along with the atomic number is given. It is found that the influence of non-dipole terms on the photoelectron angular distribution is related to the incident photon energy and the atomic number of the target ion and the subshell of the ionized electron. In general, the influences of the non-dipole terms on the photoelectron angular distribution of p subshell are larger than those of the s subshell. In the electric dipole approximation, the s subshell photoelectron angular distribution is nearly independent of the photon energy and nuclear charge number, but this situation is not for the p subshell. With the increase of photon energy, an abnormal angular distribution is found for the p subshell photoelectron. However, if the non-dipole effects are included, the abnormal photoelectron angular distribution of p subshell disappears and the photoelectron distribution has maximum values respectively near 45° and 135° with respect to the polarization vector of incident light, that is, the photoelectron distribution has an obvious forward scattering characteristic.

Keywords: sodium-like ion, the angular distribution of photoelectron, non-dipole effects

PACS: 32.80.Fb, 33.60.+q

DOI: 10.7498/aps.66.043201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11274254, U1332206, U1331122, 11464042, 11564036), the Key Project for Young Talents in College of Anhui Province, China (Grant No. gxyqZD2016301), the Natural Science Research Project of Anhui Province, China (Grant No. KJHS2015B01), and the Natural Science Research Project of Huangshan University, China (Grant No. 2016xskq003).

† Corresponding author. E-mail: makun@hsu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn