DOI:10.19789/j.1004-9398.2015.02.006

磁场对电场和金属面附近氢负离子光剥离的影响

唐田田
(烟台南山学院,山东烟台 265713)

摘 要

利用闭合轨道理论,研究了负离子在电场和金属面附近光剥离的磁场效应. 结果表明磁场对负离子在金属面附近的光剥离可以产生很重要的影响. 除了杜孟利等人在研究电场和金属面附近负离子的光剥离中发现的闭合轨道以外,还存在由于磁场的影响而产生的更多的闭合轨道. 当给定负离子到金属面的距离和电场强度之后,光剥离截面随着磁场强度的变化非常敏感. 磁场强度很小时,其影响可以忽略. 但是随着磁场强度的增大,产生的闭合轨道数目增多,导致光剥离截面中的振荡结构变得非常复杂. 因此,可以通过改变磁场的强度来调控负离子的光剥离截面. 该理论结果对于将来实验研究负离子体系在表面和外电场存在时的光剥离问题提供一定的参考.

关键词: 光剥离,闭合轨道理论,磁场效应,金属面.
中图分类号: 0562

近几年来,随着表面物理的发展,表面附近氢负离子的光剥离研究引起了人们较多的关注,结果发现表面对光剥离截面的影响非常明显[1-6]. 但是对于外场和表面都存在情况的研究并不是很多,根据闭合轨道理论,研究了氢负离子在平行电场和磁场及金属面附近的光剥离. 固定电场强度大小和离子到金属面的距离,研究了磁场对光剥离截面的影响. 结果表明,由于磁场的存在,闭合轨道的数目大大增加,光剥离截面的振荡结构与杜等人研究的情况相比变得更加复杂. 此理论结果对于将来实验研究负离子体系在表面和外场存在时的光剥离问题将起到一定的指导作用.

1 哈密顿量和闭合轨道

该体系的原理图如图1所示. 假设氢负离子在原点,金属面垂直于 z 轴并放置在 $z=-d$ 的平面,激光偏振方向也在 z 方向,外电场 F 和磁场 B 平行 z 轴. 由镜像法[7-8],体系的哈密顿量(采用柱坐标系和原子单位)可以表示为:

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

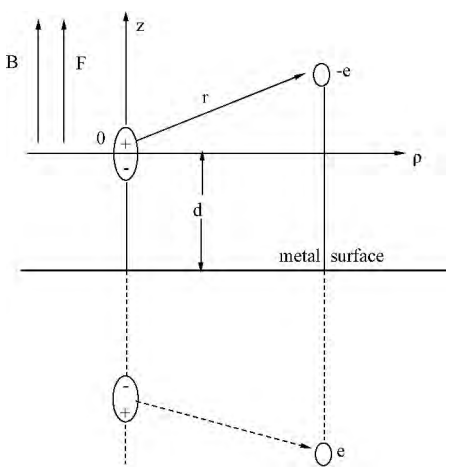


图1 平行电场和磁场及金属面附近的氢负离子光剥离的原理图

式(1)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,$V_i=\frac{1}{4(d+z)}$ 是剥离电子与像电荷之间相互作用势能,其中 $\omega_L=\frac{B}{2c}$ 是拉莫尔旋进频率,B 是磁场强度,c 是光速. $\frac{1}{4d}$ 是一个附加的常数,它的引入是为了保证 $V(z=0)=0$,对剥离

收稿日期: 2014-04-01

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

过程无影响. 由于体系的柱对称性,角动量的 z 分量为守恒量,可令其为 0.

据闭合轨道理论[3-5],在平行电场和磁场及金属面附近的氢负离子光剥离过程可以描述如下: 当氢负离子吸收光子之后,电子获得能量变成向外传播的波,当电子传播到一定距离时,电子会在电场和磁场以及像电荷的作用下回到原子核处,从而形成闭合轨道,这样沿闭合轨道传播的返回波与出射波叠加干涉,导致光剥离截面中出现振荡. 只要找到体系中所有的闭合轨道并利用闭合轨道理论就可以计算氢负离子的光剥离截面. 通过解哈密顿运动方程,得到电子在 ρ 方向的运动方程:

$$\rho(t) = \frac{1}{\omega_L} k\sin\theta_{out} \mid \sin(\omega_L t) \mid \qquad (2)$$

其中 $k = \sqrt{2E}$ 是剥离电子的动量,θ_{out} 是电子的出射角. 显然剥离电子沿 ρ 方向的运动是在磁场作用下的圆周运动,运动周期 $t^{\rho}_{ret} = j\pi/\omega_L$, $j = 1, 2\cdots$ 表示周期个数.

由式(1)得到在 z 方向的动量:

$$p_z = \sqrt{2\left(E\cos^2\theta_{out} - \frac{1}{4d} - Fz + \frac{1}{4(d+z)}\right)} \qquad (3)$$

其中 d 是氢负离子到金属面的距离. 由于外部电磁场和金属面吸引势的作用,一段时间后,电子将返回到原子核从而形成闭合轨道. z_m 是转折点,可令 p_z 为零求出. 设参数 $A = E\cos^2\theta_{out} - \frac{1}{4d}$, 则

$$z_m = \frac{1}{2F}\left[-(Fd - A) + \sqrt{(Fd + A)^2 + F}\right] \qquad (4)$$

该电子返回到 x-y 平面上的时间:

$$t^z_{ret} = 2\int_0^{z_m} \frac{1}{p_z}\mathrm{d}z \qquad (5)$$

沿 z 轴的闭合轨道的作用量:

$$S_z(E) = \int_0^{z_m} p_z \mathrm{d}z \qquad (6)$$

利用积分公式[6],积分式(5)和(6)可以表达为:

$$t^z_{ret} = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{F}}\left[\sqrt{z_m - z_n}E(\lambda,\gamma) + \frac{d + z_n}{\sqrt{z_m - z_n}}F(\lambda,\gamma)\right] \qquad (7)$$

和

$$S_z(E) = \frac{4\sqrt{2F}}{3}\{\sqrt{z_m - z_n}\left[(z_m + z_n + 2d)E(\lambda,\gamma) - (z_n + d)F(\lambda,\gamma)\right] - \sqrt{-z_m z_n d}\} \qquad (8)$$

其中 $z_n < 0$ 对应式(3)为 0 时的另一转折点,即

$$z_n = \frac{1}{2F}\left[-(Fd - A) - \sqrt{(Fd + A)^2 + F}\right] \qquad (9)$$

$F(\lambda,\gamma)$ 和 $E(\lambda,\gamma)$ 分别是第一类和第二类椭圆积分[6],两个参数被定义为:

$$\lambda = \sqrt{\frac{z_m + d}{z_m - z_n}} \qquad 0 \leqslant \lambda \leqslant 1$$

$$\gamma = \arcsin\sqrt{\frac{z_m}{z_m + d}} \qquad 0 \leqslant \gamma \leqslant \frac{\pi}{2} \qquad (10)$$

在此体系中只有当能量和出射角满足 $t^z_{ret} = t^{\rho}_{ret}$ 时才能形成闭合轨道. 很明显有一条闭合轨道是永远存在的,并沿正 z 方向,是由于电子只受金属面吸引势和电场的影响形成的,称为平行轨道,用 $j = 0$ 表示,这条轨道的周期为 $t_{//}(E) = t^z_{ret}\mid_{\theta_{out}=0}$. 如果增加电子的能量,这个时间也会增大. 当正好等于 j 个圆周运动周期 $t_c = j\pi/\omega_L$ 时,第 j 条闭合轨道出现. 闭合轨道的最大数目可以用 $t_{//}(E)/t_c$ 取整来确定. 图 2 给出了剥离电子运动的一些闭合轨道.

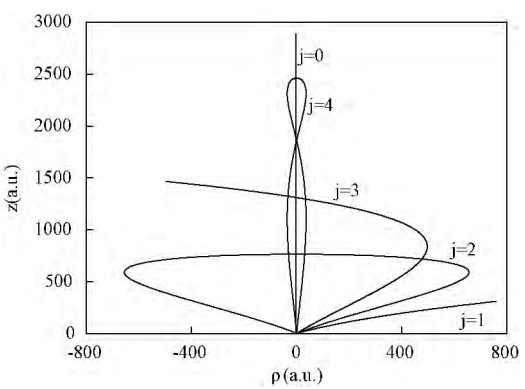


图 2 平行电场和磁场及金属面附近剥离电子的一些闭合轨道. 离子到金属面的距离 $d = 100$ a. u.,电场强度 $F = 10$ Kv/cm,磁场强度 $B = 60$ T,剥离电子能量 $E = 0.196$ eV

2 光剥离截面公式的推导

据闭合轨道理论[3-5],该体系的光剥离截面可以分为两部分:

$$\sigma(E) = \sigma_0(E) + \sum_{j=0}^{j_{\max}} \sigma^j_{osc} \qquad (11)$$

$\sigma_0(E)$ 是没有任何外场的光滑背景项[6]:

$$\sigma_0(E) = \frac{16\sqrt{2}B_0^2\pi^2E^{3/2}}{3c(E_b + E)^3} \qquad (12)$$

E 是剥离电子能量,$E_b = k_b^2/2$ 是氢负离子对剥离电子的束缚能,$E_b \approx 0.754$ eV,$B_0 = 0.315\ 22$ 为归一化常数. 第二项是振荡项,对应由于干涉而在光剥离截面中产生的振荡[5]:

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

$$\sigma_{osc}^{j=0}(E) = \sigma_0 \frac{3}{2\pi} |R_{j=0}| \sin(-S_j + \mu_j \pi/2) \tag{13}$$

$$\sigma_{osc}^{j\neq 0}(E) = \sigma_0 \frac{3}{2\pi} |R_{j\neq 0}| \cos^2\theta_{out}^{j\neq 0} \sin(-S_j + \frac{\pi}{4} + \mu_j \pi/2) \tag{14}$$

其中 $j_{\max}$ 是最大闭合轨道数目，且 $j_{\max} = \text{int}[t_{//}(E)/t_c]$. μ_j 是马斯洛夫指数[5]. $R_j = \left|\frac{f_{out}^{(+)j}}{f_{ret}^{(-)j}}\right| \left|\frac{J_j(t_0)}{J_j(t_{ret})}\right|^{1/2}$ 称为振幅，对应传出和返回的量子波在 $t = t_0$ 和 $t = t_{ret}$ 雅可比矩阵的比值. 其中 $J(t) = \rho(t) \frac{\partial(z,\rho)}{\partial(t,\theta)}$ 对应时间 t 时的雅可比矩阵[2-3].

对于平行轨道($j=0$)，由于任何时间 $\rho(t)$ 等于零，返回波是近似沿 z 轴的平面波: $f_{ret}^{(-)j=0} = e^{\pm ikz}/2\pi$，雅可比矩阵在 $t = t_0$ 和 $t = t_{ret}$ 为:

$$J_{j=0}(t_0) = \sqrt{2E} r^2 \sin(\theta_{out}^j) \tag{15}$$

$$J_{j=0}(t_{ret}) = \frac{1}{\omega_L^2} (\sqrt{2E})^3 \sin(\theta_{out}^j) \sin^2(\omega_L T_{//}) \tag{16}$$

所以:

$$R_{j=0} = \left|\frac{f_{out}^{(+)j=0}}{f_{ret}^{(-)j=0}}\right| \left|\frac{J_{j=0}(t_0)}{J_{j=0}(t_{ret})}\right|^{1/2} = \frac{\pi\omega_l}{E\sin(\omega_l t_{//})} \tag{17}$$

对于其他闭合轨道的 $f_{ret}^{(-)j} = (2\pi)^{-3/2} (k_\rho \rho)^{-1/2} e^{-ik_\rho \rho} e^{ikz} e^{i\pi/4}$. 雅可比矩阵在 $t = t_0$ 和 $t = t_{ret}$ 为:

$$J_j(t_0) = \sqrt{2E} r^2 \sin(\theta_{out}^j) \tag{18}$$

$$J_j(t_{ret}) = -2E\cos(\theta_{out}^j) \sin(\theta_{out}^j) (-1)^j \left[\frac{\partial t}{\partial \theta}\right]_{Zret} \rho_{ret} \tag{19}$$

所以:

$$R_{j\neq 0} = \left|\frac{f_{out}^{(+)j}}{f_{ret}^{(-)j}}\right| \left|\frac{J_j(t_0)}{J_j(t_{ret})}\right|^{1/2} = \frac{(2\pi)^{3/2} \sin\theta_{out}^j}{(\sqrt{2E})^{3/2} \sqrt{\cos\theta_{out}^j \left|\left[\frac{\partial t}{\partial \theta}\right]_{Zret}\right|}} \tag{20}$$

其中 $\left[\frac{\partial t}{\partial \theta}\right]_{z_{ret}}$ 可以用式(7)计算，θ_{out}^j 是第 j 条闭合轨道的出射角. S_j 是第 j 条闭合轨道的作用量. 它可以分为两部分之和:

$$S_j(E) = S_z(E) + S_\rho(E) \tag{21}$$

其中沿 ρ 轴的作用量为:

$$S_\rho(E) = \int_0^\rho p_\rho d\rho = E\sin^2\theta_{out}^j t_j \tag{22}$$

这里 $t_j = j\pi/\omega_l$ 是第 j 条闭合轨道的周期.

因此，闭合轨道总的作用量是:

$$S_j(E) = \frac{4\sqrt{2F}}{3}\{\sqrt{z_m - z_n}[z_m + z_n + 2d) E(\lambda, \gamma) - (z_n + d) F(\lambda, \gamma)] - \sqrt{-z_m z_n d}\} + E\sin^2\theta_{out}^j t_j \tag{23}$$

3　结果与讨论

利用式(11)，计算了电场和磁场及金属面附近氢负离子的光剥离截面. 计算中，保持离子到金属面的距离 $d = 100$ a. u. 和电场强度 $F = 10$ kV/cm 不变，光子的能量范围在 0.76 到 1.0 eV，磁场强度 B 从 1.0 T 提高到 80 T，图 3 给出结果. 图 3(a) 是磁场强度为 1.0 T 时的光剥离截面，在这种情况下，只有 $j=0$ 的闭合轨道对光剥离截面有贡献，振荡结构很简单，类似于氢负离子在金属面附近的光剥离情况[10]. 随着磁场强度的增加，其影响变得明显. 图 3(b) 对应磁场强度 $B = 20.0$ T 时的光剥离截面，截面与图 3(a) 不同，这种情况下，剥离电子受到洛伦

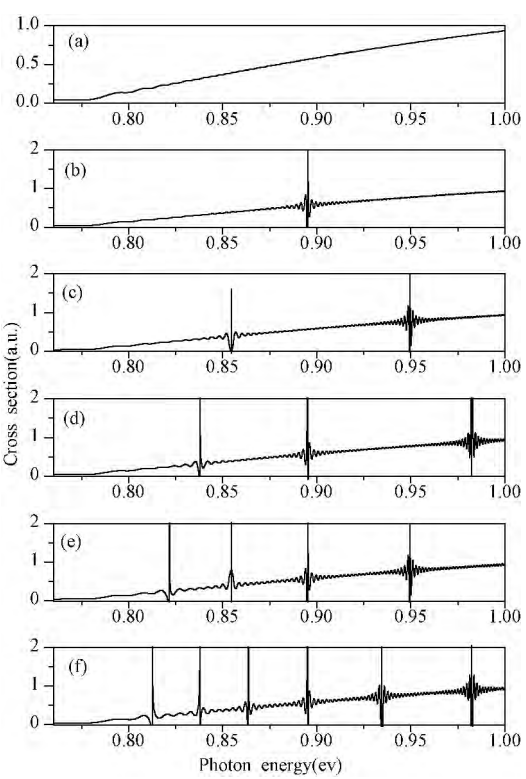


图 3　平行电场和磁场以及金属面附近的光剥离截面图. 电场强度 10 Kv/cm，离子到金属面的距离 $d = 100$ a. u.，磁场强度如下: (a) $B = 1.0$ T，(b) $B = 20.0$ T，(c) $B = 30.0$ T，(d) $B = 40.0$ T，(e) $B = 60.0$ T，(f) $B = 80.0$ T.

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

兹力足够强,可以把电子拉回原点. 当光子的能量增加到 $E_p = 0.894$ eV,电子运动的返回时间恰好等于一个回旋周期. 因此,一条新的闭合轨道($j = 1$ 轨道)产生对截面有贡献,于是截面中出现一个很大的振荡. 图 3(c)中磁场强度 B 提高到 30 T. 这个图表明,当光子能量大于 0.854 eV 时,截面中的振荡明显. 当能量 $E_p = 0.854$ eV,一个新的闭合轨道($j = 1$ 轨道)产生,出现明显的振荡. 当 $E_p = 0.949$ eV,第二条闭合轨道($j = 2$ 轨道)出现. 当能量高于 0.949 eV,总共有三条闭合轨道对截面有贡献. 因此,截面中振荡变得更加明显. 随着磁场强度的提高,闭合轨道数目增多,所以截面中的振荡结构变得更加复杂,如图 3(d-e). 在图 3(f)中磁场强度增加到 80.0 T. 此时,磁场的影响变得非常强. 剥离电子受到的洛伦兹力很强,回旋周期 $t^{\rho}_{ret} = j\pi/\omega_L$ 变小,剥离电子在很短的时间内就被外场和金属面的作用拉回原点形成闭合轨道. 因此,闭合轨道的数目增多. 当能量 E_p 达到 0.982 eV,总共有 7 条闭合轨道对截面有贡献,截面中出现一系列的尖峰,振荡变得很复杂与平行电场和磁场中的氢负离子的光剥离截面相似[10].

新的闭合轨道产生时对应的能量称为边界能,记为 E_b^j [10]. 当剥离电子的能量等于边界能时,出现一条新的闭合轨道贡献于截面产生振荡. 为了清楚显示每条闭合轨道对截面中振荡的贡献,给出了对应每一条轨道的振荡部分,如图 4 所示. 例如,磁场强度 $B = 60$ T,$j = 1$ 的闭合轨道对应的边界能是 $E_b^{j=1} = 0.067\ 77$ eV;$j = 2$ 的闭合轨道对应的边界能是 $E_b^{j=2} = 0.100\ 55$ eV;$j = 3$ 的闭合轨道对应的边界能是 $E_b^{j=3} = 0.141\ 13$ eV,$j = 4$ 的闭合轨道对应的边界能是 $E_b^{j=4} = 0.195\ 51$ eV. 每条闭合轨道对截面的贡献清楚地显示在图中.

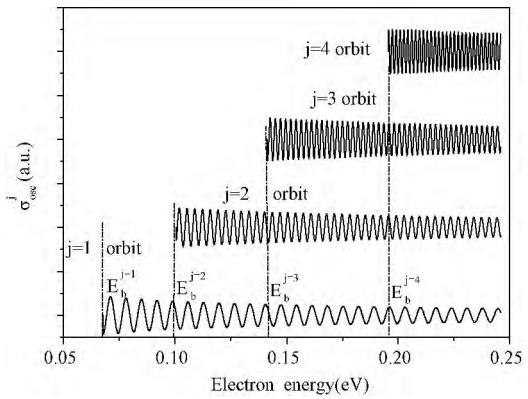


图 4 对应每条闭合轨道的光剥离截面振荡图. 离子到金属面的距离 $d = 100$ a. u. 电场强度 $F = 10$ Kv/cm 和磁场强度 $B = 60$ T.

最后,为了显示边界能随磁场强度的变化,画出了电子的边界能与磁场强度的关系图,见图 5. 结果表明:在弱磁场和低能量下,闭合轨道数目很小;随着磁场的增加,闭合轨道的数量增加. 从这个图可以很容易得出边界能和相应的闭合轨道数目. 例如,在 $B = 60$ T,有四点交点,这表明有五条闭合轨道对截面有贡献. 这个结果与图 3(e)和图 4 中给出的结果非常吻合.

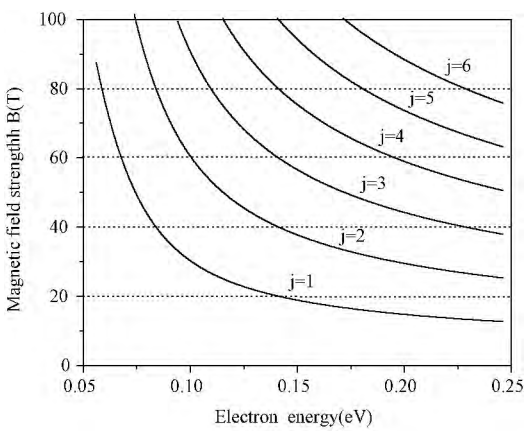


图 5 平行电场和磁场及金属面附近剥离电子能量和磁场强度的关系图,离子到金属面的距离为 $d = 100$ a. u.

参 考 文 献

[1] Bryant H C et al. Observation of motional-field-induced ripples in the photodetachment cross section of H^- [J]. Phys. Rev. Lett, 58 (2412) 1987.

[2] Du M L, Delos J B. Effects of an electric field on the photodetachment of H [J]. Phys. Rev. A, 38 (5609) 1988.

[3] Du M L, Delos J B. Photodetachment of H- in an electric field [J]. Phys. Rev. Let, 58 (1731) 1987.

[4] Du M L, Delos J B. Effect of closed classcical orbits on quantum spectra: Ionization of atom in a magnetic field. Ⅰ. Physical picture and calculations [J]. Phys. Rev. A, 38 (1896) 1988.

[5] 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, 47 (3020) 1993.

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

[6] Yang G C, Zheng Y Z, Chi X X. Photodetachment of H− near an interface [J]. J. Phys. B, 39 (1855) 2006.
[7] Wang D H, Yu Y J. Photodetachment of H^- in an electric field between two parallel interfaces [J]. Chin. Phys. B, 17 (1231) 2008.
[8] Zhao H J, Du M L. Photodetachment of H^- in an electric field near a metal surface [J]. Phys. Rev. A, 79 (023408) 2009.
[9] Gradshteyn I S, Ryzhik I M. Tables of Integrals, Series and Products (New York: Academic) Rui K K and Yang G C Surf Sci, 603 (632) 1980.
[10] 唐田田, 王德华. 氢负离子在微腔中的光剥离研究 [J]. 物理学报, 60(053203) 2011.

The Influence of the Magnetic Field on the Photodetachment of H^- in Electric Field near Metal Surface

Tang Tiantian

(Yantai Nanshan University, Yantai, Shandong 265713)

Abstract

Based on the closed-orbit theory, the magnetic field effect in the photodetachment of negative ion in the electric field near a metal surface has been studied for the first time. The results show that the magnetic field can produce significant effect on the photodetachment of negative ion near metal surface. Besides the closed orbits previously found by Du *et al* for the H− in the electric field near a metal surface, some additional closed orbits are produced due to the effect of magnetic field. For a given ion-surface distance and electric field strength, the cross section depends on the magnetic field strength sensitively. As the magnetic field strength is very small, its influence can be neglected. With the increase of the magnetic field strength, the number of the closed orbits increases greatly and the oscillation in the cross section becomes much more complex. Therefore we can control the photodetachment cross section of the negative ion by changing the magnetic field strength. We hope that our results may guide future experimental studies for the photodetachment process of negative ion in the presence of external fields and surfaces.

Key words: photodetachment, closed-orbit theory, magnetic field effect, metal surface.

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