DOI:10.19789/j.1004-9398.2016.04.007

激光对负离子光剥离截面影响的研究*

唐田田[1]** 朱子亮[2] 姚建刚[1] 孔德斌[1] 尹登峰[1]
(1. 烟台南山学院数理部,山东 烟台 265713; 2. 潍坊科技学院基础部,山东 寿光 262700)

摘 要

利用半经典理论,计算了激光极化方向对氢负离子在金属面附近光剥离截面的影响. 结果表明,在临界能量范围内氢负离子的光剥离截面发生了较大的变化. 与激光极化方向沿 z 轴时的光剥离截面相比,截面的振荡幅度随激光极化方向与 z 轴夹角的增大而减小,振荡频率没有发生变化. 结果对于研究负离子体系在界面附近的光剥离问题具有一定的参考价值.

关键词: 光剥离截面,半经典理论,金属面,激光极化方向.
中图分类号: O562.2

1 引 言

近年来,处于高激发里德伯态的离子、原子和分子的光剥离和光吸收问题引起了人们的广泛关注. 早期实验和理论表明当有外场存在时,氢负离子的光剥离截面中包含一系列的振荡结构[1]. 1987年,Bryant等人研究了氢负离子在均匀电场中的光剥离[2]. 后来许多研究人员又研究了氢负离子在其他外场中的光剥离[3-4]. 最近,杨光参等人在原有均匀电场的基础上加上一个弹性界面,研究了处于均匀电场和一个弹性界面旁的氢负离子的光剥离[5]. 在杨光参等人的研究中,他们把界面考虑为一个弹性界面并且忽略了电子与界面之间的相互作用,认为电子与界面的碰撞为弹性碰撞. 对于这种界面在理论上的分析是比较简单的. 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. 对于金属界面附近的光剥离,这里所用的方法就不再适用. 由于剥离电子会受到金属面所形成的像电荷的库仑势的影响,此时对于氢负离子光剥离的理论分析将会更复杂一些. 最近,杨光参等人又研究了氢负离子在金属面附近的光剥离. 他们仅仅讨论了激光极化方向保持不变的情况,对于方向改变时氢负离子的光剥离问题的研究还没有报导. 在本文中,利用闭合轨道理论,我们首次研究了当激光极化方向改变时金属面附近氢负离子的光剥离问题. 计算结果表明,在这种体系中氢负离子的光剥离截面与离子和金属表面距离及激光极化方向有关. 对于给定的离子和金属表面距离,随着激光极化方向与 z 轴夹角的不断增大,光剥离截面振荡的幅度不断减小,振荡的频率保持不变. 当距离不断增大时,光剥离截面振荡的幅度不断减小,振荡的频率仍保持不变. 当激光极化方向和 z 轴垂直时,光剥离截面振荡消失,此时的光剥离截面和氢负离子不存在金属面时的光剥离截面一样. 因此,我们可以通过改变激光的极化方向,对负离子在金属面附近的光剥离进行调控研究. 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提供了一定的理论指导.

2 理论方法和公式推导

2.1 体系的哈密顿量

该体系的物理模型如图1所示. 取光子极化方向为 z 轴正方向,氢负离子位于坐标原点,r 为电子到原子核的距离,金属界面垂直于 z 轴,位于 $z=-d$ 处. 在我们的研究中,把研究空间分成两个区域:(1) 原子实区域(大约为 $r\leqslant 10$a. u.),在这个区域,电子和原子实之间的库仑相互作用远远大于金属面对电子的影响,此时金属面的作用可以忽略不计;

收稿日期: 2015-11-26
* 山东省自然科学基金(批准号: ZR2014AQ022)和山东省科技发展计划项目(批准号: 2014GGX102006)资助课题
**通讯作者

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

(2) 库仑外部区域($r > 10$a. u.),在这个区域,金属面对电子的影响要远远大于库仑势对电子的影响,因此在这个区域,主要考虑金属面的作用. 当电子处于库仑外部区域时,由镜像法,金属面附近剥离电子的势能可以记为 $v = v_c + v_i$,其中,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 是剥离电子与像电子之间相互作用势能: $v_i = -\frac{1}{4(d+z)}$.

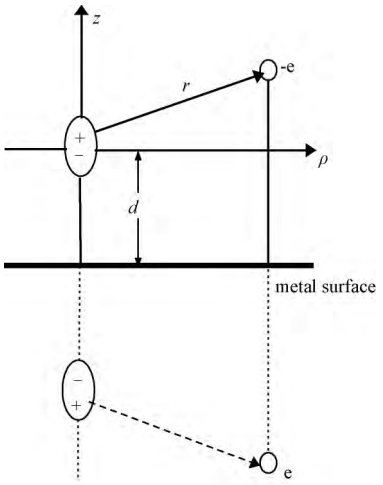


图 1 金属面附近氢负离子光剥离的物理图像

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):

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

其中,d 是离子与金属界面的距离. 这里电子与原子核以及电子与像原子核之间的短程势忽略不计[3]. $\frac{1}{4d}$ 的引入是为了保证 $v(z=0) = 0$,这样做只是为了计算和讨论的方便,对结果没有什么影响. 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:

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

其中,R 是初始球半径,θ 是剥离电子的出射角,$k = \sqrt{2E}$ 是剥离电子的动量.

2.2 体系的闭合轨道

闭合轨道理论最初是由杜孟利提出的. 该理论最初提出是为了描述处于磁场中的原子在吸收光谱中的振荡. "闭合轨道理论"是在研究"量子混沌"问题时发展的,现在用来研究处于外电磁场或其它环境中的原子或负离子从紧束缚态跃迁到一系列高激发态形成的谱.

闭合轨道理论的物理图像为: 当原子吸收了光子时,电子以电子波的形式从原子核向外传播,当电子波远离核时它的传播可以由半经典力学描述,电子波波前与经典轨道垂直,传播沿着经典轨道进行. 由于外场的作用,有一些轨道会回到核附近,这时与轨道联系的波与出射波的干涉在吸收谱中产生一个可观测的振荡.

因此可知,在没有金属界面时,剥离电子将从核附近的"源"以球面波的形式向远离核的方向传播,而且永远不返回到原子核附近. 然而,由于金属界面的存在,电子会在像电荷作用力的影响下沿闭合轨道返回到出射波源附近. 由(2)式可知只有一条闭合轨道,即电子沿着 z 轴正方向向上减速,传播到达顶点 z_{top} 后向负 z 轴传播,回到核附近,图 2 给出了电子运动的一些轨迹.

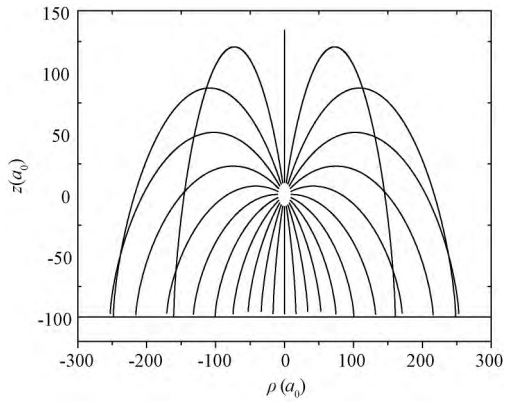


图 2 剥离电子在金属面附近的运动轨迹,H^- 和金属面之间的距离 $d = 100$a. u.

设 T 和 S 是沿 z 方向的闭合轨道的回归时间和作用量,剥离电子的出射动能 $E = \frac{k^2}{2}$,出射角为 $\theta = 0$,根据式(1),我们有

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

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

$$z_{\text{top}} = \frac{d}{1 - 4dE} - d \quad (4)$$

沿 z 方向的闭合轨道的回归时间可以由以下公式得到:

$$T = 2\int_0^{z_{\text{top}}} \frac{1}{P_z}\mathrm{d}z \quad (5)$$

整理得:

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

$$T = \frac{4d^2\sqrt{2E}}{1-4dE} + \frac{(2d)^{\frac{3}{2}}}{(1-4dE)^{\frac{3}{2}}}\arctan\sqrt{\frac{4dE}{1-4dE}} \quad 0 < E < E_C \tag{6}$$

同理,沿 z 方向的闭合轨道的作用量为

$$S = 2\int_0^{z_{\text{top}}} p_z \mathrm{d}z \tag{7}$$

整理得:

$$S = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2d}{1-4dE}}\arccos(1-8dE) - 2d\sqrt{2E} \quad 0 < E < E_C \tag{8}$$

2.3　光剥离截面的理论推导

光剥离截面可以分为两个部分

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

$\sigma_0(E)$ 是没有外场和金属面存在时的光滑项,且 $\sigma_0 = \frac{16\pi^2\sqrt{2}B^2E^{\frac{3}{2}}}{3c(E_b+E)^3}$[6],$\sigma^{\text{osc}}(E)$ 是振荡项,对应于由于干涉而在光剥离截面中产生的振荡:

$$\sigma^{\text{osc}}(E) = -\frac{4\pi}{c}(E+E_b)\,\mathrm{Im} < D\psi_i \mid \psi_{\text{ret}} > \tag{10}$$

其中,$\psi_i(\vec{q}) = B\mathrm{e}^{-k_b r}/r$ 是剥离电子的初始波函数,$E_b = k_b^2/2$ 是氢负离子对价电子的束缚能,可以取近似值 0.754 eV. $B = 0.31522$ 为归一化常数,D 为偶极算符[5]. 对于沿 z 方向的偏振光而言,$D = z$,对任意方向的极化光:

$$D = rf(\theta,\varphi;\theta_L,\varphi_L)$$

$$f(\theta,\varphi;\theta_L,\varphi_L) = \cos(\theta)\cos(\theta_L) + \sin(\theta)\times \sin(\theta_L)\cos(\varphi-\varphi_L) \tag{11}$$

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 $R \approx 10$a. u. 的球,则球面上出射波为[6]

$$\psi^0(q) = -\mathrm{i}\frac{4Bk^2}{(k_b^2+k^2)^2}\cos(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kR-\pi)}}{kR} \tag{12}$$

当波函数沿轨道在球面外传播时就会改变相位和振幅,利用半经典近似,在球面外传播的剥离电子波函数

$$\psi(q) = \sum_i \psi^0(q) A_i \mathrm{e}^{\mathrm{i}[S_i-\mu_i\pi/2]} \tag{13}$$

其中,$S_i = \int p\mathrm{d}q$ 是沿第 i 个轨道的作用量,μ_i 是 Maslov 指数,A_i 为振幅,且 $A_i(\rho,z,\varphi) = |J_i(\rho,z,0)/J_i(\rho,z,t)|^{1/2}$,$J_i(\rho,z,t)$ 是雅克比行列式. 根据剥离电子的经典运动可求得

$$A_i(\rho,z,\varphi) = \left|\frac{P_{z0}}{P_{zt_i}}\right|^{1/2}\frac{R}{R+kt_i} \tag{14}$$

其中,t_i 为电子从原点出发到回到原点所用时间,P_{z0} 为出射动能的 z 分量,而 P_{zt_i} 为 t_i 时刻的动量. 在没有金属界面时,剥离电子将从核附近的"源"以球面波的形式向远离核的方向传播,而且永远不返回到原子核附近. 然而,由于金属界面的存在,电子会在像电荷作用力的影响下沿闭合轨道返回到出射波源附近,这里只有一条闭合轨道,即电子沿着 z 轴正方向向上减速,传播到达顶点 z_{top} 后向负 z 轴传播,回到核附近,根据能量守恒定律,当剥离电子回到核附近时有 $P_{z0} = P_{zt_i}$. 当返回波到达原子核附近时,返回波可以用沿 z 方向传播的平面波来表示,即

$$(\psi)^i_{\text{ret}}(q \approx 0) = N_i \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz} \tag{15}$$

其中,N_i 是个系数,且

$$N_i = A_i \mathrm{e}^{\mathrm{i}(S_i-\pi/2)}\psi^0(q)\,(R,\theta=0) \tag{16}$$

把(9)式代入上式,得

$$N_i = i\tilde{A}_i(\rho,z,\varphi)\frac{4Bk}{(k^2+k_b^2)^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(S_i-\pi/2)} \tag{17}$$

其中,$\tilde{A}_i = \frac{1}{kt_i}$.

在原子核附近,返回波应该是所有与闭合轨道联系的波的叠加,返回波与源波函数相干涉就导致了光剥离截面中的振荡. 将以上几式代入(10)式,整理得

$$\sigma^{\text{osc}}(E) = \frac{8\pi^2B^2\sqrt{2E}}{c(E_b+E)^3T}\cos(S)\cos^2(\theta_L) \tag{18}$$

其中,T 和 S 是沿 z 方向的闭合轨道的回归时间和作用量. 将(6)式(8)式代入上式可得氢负离子在金属面时的光剥离截面为:

$$\sigma = \frac{16\pi^2\sqrt{2}B^2E^{\frac{3}{2}}}{3c(E_b+E)^3} + \frac{8\pi^2B^2\sqrt{2E}}{c(E_b+E)^3T}\cos(S)\cos^2(\theta_L) \tag{19}$$

3　计算结果和讨论

用(19)式,我们计算了氢负离子在金属面附近的光剥离截面. 图 3 给出了当氢负离子与金属面之间的距离 $d = 100$a. u.,激光极化方向与 z 轴夹角为 0 时的光剥离截面. 计算结果表明,随着入射能量的增加,光剥离截面振荡的幅度在不断减小,而振荡频率在不断增加,与激光极化方向与 z 轴夹角增大时的情况相比,光剥离截面振荡幅度增大,而振荡频率没有改变.

下面我们来分析当氢负离子与金属面之间的距离 $d = 100$a. u. 不变,激光极化方向与 z 轴夹角 θ 变化时光剥离截面的变化情况. 结果如图 4 所示,

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

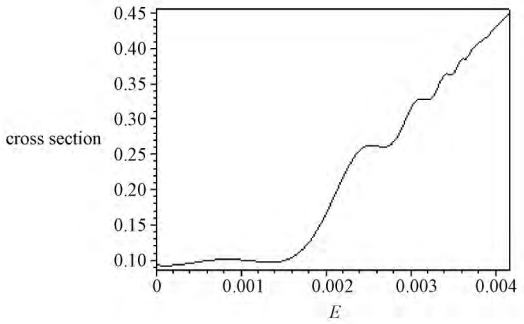


图3 光剥离截面作为能量的函数变化曲线,其中 $d=100$a. u.

(a) $\theta=0$; (b) $\theta=\frac{\pi}{4}$; (c) $\theta=\frac{\pi}{3}$; (d) $\theta=\frac{\pi}{2}$,即仅存在光滑项的情况.

结果表明: 当激光极化方向与 z 轴夹角越大时,光剥离截面的振荡幅度越小,相应的振荡频率没有变化. 如图4(b)为 $\theta=\frac{\pi}{4}$时的光剥离截面,与图4(a)相比,激光极化方向与 z 轴的夹角变大,而它的振荡幅度减小了,振荡频率没有变化. 同样,如图4(c)为 $\theta=\frac{\pi}{3}$时的情况,与图4(b)时比较可知,激光

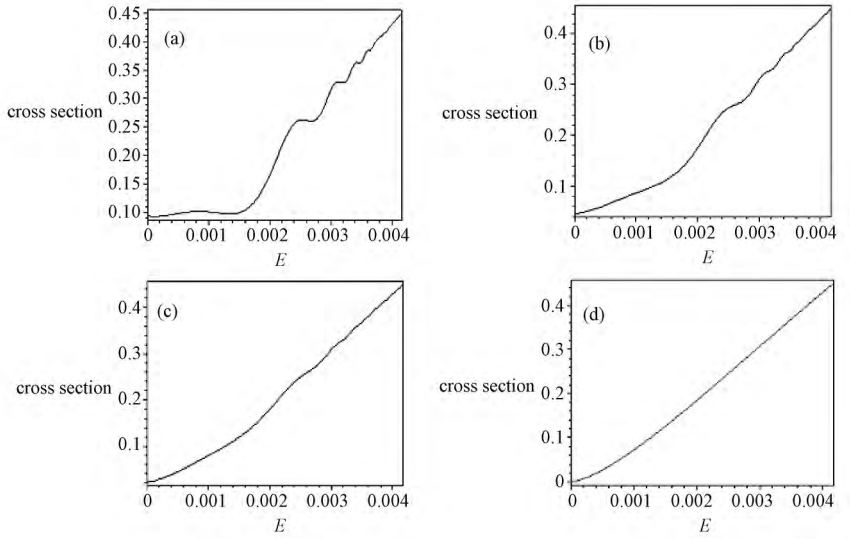


图4 激光极化方向与 z 轴夹角 θ 变化时光剥离截面图 (a) $\theta=0$; (b) $\theta=\frac{\pi}{4}$; (c) $\theta=\frac{\pi}{3}$; (d) $\theta=\frac{\pi}{2}$

极化方向与 z 轴夹角变大时,光剥离截面的振荡幅度继续减小. 特别当 $\theta=\frac{\pi}{2}$时,光剥离截面的振荡幅度为0,即光剥离截面仅剩下光滑项. 因此我们可以得到如下结论: 随着角 θ 的增大,光剥离截面振荡的幅度不断减小,振荡的频率保持不变.

由公式(6)(8)(19)及光剥离的变化图像我们可以清楚的知道: 光剥离截面 σ 是能量 E,电子与原子核距离 d 以及夹角 θ 的函数. 在保持距离 d 不变的情况,通过观察公式(19),我们可以清楚的看到激光极化方向对光剥离截面 σ 影响因素表现在振荡项. 因此,为了能够更清楚的研究激光极化方向对光剥离截面的影响. 我们单独研究一下当激光极化方向改变时,光剥离截面对应振荡项的变化图像.

下面我们来分析当氢负离子与金属面之间的距离 $d=100$a. u. 不变,当激光极化方向与 z 轴夹角 θ 变化时振荡项的变化. 结果如图5所示,(a) $\theta=0$; (b) $\theta=\frac{\pi}{4}$; (c) $\theta=\frac{\pi}{3}$; (d) $\theta=\frac{\pi}{2}$.

由图可以看出当激光极化方向与 z 轴夹角由0°变为45°时,振荡项的振幅相应的变为原来的$\frac{1}{2}$,频率未发生改变. 当激光极化方向与 z 轴夹角由0°变为60°时,振荡项的振幅相应的变为原来的$\frac{1}{4}$,频率未发生改变,同样观察图像可知夹角为45°时的振幅为60°时的两倍. 由公式(18)可知,一定能量情况下振荡项 $\sigma^{osc}(E)$ 仅是$\cos^2(\theta_L)$ 的函数,当夹角由0°变为45°时,相应的$\cos^2(\theta_L)$ 由1降为$\frac{1}{2}$,当夹角由0°变为60°时,相应的$\cos^2(\theta_L)$ 由1降为$\frac{1}{4}$,同样可得45°时$\cos^2(\theta_L)$ 的数值为60°时的两倍. 因此,光剥离截面的振幅变化是振荡项在光滑项上施加波动,即激光极化方向对光

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

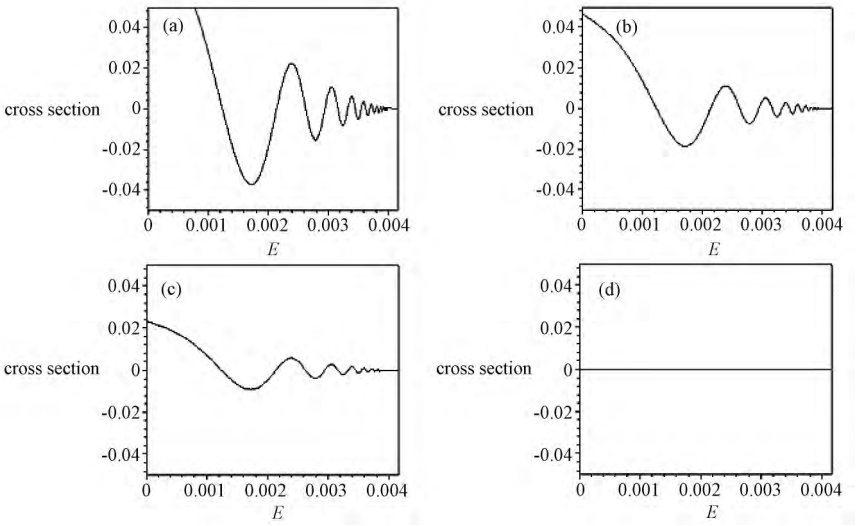


图 5　激光极化方向与 z 轴夹角 θ 变化时振荡项的图　(a) $\theta=0$; (b) $\theta=\frac{\pi}{4}$; (c) $\theta=\frac{\pi}{3}$; (d) $\theta=\frac{\pi}{2}$

剥离截面的影响主要表现在它对振荡项的影响.

4　结　语

本文研究了氢负离子在金属面附近的光剥离，给出了光剥离截面的一个解析表达式，它等于一个光滑项和一个正弦振荡项之和. 结果表明金属面与氢负离子之间的距离及激光极化方向对氢负离子的光剥离截面会产生较大的影响. 负离子在各种各样表面附近的光剥离问题备受人们关注，剥离阈附近的光剥离可以提供一个很好的自由电子的相关点源，表面可以控制电子波的传播，所以负离子在表面结构中的光剥离是值得研究的[7]. 在本文中，我们讨论了离子与金属表面的距离取恒定值时，激光极化方向的变化对光剥离截面的影响. 本研究可以对界面附近、空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].

参　考　文　献

[1] Lloyd G R, Procter S R, Softley T P. Ionization of Hydrogen Rydberg Molecules at a Metal Surface [J]. Phys Rev Lett, 2005, 95(13): 133202.

[2] Bryant H C, Mohagheghi A, Stewart J E, et al. Observation of motional-field-induced ripples in the photodetachment cross section of H^- [J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(23): 2412 – 2415.

[3] Rau A R P, Wong H Y. Electric-field-induced modulations in photodetachment [J]. Phys Rev A, 1988, 37(2): 632 – 635.

[4] Peters A D, Delos J B. Photodetachment cross section of H^- in crossed electric and magnetic fields. I. Closed-orbit theory [J]. Phys Rev A, 1993, 47(4): 3020 – 3035.

[5] Yang G C, Zheng Y Z, Chi X X. Photodetachment of H^- in a static electric field near an elastic wall [J]. Phys Rev A, 2006, 73(4): 043413.

[6] Du M L, Delos J B. Photodetachment of H^- in an electric field [J]. Phys Rev A, 1988, 38(11): 5609 – 5616.

[7] Bracher C, Delos J B. Motion of an Electron from a Point Source in Parallel Electric and Magnetic Fields [J]. Phys Rev Lett, 2006, 96(10): 100404.

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

The Effect of the Laser on the Photodetachment Cross Section of Negative Ions

Tang Tiantian[1] Zhu Ziliang[2] Yao Jiangang[1] Kong Debin[1] Yin Dengfeng[1]

(1. Department of Mathematical Physics Education, Yantai Nanshan University, Yantai Shandong 265713;
2. Department of Basic Education, Weifang University of Science and Technology, Shouguang Shandong 262700)

Abstract

By using the closed orbit theory, the effect of the laser polarization direction on the photodetachment cross section of H^- ion near a metal surface has been studied. The results show that the photodetachment cross section of H^- near the threshold has some significant change. Compared to the situation when the laser polarization direction is along the z axis, the oscillating amplitude of the photodetachment cross section decreases with the increasing of the z-axis-polarization included angle while the oscillating frequency keeps constant. Our results have certain referenced value for the photodetachment of negative ions near interface.

Key words: photodetachment cross section, closed orbit theory, metal surface, laser polarization direction.

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net