

氖原子光电子角分布的理论计算

马堃 颀录有 张登红 董晨钟 屈一至

Theoretical calculation of the photoelectron angular distribution of neon

Ma Kun Xie Lu-You Zhang Deng-Hong Dong Chen-Zhong Qu Yi-Zhi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 083201 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.083201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.083201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I8>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

氢负离子在少周期激光场中解离时的干涉效应

Interference effect in the photodetachment from H ion in a few-cycle laser pulse

物理学报.2016, 65(8): 083202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.083202>

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>

NaLi 分子飞秒含时光电子能谱的理论研究

Theoretical study of the influence of femtosecond pump-probe pulse on the photoionization of NaLi molecule

物理学报.2014, 63(2): 023302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.023302>

椭圆偏振激光脉冲驱动的氩原子非次序双电离

The nonsequential double ionization of argon atoms with elliptically polarized laser pulse

物理学报.2012, 61(20): 203201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.203201>

氦原子光电子角分布的理论计算*

马堃¹⁾²⁾ 颀录有²⁾ 张登红²⁾ 董晨钟^{2)†} 屈一至³⁾

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)

3)(中国科学院大学材料科学与光电技术学院, 北京 100049)

(2015年11月22日收到; 2016年1月28日收到修改稿)

本文利用密度矩阵理论和Racah代数推导出了光电子角分布的一般计算公式,并在多组态Dirac-Fock方法基础上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程序,利用该程序对氦原子2s和2p光电子角分布的偶极和非偶极参数进行了具体计算,所得结果与已有文献具有很好的一致性.在此基础上,本文讨论了光子与电子相互作用多级展开中的非偶极项以及入射光的极化性质对光电子角分布的影响.

关键词: 光电子, 角分布, 非偶极效应, 极化

PACS: 32.80.Fb, 33.60.+q

DOI: 10.7498/aps.65.083201

1 引言

光电离过程是光与原子相互作用的基本过程之一,广泛存在于天体等离子体和实验室高温等离子体环境中,是原子物理学的重要研究课题之一^[1,2].近年来,随着同步辐射和自由电子激光等先进光源的发展,以及角分辨实验测量技术的进步,人们对原子光电离过程中产生的光电子角分布给予了更多的关注.光电子角分布不仅与光电离通道振幅有关,而且与通道相位联系密切.因此,与传统的光电子能谱相比^[3],光电子角分布所携带的光电离碰撞动力学过程的量子信息更为全面,这些信息不仅可以作为甄别光电离过程量子力学通道的探针,还可以作为揭示辐射场与气相、固相物质相互作用的物理机理以及研究固体和材料表面的物理、化学性质的重要工具^[4].

长期以来,人们一直认为在入射光子能量小于5000 eV时,电偶极近似足以描述光电子角分布^[5-10].然而,新的实验结果不断揭示出低能光

子入射时光电子角分布呈现出非偶极效应.1995年,Krässig等^[11]在美国阿贡国家实验室的APS平台上,测量了光电子能量在30—2000 eV范围内Ar原子1s光电子角分布,结果表明,在光子入射方向上,光电子的前向和后向散射分布不对称,在阈值附近,以后向散射为主;随着能量的增加,前向散射逐渐加强,表明非偶极效应对光电子角分布的影响与入射光子能量密切相关.1996年,Jung等^[12]测量了光子能量在2—3 keV范围内Ar原子K壳层和Kr原子L壳层光电子的角分布,揭示了非偶极项的贡献与靶核电荷数、光电子的壳层以及入射光子能量之间的关系.1997年,Hemmers等^[13]在ALS光源上测量了Ne原子2s和2p光电子角分布,发现入射光子在250—1200 eV范围时有明显的非偶极效应的贡献.对偶极近似采取一级非偶极修正后,2s光电子角分布与实验测量符合得很好,但2p光电子仍然与实验有差别;同年,Dias^[14]采用相对论随机相位近似(RRPA)对这一差别进行了分析,认为是电子关联效应的影响.2000年,Derevianko

* 国家自然科学基金(批准号: 11274254, U1332206, U1331122, 11464042, U1330117)、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: dongcz@nwnu.edu.cn

等^[15]对 Hemmers 的实验又进行了细致的分析,指出 Ne 原子 2p 光电子角分布的非偶极效应中,除了电四极的一级非偶极修正项外,还有更高的电八极贡献. 2014 年, Holste 等^[16]在德国汉堡的 DORIS III 同步辐射装置上,测量了 93.1 eV 光子入射时 Kr 原子 4p 光电子的角分布,同样观察到了电八极的贡献. 综上所述,人们在越来越低的入射光子能量下观察到了越来越高阶的非偶极项对光电子角分布的贡献,且非偶极效应与靶核电荷数和被电离电子的壳层之间都有着密切的关系^[17]. 因此,从理论上系统地研究非偶极效应对光电子角分布的影响,不仅对实验工作的开展具有重要的指导意义,而且有助于人们揭示光与原子相互作用中的高阶物理效应.

目前,理论上对光电子角分布的研究较为缺乏. 就我们所知,还没有基于多组态 Dirac-Fock (MCDF) 方法计算光电子角分布的工作报道. 事实上,在对复杂原子体系光电离过程的研究中,除了需要充分考虑电子之间的关联效应、shake up 等效应外^[18,19],对高电荷态离子还需要进一步考虑相对论效应和 QED 效应. 而 MCDF 方法恰好在处理这些效应方面具有优势,因而是研究原子光电离产生的光电子角分布的理想方法.

本文在 MCDF 理论框架下^[20],利用密度矩阵理论^[21]和 Racah 代数方法^[22]给出了原子光电子角分布的计算公式,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程序,以中性 Ne 原子为例,详细计算了不同壳层的光电子角分布,重点讨论了光电离过程中光子与电子相互作用的多级展开项中非偶极项及入射光的极化性质对光电子角分布的影响.

2 光电子角分布的相对论理论

2.1 光电子角分布的计算公式

原子光电离过程可以表示为

$$\begin{aligned} & \hbar\omega|pL\rangle + A^{q+}|\alpha_0 J_0 M_0\rangle \\ & \longrightarrow A^{(q+1)+}|\alpha_d J_d M_d\rangle + e_{\text{ph}}|\alpha\ell j\rangle, \end{aligned} \quad (1)$$

式中,左边表示系统的初态 $|\gamma_i J_i M_i\rangle$,由入射光子 $\hbar\omega|pL\rangle$ 和靶离子 $A^{q+}|\alpha_0 J_0 M_0\rangle$ 组成;右边表示系统的末态 $|\gamma J M\rangle$,由剩余离子 $A^{(q+1)+}|\alpha_d J_d M_d\rangle$ 和光电子 $e_{\text{ph}}|\alpha\ell j\rangle$ 组成. 其中 $J(J_i)$ 表示系统末态(初态)的总角动量, $M(M_i)$ 表示系统末态(初态)的总

角动量在 Z 轴方向的投影, $\gamma(\gamma_i)$ 表示描述末态(初态)的其他量子数, pL 表示辐射场的多极性质, $p=1$ 为电多极, $p=0$ 为磁多极.

根据密度矩阵理论^[21],光电子角分布可以写成系统末态密度算符和测量效率算符乘积的迹,即

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = c \sum_{\gamma\gamma' J J' k q} \rho_{kq}^f(\gamma J, \gamma' J') \varepsilon_{kq}^*(\gamma J, \gamma' J'), \quad (2)$$

式中, c 为正规化常数, $\rho_{kq}^f(\gamma J, \gamma' J')$ 是系统末态的统计张量, $\varepsilon_{kq}(\gamma J, \gamma' J')$ 为系统末态的测量效率张量. 在只关注光电子的角分布情况下,测量效率张量可以写成

$$\begin{aligned} & \varepsilon_{kq}(\gamma J, \gamma' J') \\ & = (-1)^{j'+J+k+J_f} [J J']^{1/2} \begin{Bmatrix} j & J & J_f \\ J' & j' & k \end{Bmatrix} \\ & \quad \times \varepsilon_{kq}(\ell j, \ell' j') \delta_{\gamma_f \gamma'_f} \delta_{J_f J'_f}, \end{aligned} \quad (3)$$

式中, $\varepsilon_{kq}(\ell j, \ell' j')$ 是电子的测量效率张量,它可以进一步表示为

$$\varepsilon_{kq}(\ell j, \ell' j') = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} Y_{kq}^*(\theta, \varphi) c_{k0}(\ell j, \ell' j'), \quad (4)$$

其中, θ 为光电子的动量与入射光的夹角,也称为极角; φ 是相应的方位角; $c_{k0}(\ell j, \ell' j')$ 是光电子在自身坐标系下的几何因子,可以表示为

$$\begin{aligned} & c_{k0}(\ell j, \ell' j') \\ & = \frac{(-1)^{j'+1/2}}{4\pi} \hat{j} \hat{j}' \hat{\ell} \hat{\ell}' \langle \ell 0 \ell' 0 | k 0 \rangle \begin{Bmatrix} j & \ell & 1/2 \\ \ell' & j' & k \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (5)$$

根据宇称守恒和 C-G 系数 $\langle \ell 0 \ell' 0 | k 0 \rangle$ 的对称性要求,如果仅考虑光子与电子相互作用中的电偶极贡献,则 k 只能取偶数;如果考虑非偶极贡献, k 可以是偶数,也可以是奇数,但 $\ell + \ell' + k$ 必须是偶数^[22].

在(2)式中,系统末态的统计张量为

$$\begin{aligned} & \rho_{kq}^f(\gamma J, \gamma' J') \\ & = \sum_{\gamma_i \gamma'_i} \frac{\rho_{kq}^i(\gamma_i J_i, \gamma'_i J'_i)}{[J J']^{1/2}} \langle \gamma J || R || \gamma_0 J_0 \rangle \\ & \quad \times \langle \gamma' J' || R || \gamma'_0 J'_0 \rangle^*. \end{aligned} \quad (6)$$

对于确定的靶态,量子数是确定的,即 $\gamma'_0 J'_0 = \gamma_0 J_0$. 上式中,

$$R = \sum_{i=1}^N \alpha_i \mathbf{u}_\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}$$

是电子在辐射场下的跃迁算符, 取入射光方向为 Z 轴, 跃迁算符可展开为

$$\mathbf{u}_\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} = \sqrt{2\pi} \sum_L \sum_{p=0,1} i^L \sqrt{2L+1} (i\lambda)^p A_{L\lambda}^p, \quad (7)$$

式中, $A_{L\lambda}^{(e)} \equiv A_{L\lambda}^{p=1}$ 和 $A_{L\lambda}^{(m)} \equiv A_{L\lambda}^{p=0}$ 分别表示电多极和磁多极辐射场, $\lambda = \pm 1$ 为光子的螺旋度. $\rho_{kq}^i(\gamma_i J_i, \gamma_i' J_i')$ 是初态系统的统计张量, 可以写成靶离子和入射光子统计张量的函数, 即

$$\begin{aligned} & \rho_{kq}^i(\gamma_i J_i, \gamma_i' J_i') \\ &= \sum_{k_0 q_0 k_\gamma q_\gamma} [k_0 k_\gamma J J']^{1/2} \langle k_0 q_0 k_\gamma q_\gamma | k q \rangle \\ & \quad \times \begin{Bmatrix} J_0 & L & J \\ J_0 & L' & J' \\ k_0 & k_\gamma & k \end{Bmatrix} \rho_{k_0 q_0}(\gamma_0 J_0) \rho_{k_\gamma q_\gamma}, \quad (8) \end{aligned}$$

式中的 $[a \cdots b]$ 表示 $(2a+1) \cdots (2b+1)$, 代入 (6) 式, 可得

$$\begin{aligned} & \rho_{kq}^f(\gamma J, \gamma' J') \\ &= \sum_{\gamma_i \gamma_i' k_0 q_0 k_\gamma q_\gamma} [k_0 k_\gamma]^{1/2} \langle k_0 q_0 k_\gamma q_\gamma | k q \rangle \begin{Bmatrix} J_0 & L & J \\ J_0 & L' & J' \\ k_0 & k_\gamma & k \end{Bmatrix} \\ & \quad \times \langle \gamma J || R || \gamma_0 J_0 \rangle \langle \gamma' J' || R || \gamma_0 J_0 \rangle^* \\ & \quad \times \rho_{k_0 q_0}(\gamma_0 J_0) \rho_{k_\gamma q_\gamma}, \quad (9) \end{aligned}$$

其中, $\rho_{k_\gamma q_\gamma}$ 为光子的统计张量, $\rho_{k_0 q_0}(\gamma_0 J_0)$ 为靶离子初态的统计张量.

结合以上公式, 光电子的角分布可以用如下简洁的形式给出,

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{\sigma}{4\pi} \left[\sum_{k=0}^{\infty} B_k P_k(\cos\theta) - \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k(k-1)} B_k^f \right. \\ & \quad \left. \times P_k^2(\cos\theta)(\cos 2\varphi) \right]. \quad (10) \end{aligned}$$

(10) 式在形式上与文献 [23] 中给出的相同, 但是由于本文的计算公式是在多电子模型下导出的, 因此更加普遍, 具体的差别体现为 B_k 和 B_k^f 参数的表示形式不同, 本文表示如下:

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

$$\begin{aligned} & \times \langle \gamma J || R || \gamma_0 J_0 \rangle \langle \gamma' J' || R || \gamma_0 J_0 \rangle^* \\ & \quad \times \langle L 1 L' - 1 | k 0 \rangle \\ & \quad \times [1 + (-1)^f + P_3(1 - (-1)^f)]. \quad (11) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_k^f &= \sum_{LL'pp' \kappa\kappa' JJ'} (-1)^{J_f - J_0 + 1/2} [LL'JJ'jj'\ell\ell']^{1/2} \\ & \quad \times \langle \ell 0 \ell' 0 | k 0 \rangle \\ & \quad \times \begin{Bmatrix} j & \ell & 1/2 \\ \ell' & j' & k \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j & J & J_f \\ J' & j' & k \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J' & L' & J_0 \\ L & J & k \end{Bmatrix} \\ & \quad \times \langle \gamma J || R || \gamma_i J_i \rangle \langle \gamma' J' || R || \gamma_i' J_i' \rangle^* \\ & \quad \times (-1)^{p'} \langle L 1 L' 1 | k 2 \rangle \left[\frac{k(k-1)}{(k+2)(k+1)} \right]^{1/2} \\ & \quad \times P_1 [1 + (-1)^f]. \quad (12) \end{aligned}$$

其中, $f = L + L' + p + p' - k$, $P_{1,2,3}$ 是描述光子极化性质的 Stokes 参数. 本文给出的光电子角分布计算公式具有一般性, 它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, 而且可以包括光子与电子相互作用展开中所有项的贡献.

2.2 B 参数与实验测量参数的对应关系

实验室中, 通过测量不同角度下光电子的分布情况, 可以得到相关的电偶极和非偶极参数. 下面将本文导出的光电子角分布公式中 B 参数与实验上用于研究光电子角分布的参数化公式中偶极和非偶极参数进行对应.

1) 电偶极近似 ($E1$) 下, 角分布的参数化公式可以写成 [15,24]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma}{4\pi} (1 + \beta P_2(\cos\theta)), \quad (13)$$

式中 θ 是光电子动量与入射光极化方向的夹角. 可以看出, 在电偶极近似下, 除了光电离截面外, 光电子的角分布由唯一的动力学参数 β 决定, β 称为电偶极参数, 通过复杂的公式演算并与 (10) 式对比, 可以得到下面的对应关系

$$\beta = 2B_2(E1E1), \quad (14)$$

上式表明电偶极参数 β 完全来自电偶极项的贡献.

2) 在一级非偶极修正下, 角分布的参数化公式可以写成 [15,24]

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{\sigma}{4\pi} [1 + \beta P_2(\cos\theta) \\ & \quad + (\delta + \gamma \cos^2\theta) \sin\theta \cos\varphi], \quad (15) \end{aligned}$$

其中, δ 和 γ 称为一级非偶极参数, 经过复杂的公式演算并与 (10) 式对比, 可以得到下面的对应关系

$$\delta = B_1(E1M1) + B_1(E1E2) + B_3(E1E2), \quad (16)$$

$$\gamma = -5B_3(E1E2), \quad (17)$$

以上推导过程用到了关系式 $B_3(E1E2) = B_3^\varphi(E1E2)$, 可以看出, δ 参数来自 $E1$ 和 $M1$ 之间的干涉以及 $E1$ 和 $E2$ 之间的干涉, γ 参数来自 $E1$ 和 $E2$ 之间的干涉.

3) 在二级非偶极修正下, 角分布的参数化公式可以写成 [15,24]

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma}{4\pi} [& 1 + (\beta + \Delta\beta)P_2(\cos\theta) \\ & + (\delta + \gamma \cos^2\theta) \sin\theta \cos\varphi \\ & + \eta P_2(\cos\theta) \cos 2\varphi + \mu \cos 2\varphi \\ & + \xi(1 + \cos 2\varphi)P_4(\cos\theta)], \quad (18) \end{aligned}$$

其中, $\Delta\beta$, η , μ 和 ξ 称为二级非偶极参数, 经过复杂的公式演算并与 (10) 式对比, 可以得到下面的对应关系

$$\begin{aligned} \Delta\beta = & -\frac{3}{4}B_2(E1E3) + B_2(E2E2) \\ & + B_2(M1M1) - B_2(E2M1), \quad (19a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta = & -\frac{2}{3}B_2(E1M2) - \frac{5}{12}B_2(E1E3) \\ & - B_2(E2E2) - \frac{5}{6}B_4(E2E2) \\ & - \frac{5}{6}B_4(E1E3) - B_2(M1M1) \\ & - \frac{1}{3}B_2(E2M1), \quad (19b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mu = & \frac{2}{3}B_2(E1M2) + \frac{5}{12}B_2(E1E3) \\ & + B_2(E2E2) - \frac{1}{6}B_4(E2E2) \\ & - \frac{1}{6}B_4(E1E3) + B_2(M1M1) \\ & + \frac{1}{3}B_2(E2M1), \quad (19c) \end{aligned}$$

$$\xi = B_4(E2E2) + B_4(E1E3), \quad (19d)$$

以上推导过程用到了关系式

$$B_2(E1E3) = 6B_2^\varphi(E1E3),$$

$$B_4(E1E3) = B_4^\varphi(E1E3),$$

$$B_2(E1M2) = -3B_2^\varphi(E1M2),$$

$$B_2(E2E2) = -B_2^\varphi(E2E2),$$

$$B_4(E2E2) = B_4^\varphi(E2E2),$$

$$B_2(M1M1) = -B_2^\varphi(M1M1),$$

$$B_2(E2M1) = 3B_2^\varphi(E2M1),$$

$$B_2(E1M2) = 3B_2^\varphi(E1M2),$$

从 (19) 式可以看出

$$\eta + \mu + \xi = 0. \quad (20)$$

因此, 虽然在 (18) 式中引入了 4 个二级非偶极参数, 但实际上只有 3 个参数是独立的.

3 中性 Ne 原子的光电子角分布

在以上计算公式的基础上, 结合基于 MCDF 方法的 GRASP2K [25] 和 RATIP [26] 程序包, 进一步开发了用于计算原子光电子角分布的程序代码, 并利用该程序, 具体对 Ne 原子的 2s 和 2p 壳层光电离产生的光电子角分布进行了计算.

3.1 Ne 原子 2s 和 2p 光电子角分布的偶极和非偶极参数

图 1 和图 2 中给出了光电子能量在 60—5000 eV (光电子能量 = 光子能量 - 电离势) 范围内 Ne 原子 2s 和 2p 光电子角分布的电偶极参数 β , 一级非偶极参数 δ 和 γ , 以及二级非偶极参数 $\Delta\beta$, η , μ 和 ξ . 为了验证本文推导的公式和编写程序的可靠性, 图中还给出了文献 [23] 在独立粒子近似下的计算结果.

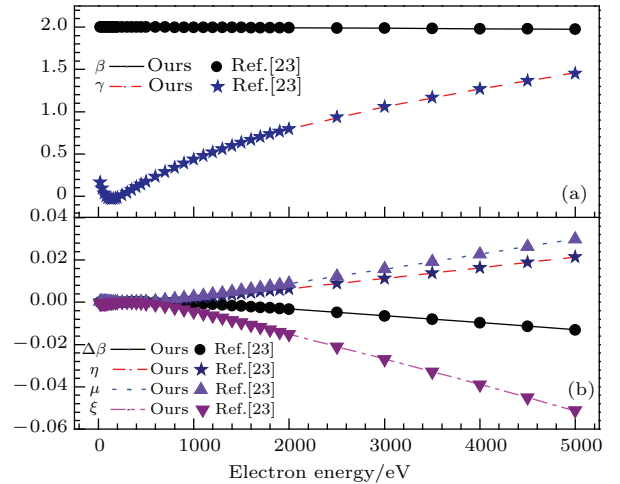


图 1 (网刊彩色) Ne 原子 2s 光电子偶极和非偶极参数, 其中线形是本文结果, 离散点是文献 [23] 结果

Fig. 1. (color online) Dipole and non-dipole parameters of the photo-electron angular distribution for Ne 2s. The line shape and the dot shape represent the results of this calculations and the Ref. [23], respectively.

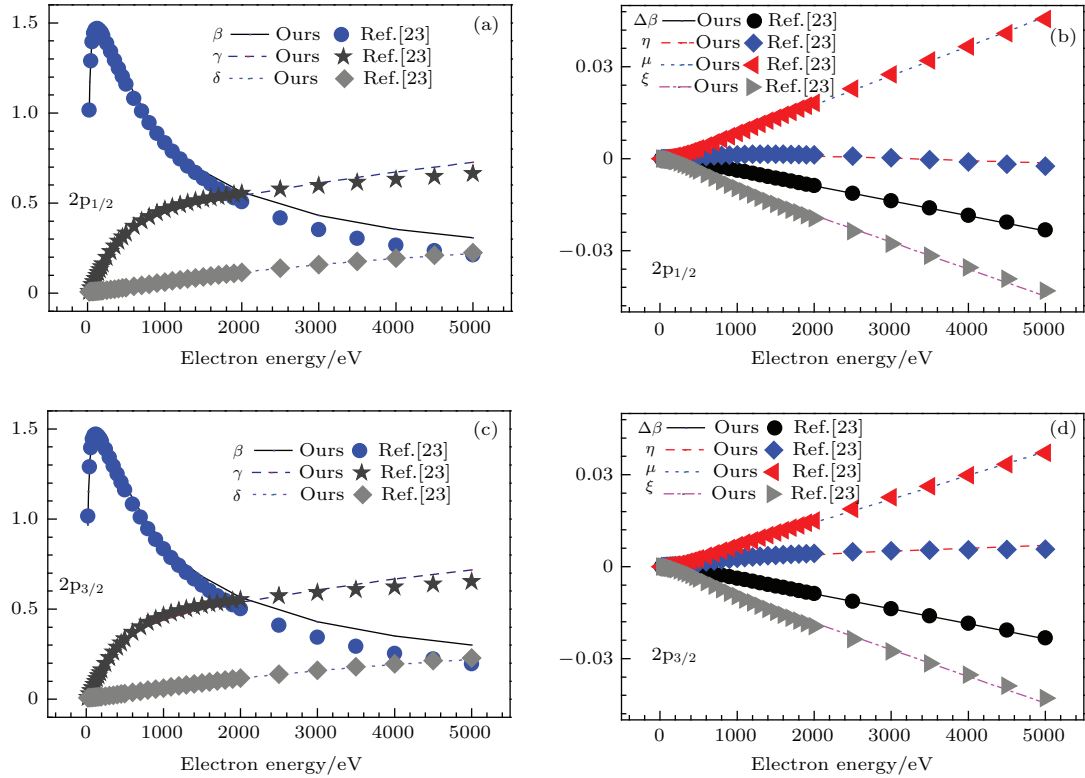


图2 (网刊彩色) Ne原子2p光电子偶极和非偶极参数, 其中线形是本文结果, 离散点是文献[23]结果
 Fig. 2. (color online) Dipole and non-dipole parameters of the photo-electron angular distribution for Ne 2p. The line shape and the dot shape represent the results of this calculations and the Ref. [23], respectively.

从图1和图2可以看出: 2s光电子的偶极参数 β 在60—5000 eV能量范围内基本保持不变, 其值接近2, 这与非相对论的计算结果一致[27]; 而2p光电子的 β 值随着光子能量的增加, 先增加到1.5, 接着迅速减小, 且 $2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 光电子的变化规律类似, 这说明对于Ne原子的光电子角分布, 相对论效应可以忽略不计; 2s和2p的 γ 参数随着能量的增大逐渐增加, 但在所研究的能量范围内, 2s光电子 γ 参数始终小于 β 参数, 而对于2p光电子, 当光电子能量大于2000 eV时, γ 参数大于 β 参数的数值, 表明非偶极效应对2p光电子角分布的贡献大于2s光电子的贡献. 需要说明的是, 由于2s电子的 δ 参数比 β 和 γ 参数小很多, 因此图1中没有给出 δ 参数; 二级非偶极参数随着光子能量的增加近似地按照线性变化, η 和 μ 大于零, $\Delta\beta$ 和 ξ 小于零. 在本文所研究的能量范围内, 二级非偶极参数比一级非偶极参数小一个量级, 可以忽略不计. 但根据图中偶极参数和二级非偶极参数的变化趋势, 可以预计当光子能量足够高时, 二级非偶极效应会对光电子角分布产生很大影响. 另外, 我们还看到一个有趣的现象, 在阈值附近, 2s电子 γ 参数有一个极小值, 而2p电子的 γ 参数却是单调变化, 这也表明非偶极效

应对不同壳层的影响具有选择性.

3.2 Ne原子2s和2p光电子的角分布

为了展示非偶极效应和入射光子能量对光电子角分布的影响, 图3—图5分别给出了Ne原子2s, $2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 光电子在600和5000 eV两个能量点下光电子角分布(对 $\sigma/4\pi$ 归一)的二维极坐标图, 实线“DA”表示电偶极近似下的结果, 虚线“NDA1”表示包括一级非偶极效应后的结果, 点线“NDA2”表示包括二级非偶极效应后的结果; 极坐标 0° 方向表示光子的极化方向, 90° 方向表示光子的入射方向, $\varphi = 0^\circ$ 表示在同步平面内观察, 即在光子的入射方向与极化方向所构成的平面内观察, $\varphi = 90^\circ$ 表示在偶极平面内观察, 即在垂直于同步平面的平面内观察.

从图3中可以看出, 2s光电子关于入射光方向呈现左右对称分布, 且主要分布在极化方向上, 在入射光方向上没有任何的光电子分布. 在同步平面内, 即图3(a)和(b), 随着光子能量的增加, 包括非偶极效应的光电子在入射光方向的前向分布逐渐加强, 从而导致前向和后向出现不对称分布, 光电子能量在5000 eV时, 可以观察到明显的非偶极效

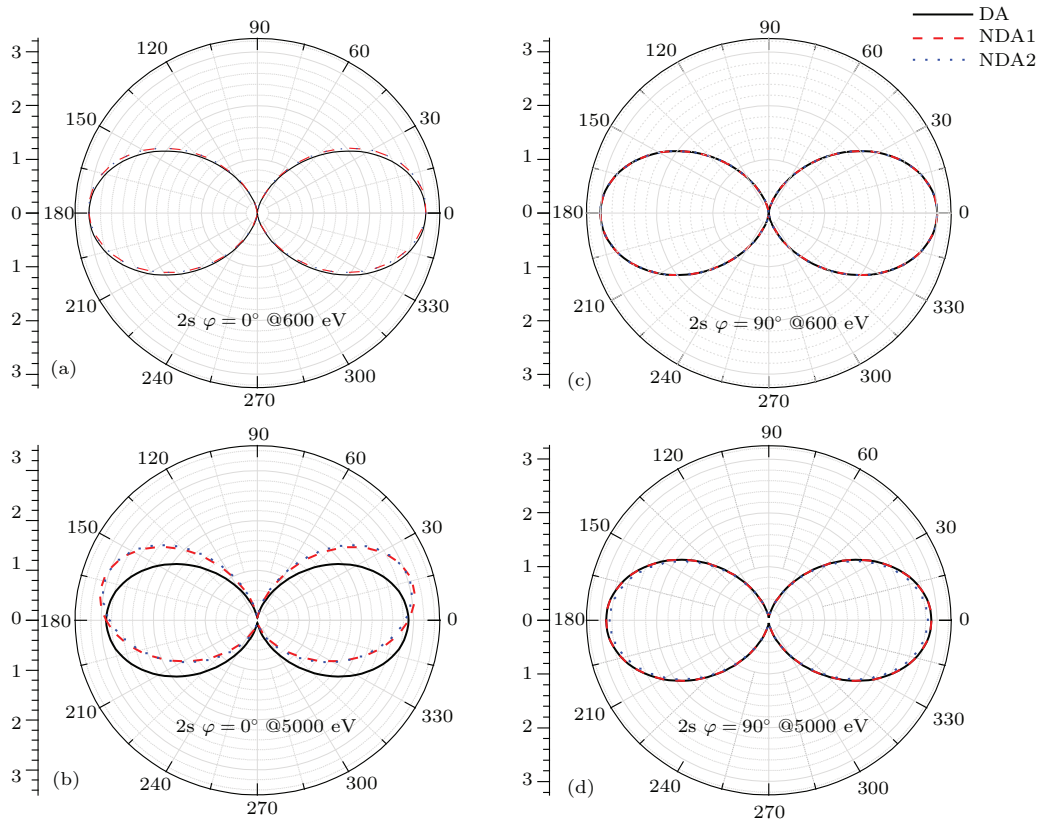


图3 (网刊彩色) Ne原子2s光电子角分布

Fig. 3. (color online) Polar plot of the calculated Ne 2s photoelectron angular distributions.

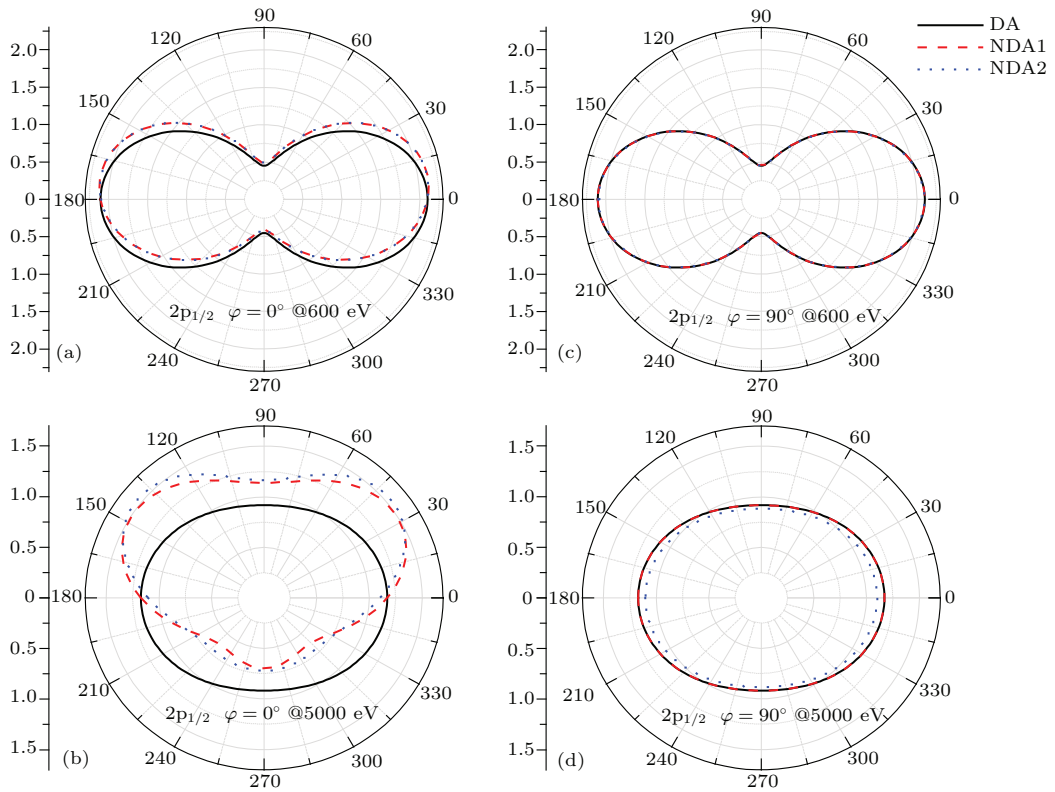


图4 (网刊彩色) Ne原子2p_{1/2}光电子角分布

Fig. 4. (color online) Polar plot of the calculated Ne 2p_{1/2} photoelectron angular distributions.

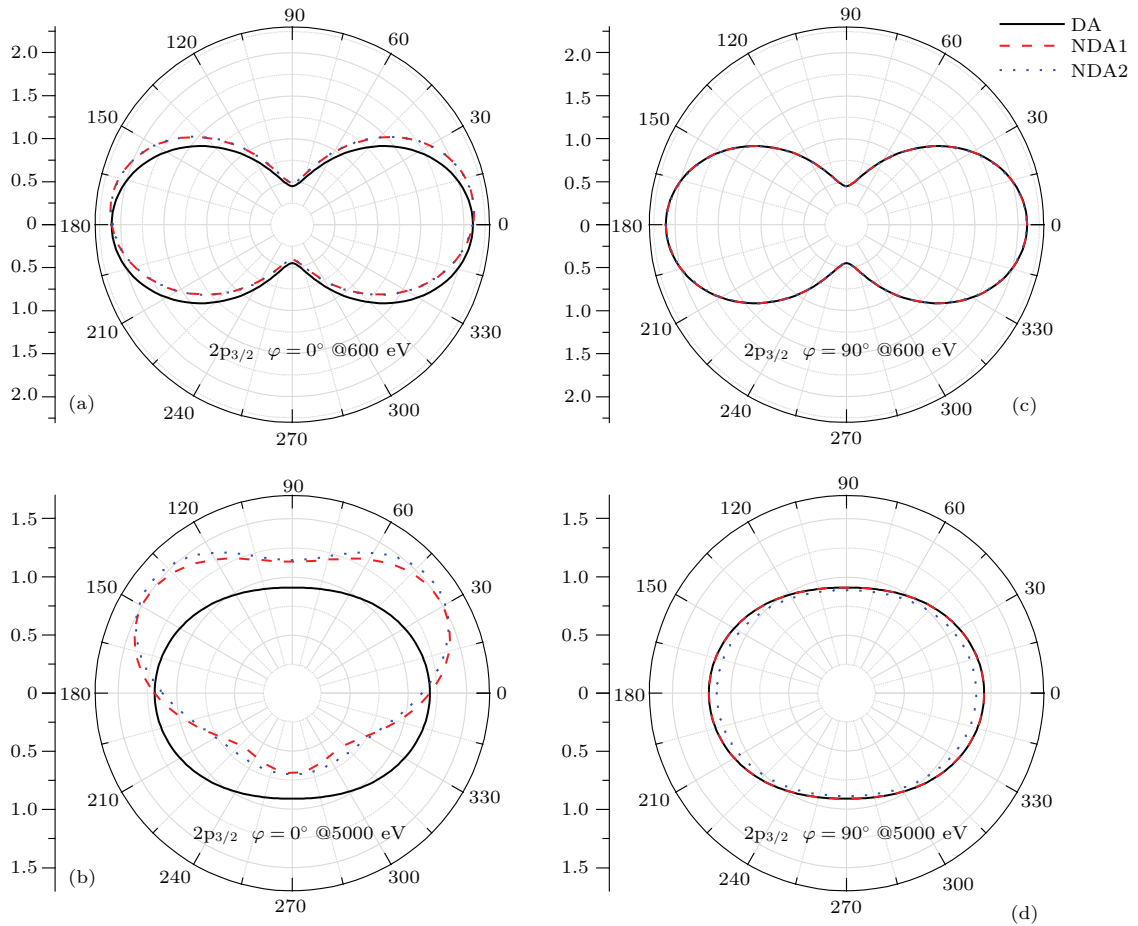


图5 (网刊彩色) Ne原子 $2p_{3/2}$ 光电子角分布

Fig. 5. (color online) Polar plot of the calculated Ne $2p_{3/2}$ photoelectron angular distributions.

应贡献; 在偶极平面内, 即图3(c)和(d), 没有观察到一级非偶极效应对光电子角分布的影响, 随着入射光子能量的增加, 二级非偶极效应的贡献逐渐加强. 此现象可以从(18)式得到解释, 当 $\varphi = 90^\circ$ 时, $\cos \varphi = 0$, 与一级非偶极项有关的 $(\delta + \gamma \cos^2 \theta) \sin \theta \cos \varphi = 0$. 因此, 在偶极平面内, 非偶极效应全部来自二级非偶极项贡献, 这一性质为实验上测量二级非偶极参数提供了一个有效的途径.

图4和图5分别给出了Ne原子 $2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 光电子角分布情况. 可以看出, $2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 光电子角分布具有相似的特点, 但与2s光电子角分布有所不同. $2p$ 光电子在光子入射方向和极化方向均有电子分布, 且随着入射光子能量的增加, 光子入射方向上的光电子分布逐渐加强. 此外, 入射光子能量对偶极近似下的光电子角分布也有较大影响, 如在600 eV时, 光电子角分布呈现“8”字形, 在5000 eV时, 光电子角分布呈现椭圆形, 而2s光电子没有这样的变化. 本文认为这是由于光子能量对

$2p$ 光电子的 β 参数影响很大, 而对2s光电子的 β 参数影响小导致的.

3.3 入射光极化性质对光电子角分布的影响

同步辐射光源除了具有高强度、能量连续可调等优点外, 还具有良好的极化性质, 普通实验室的激光光源也可以产生极化性质的光束. 光束的极化性质会改变光电子的运动路径, 从而导致光电子角分布谱的形状发生改变. 下面进一步研究入射光的极化性质对光电子角分布的影响.

本文分别计算了入射光非极化和极化两种情况下, 光电子能量为600和5000 eV时Ne原子2s和 $2p$ 光电子角分布情况, 计算中包括了二级非偶极效应的贡献, 结果在图6中给出.

其中, 图6(a)是2s光电子角分布, 图6(b)是 $2p$ 光电子角分布($2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 光电子角分布加权), $P = 0$ 表示非极化入射光, $P = 1$ 表示线性极化入射光, 实心圆和实心三角形是光电子能量为

600 eV 下的结果, 空心圆和空心三角形是光电子能量为 5000 eV 下的结果, 极坐标的 0° 表示入射光方向. 从图中可以看出, 入射光的极化性质极大地加强了光电子相对于入射光前向和后向的不对称性分布, 但不改变关于左、右对称的分布, 这一性质与非偶极效应类似; 此外, 入射光的极化性质会使光电子空间分布强度整体加强. 因此, 在对实验中所测量的光电子角分布谱进行分析时, 应该充分考虑入射光极化导致的光电子在各个方向分布强度的变化.

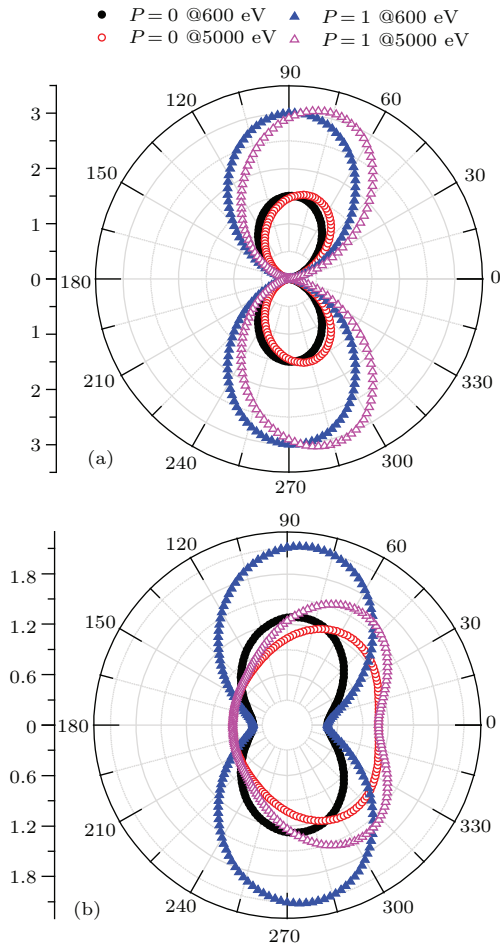


图6 (网刊彩色) Ne原子 (a) 2s 和 (b) 2p 光电子角分布, $P = 0$ 表示非极化入射光, $P = 1$ 表示线性极化入射光
Fig. 6. (color online) Polar plot of the calculated Ne (a) 2s and (b) 2p photoelectron angular distributions. Unpolarized and linearly polarized incident photons are considered as well as $P = 0$ and $P = 1$.

4 总 结

本文利用密度矩阵理论方法和 Racah 代数方法, 导出了原子光电离产生的光电子角分布一般计算公式; 结合目前国际上最先进的计算原子结构、跃迁和动力学性质的 GRASP2K 和 RATIP 程序包,

发展了计算原子光电离光电子角分布的 RPI-E 程序; 利用 RPI-E 程序, 对中性原子和高电荷态离子光电子的角分布进行了研究; 讨论了非偶极效应、入射光子能量、光电离壳层以及入射光的极化性质对光电子角分布的影响.

具体地, 通过对中性 Ne 原子 2s 和 2p 光电子角分布的研究表明, 非偶极效应和入射光的极化性质打破了光电子关于入射光极化方向对称分布的性质, 使光电子相对入射光的方向产生前向的不对称分布; 但非偶极效应的影响对壳层具有选择性, 如对 2s 壳层的影响小, 对 2p 壳层的影响大, 而入射光的极化性质对壳层没有这种选择性, 对 2s 和 2p 壳层光电子角分布的影响相似.

参考文献

- [1] Ma K, Dong C Z, Xie L Y, Qu Y Z 2014 *Chin. Phys. Lett.* **31** 103201
- [2] Ma K, Dong C Z, Xie L Y, Ding X B, Qu Y Z 2014 *Chin. Phys. Lett.* **31** 053201
- [3] Sang C C, Ding X B, Dong C Z 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 3624
- [4] Guillemin R, Hemmers O, Lindle D W, Manson S T 2006 *Radiat. Phys. Chem.* **75** 2258
- [5] Cooper J, Zare R N 1968 *J. Chem. Phys.* **48** 942
- [6] Dill D 1973 *Phys. Rev. A* **7** 1976
- [7] Walker T E H, Waber J T 1973 *J. Phys. B* **6** 1165
- [8] Chapman F M, Lohr L L 1974 *J. Am. Chem. Soc.* **96** 4731
- [9] Wuilleumier F, Krause M 1974 *Phys. Rev. A* **10** 242
- [10] Johnson W R, Radojević V, Deshmukh P, Cheng K T 1982 *Phys. Rev. A* **25** 337
- [11] Krässig B, Jung M, Gemmell D S, Kanter E P, LeBrun T, Southworth S H, Young L 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 4736
- [12] Jung M, Krässig B, Gemmell D S, Kanter E P, LeBrun T, Southworth S H, Young L 1996 *Phys. Rev. A* **54** 2127
- [13] 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
- [14] Dias E W B, Chakraborty H S, Deshmukh P C, Hemmers O, Glans P, Hansen D L, Wang H, Whitfield S B, Lindle D W, Wehlitz R, Levin J C, Sellin I A, Perera R C C 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 4553
- [15] 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
- [16] 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
- [17] Amusia M Y, Baltentkov A S, Chernysheva L V, Fel'fi Z, Msezane A Z 2001 *Phys. Rev. A* **63** 052506

- [18] Ma K, Xie L Y, Zhang D H, Dong C Z 2015 *Chin. Phys. B* **24** 073402
- [19] Li C Y, Han X Y, Wang J G, Qu Y Z 2013 *Chin. Phys. B* **22** 123201
- [20] Fritzsche S 2002 *Phys. Scripta* **T100** 37
- [21] Balashov V V, Grum-Grahimailo A N, Kabachnik N M 2000 *Polarization and Correlation in Atomic Collisions* (New York: Kluwer Academic/Plenum) pp45–97
- [22] Rose M E 1957 *Elementary Theory of Angular Momentum* (New York: Wiley) pp32–42
- [23] Derevianko A, Johnson W R, Cheng K T 1999 *At. Data Nucl. Data Tables* **73** 153
- [24] Jablonski A 2013 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **189** 81
- [25] Jönsson P, He X, Fischer C F, Grant I P 2007 *Comput. Phys. Commun.* **177** 597
- [26] Fritzsche S 2012 *Comput. Phys. Commun.* **183** 1525
- [27] Nefedov V I, Yarzhemsky V G, Nefedova I S, Trzhaskovskaya M B, Band I M 2000 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **107** 123

Theoretical calculation of the photoelectron angular distribution of neon*

Ma Kun¹⁾²⁾ Xie Lu-You²⁾ Zhang Deng-Hong²⁾ Dong Chen-Zhong^{2)†} Qu Yi-Zhi³⁾

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)

3) (College of Material Sciences and Opto-electronic Technology, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

(Received 22 November 2015; revised manuscript received 28 January 2016)

Abstract

The general formula of the angular distribution of photoelectron is derived by using the density matrix theory and Racah algebra method. For comparing with the experimental data, the general formula in this paper is matched to the parametric formula and the non-dipole parameters of the photoelectron angular distribution associated with the terms of the second order for both unpolarized and polarized incident light are given explicitly. From the formula of these parameters we can see that the contribution to the non-dipole parameter is from the interference between dipole amplitude and multipole amplitude. And then, the relativistic calculation program for photoelectron angular distribution is further developed with the help of the program packages GRASP2K and RATIP which are based on the multi-configuration Dirac-Fock method. By using this program, the dipole and non-dipole angular-distribution parameters for neon 2s and 2p photoelectrons are calculated concretely. The good agreement between the results of this paper and the available theoretical data is obtained in a 50–5000 eV photoelectron-energy range studied. On this basis, the angular photoelectron distributions for neon 2s and 2p are calculated with and without considering the second non-dipole terms at the photoelectron energy $E = 600$ eV and $E = 5000$ eV, respectively. Special attention is paid to the effects of the polarization property of incident light and the non-dipole terms of photo-electron interaction on the angular distribution of photoelectrons. The results show that 1) the dipole and non-dipole parameters of the photoelectron angular distribution are sensitive to the ionized electron orbital, it can bring out considerable diversities among the photoelectron angular distributions of the different shells; 2) non-dipole effects make the photoelectron forward distribution in the direction of incident light, the polarization property of incident light will strengthen the asymmetric distribution of photoelectrons.

Keywords: photoelectron, angular distribution, non-dipole effects, polarization

PACS: 32.80.Fb, 33.60.+q

DOI: 10.7498/aps.65.083201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11274254, U1332206, U1331122, 11464042, U1330117), the Key Project for Young Talents in College of Anhui Province, China (Grant No. gxyqZD2016301), the Natural Science Research Project of the Higher Education Institutions of Anhui Province, China (Grant No. KJHS2015B01), and the Natural Science Research Project of Huangshan University, China (Grant No. 2016xskq003).

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