

Динамика фотоионизации атомов благородных газов между первым и вторым порогом ионизации



Ростовский государственный
университет путей сообщения,
Россия

Технический университет
Кайзерслаутерн,
Германия

В Л Сухоруков
И Д Петров

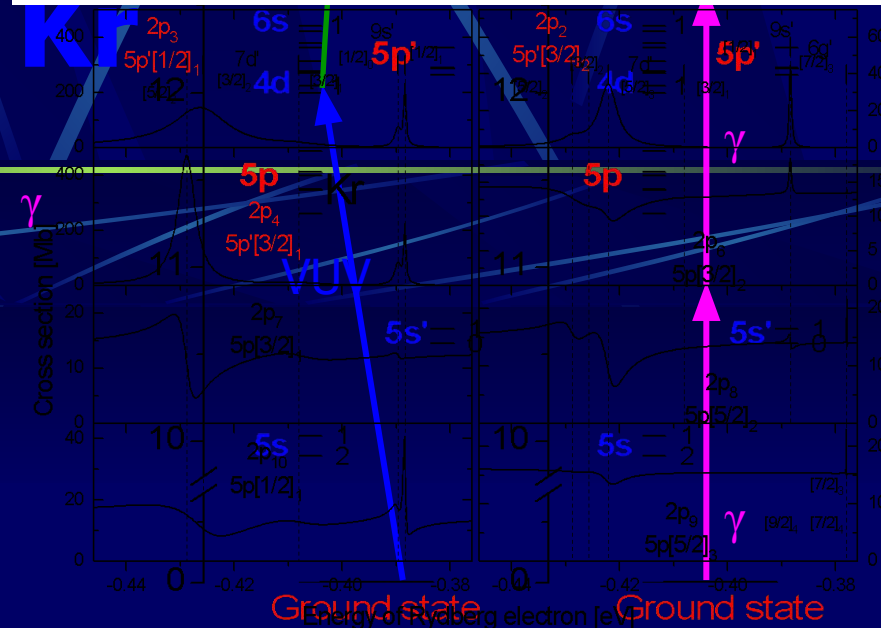
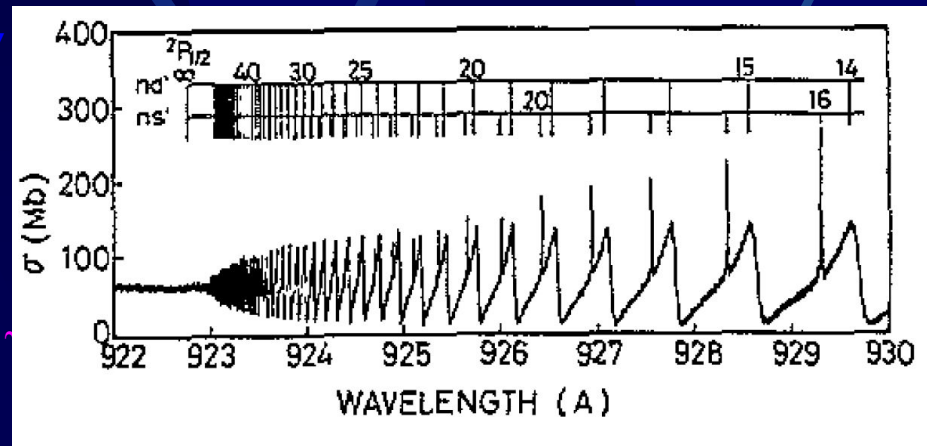
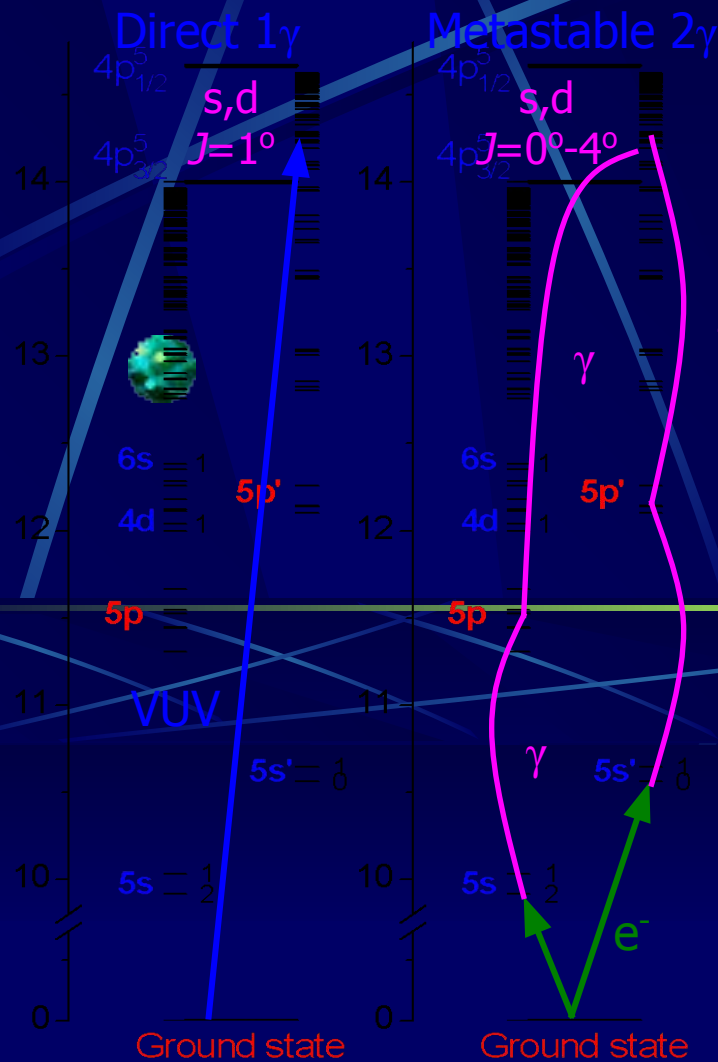


Х Хотоп

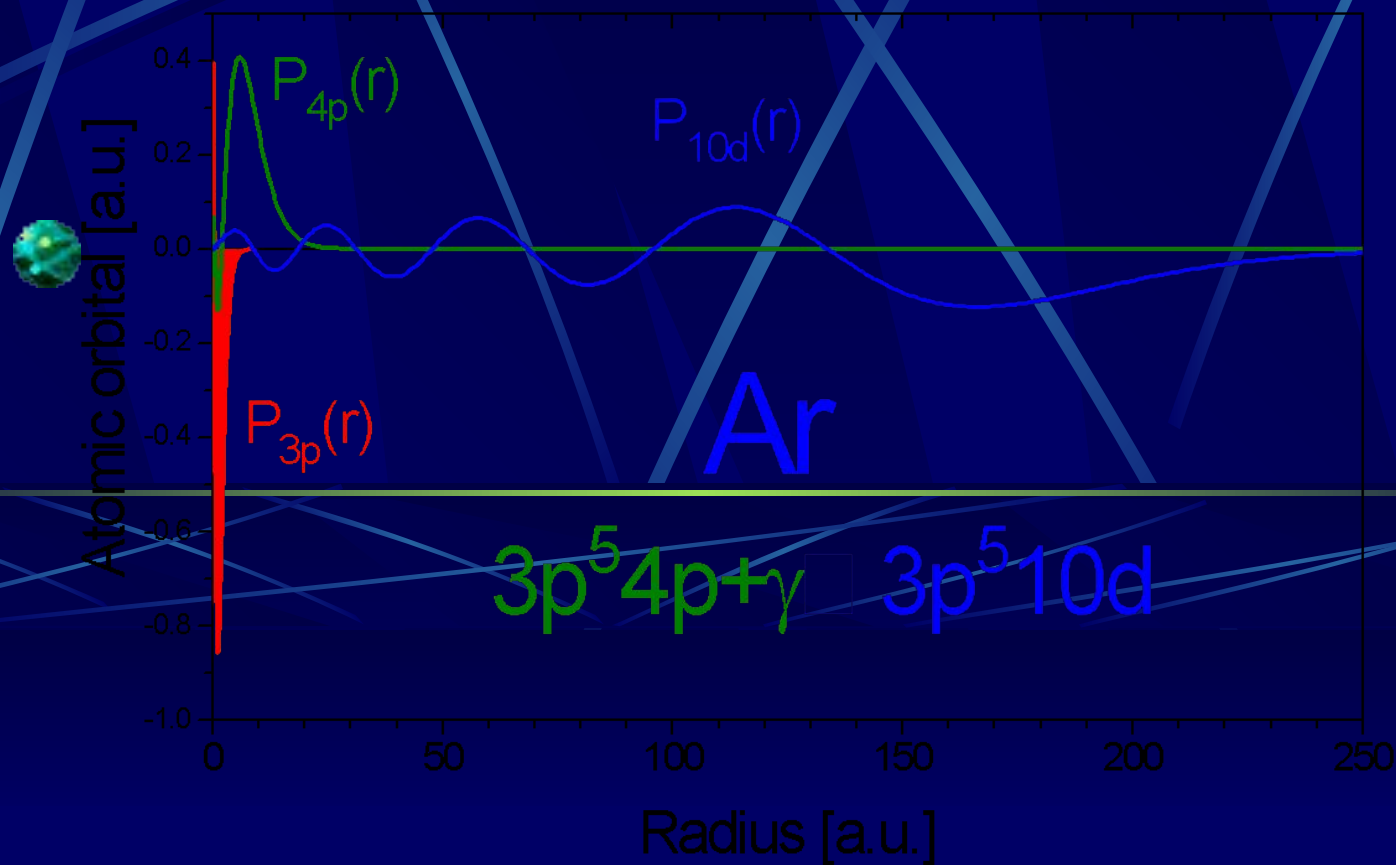


Новосибирск, 24-27 мая 2010 года

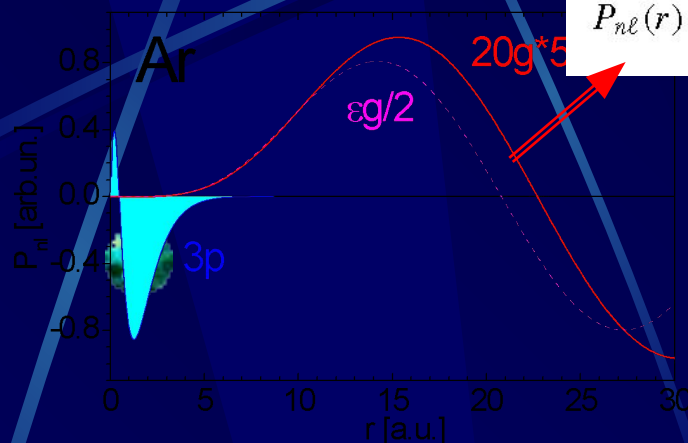
Энергетический масштаб и экспериментальные схемы



Пространственный масштаб



Постоянство формы АО



$$P_{nl}(r) \approx 2 \left(\frac{Z}{n} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{(2Zr)^\ell}{(2\ell+1)!} r \left(1 - \frac{2Zr}{2\ell+2} + \frac{(2Zr)^2}{(2\ell+2)(2\ell+3) \cdot 2!} - \dots \right).$$

Reduced width: (J Berkowitz Adv.Chem.Phys. 1988)

$$\Gamma_r(n\ell[K]_J) = (n - \mu(\ell[K]_J))^3 \Gamma(n\ell[K]_J),$$

Generalized reduced width

$$\Gamma_{gr} = (\ell' + 3/2)(\ell' + 1)^2(\ell' + 1/2)^2 \ell' \Gamma_r(\ell' + 1/2),$$

$$\Gamma_{gr} = (\ell' - 1/2)(\ell' + 1)(\ell' + 1/2)^2 \ell'^2 \Gamma_r(\ell' - 1/2).$$

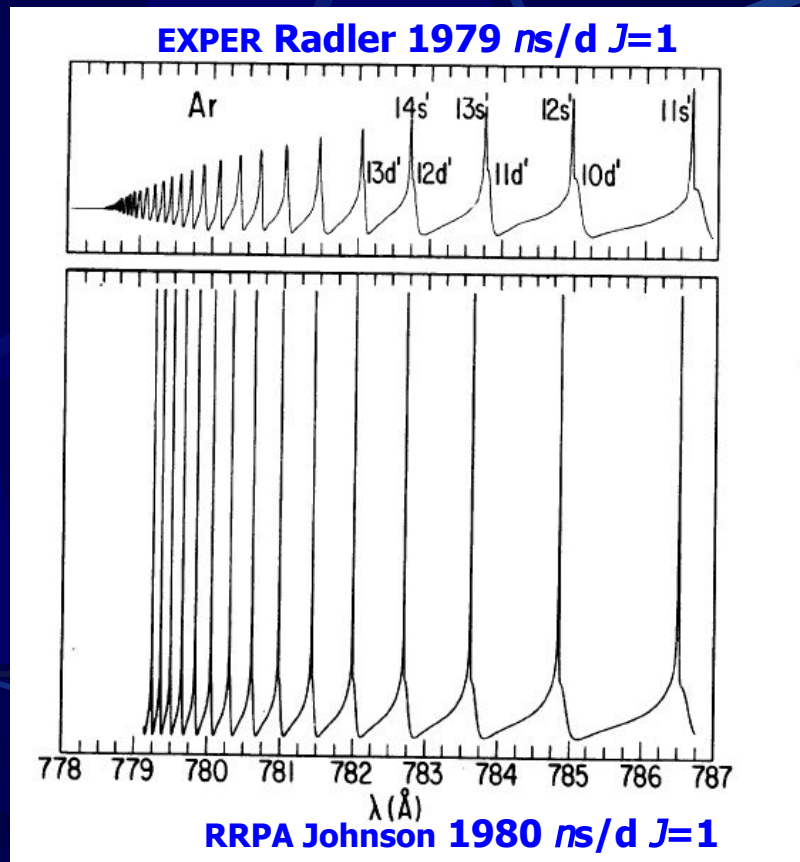
Table 3. Generalized reduced widths (cm⁻¹) calculated in the PF approximation.

		$J = \ell'$					
		$K' = \ell' - 1/2$			$K' = \ell' + 1/2$		
$n = 20$							
Atom	ℓ'	Γ_r	$\Gamma_r \ell'^6$	Γ_{gr}^a	Γ_r	$\Gamma_r \ell'^6$	Γ_{gr}^a
Ne	3	23.63	17226	26 052	9.64	7025	25500
	4	4.30	17621	24 392	2.19	8970	24 391
	5	1.10	17219	22 501	0.65	10 183	23 065

^a $\Gamma_{gr} = \Gamma_r(\ell' - 1/2)(\ell' + 1)(\ell' + 1/2)^2 \ell'^2$ for $\ell'[\ell' - 1/2]_e$ resonance;
 $\Gamma_{gr} = \Gamma_r(\ell' + 3/2)(\ell' + 1)(\ell' + 1/2)^2 \ell'$ for $\ell'[\ell' + 1/2]_e$ resonance.

Figure and table from:
 I D Petrov et al.
 J. Phys. B, **35** (2002) 323

Проблемы: (i) ширины резонансов



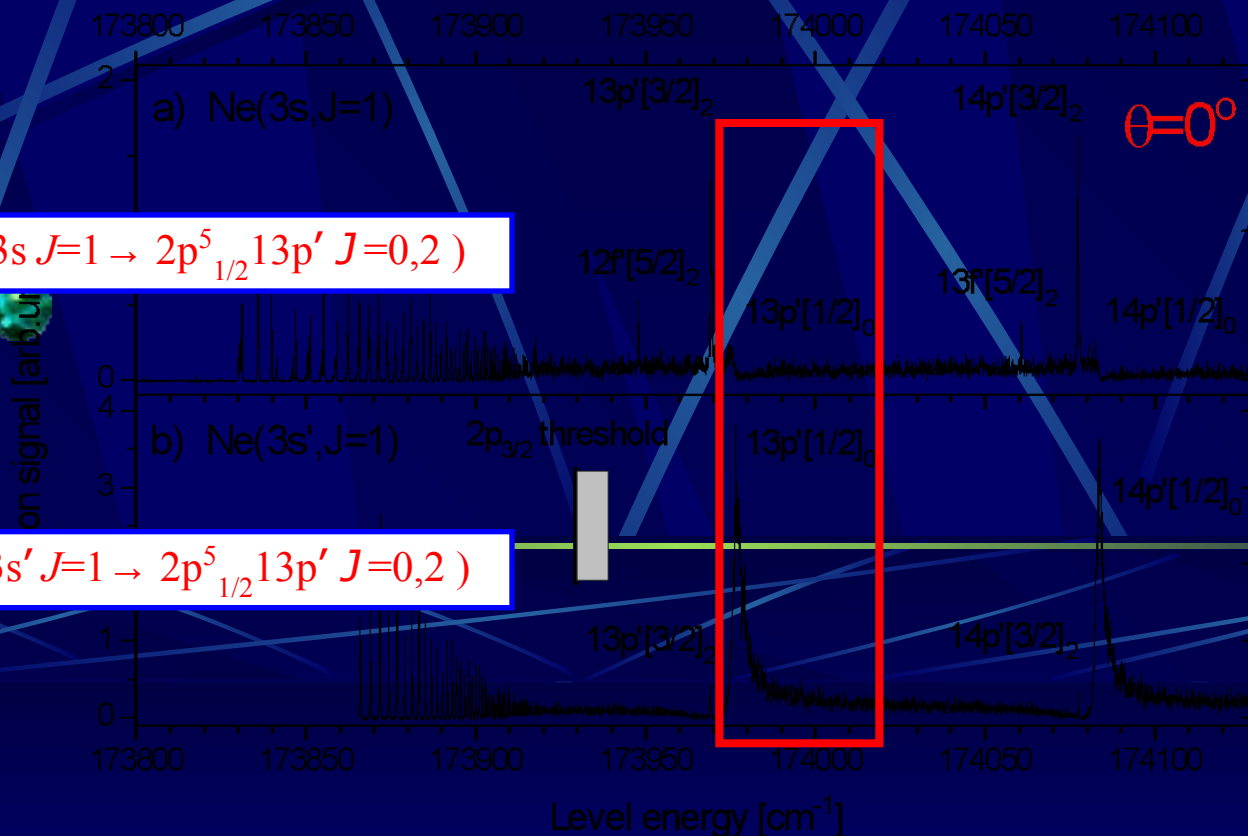
Reduced width

$$\Gamma_r = n^*{}^3 \Gamma_n$$

Ar 12s' $J=1$		Γ_r, cm^{-1}
Exper Klar 1992		510
Johnson 1980 RRPA		1210
Klar 1992 RPAE		826
HF approach		1587

Проблемы : (ii) Форма резонансов (Ne)

Experiment of Merkt (Petrov *JPB* 2007)



$\text{Ne}(2p_{3/2}^5 3s J=1 \rightarrow 2p_{1/2}^5 13p' J=0,2)$

$\text{Ne}(2p_{1/2}^5 3s' J=1 \rightarrow 2p_{1/2}^5 13p' J=0,2)$

$$|2p_{3/2}^5 3s\rangle = 0.645 |2p_{1/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle + 0.764 |2p_{3/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle$$

$$|2p_{1/2}^5 3s'\rangle = 0.764 |2p_{1/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle - 0.645 |2p_{3/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle$$

Теоретическая модель (CIRFSP)

Одноэлектронные атомные орбитали (АО):

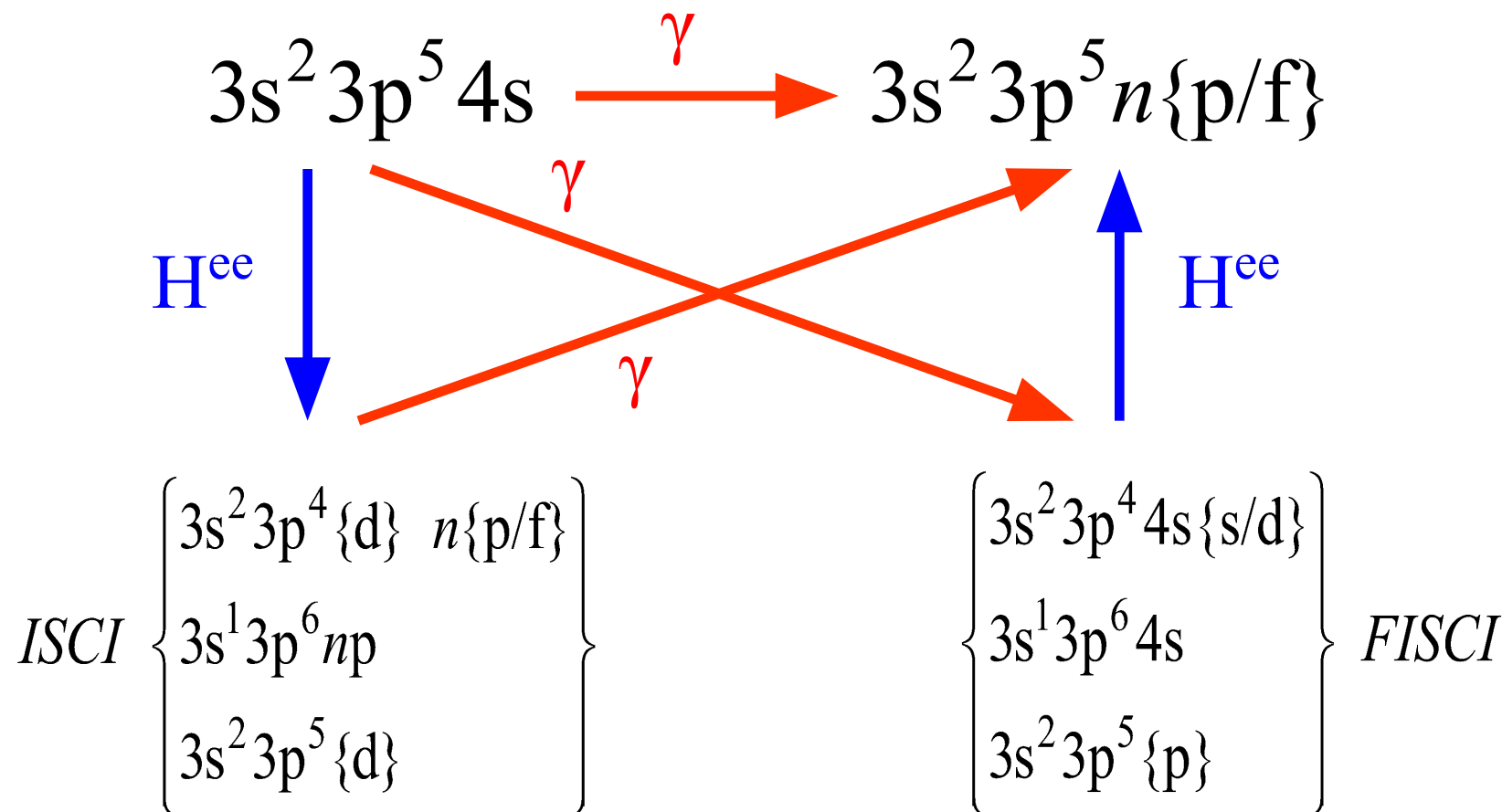
- Релятивистские эффекты: приближение Паули
- Ab-initio поляризационный потенциал как первый шаг по пути к полному многоконфигурационному приближению



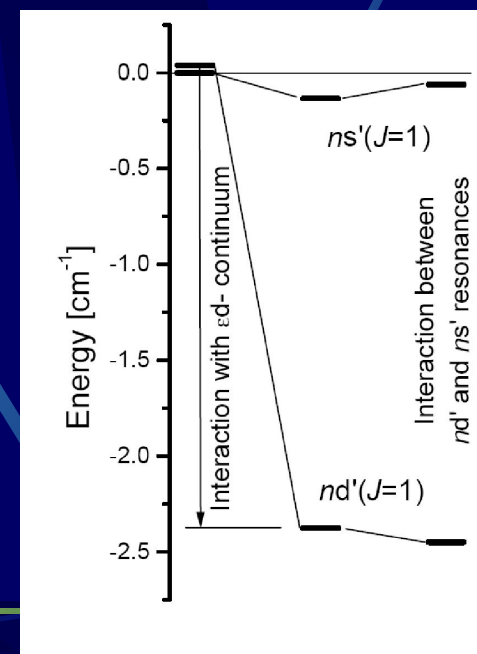
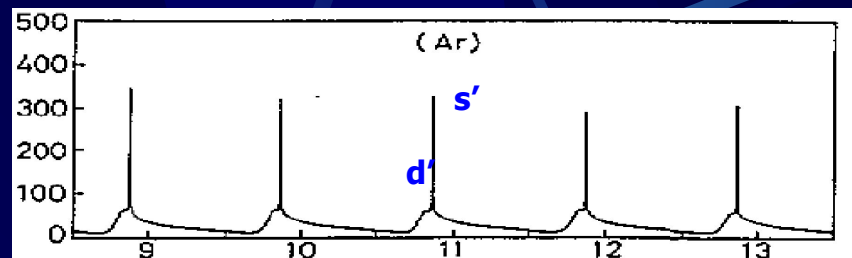
Многоэлектронные эффекты

- Метод взаимодействия конфигураций для сильновзаимодействующих конфигураций
- Теория возмущений и теория эффективных операторов для слабовзаимодействующих конфигураций
- Метод К-матрицы для взаимодействия сплошных спектров

Схема переходов (Ar)



Ширины резонансов s-d смешивание (Ar J=1)



Ar 20s' J=1	s'	d'
Exper, Hollenstein 2000 Klar 1992	505 510	28800
Theor, Johnson 1980 RRPA	1210	36330
PF	1587	13330
PF+CP	1805	24500
PF+CP+CI	1498	23410
PF+CP+CI+Res.Interact	606	23960

$$|20s'\rangle = 0.985|20s'\rangle + 0.174|18d'\rangle$$

$$\Gamma_{20s'} = 1498 \text{ cm}^{-1}$$

$$\Gamma_{\overline{20s'}} = 606 \text{ cm}^{-1}$$

Сильная интерференция в амплитудах переходов

INSTITUTE OF PHYSICS PUBLISHING

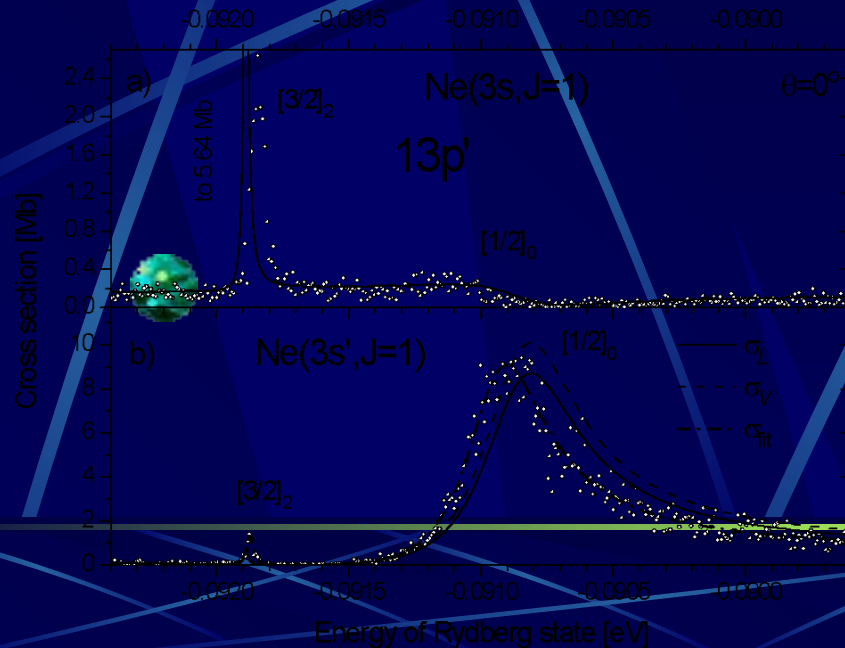
JOURNAL OF PHYSICS B: ATOMIC, MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS

J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 39 (2006) 3159–3176

doi:10.1088/0953-4075/39/16/002

Autoionizing even $2p_{1/2}^5 n\ell' [K']_{0,1,2} (\ell' = 1, 3)$ Rydberg series of Ne: a comparison of many-electron theory and experiment

I D Petrov^{1,2}, V L Sukhorukov^{1,2}, T Peters², O Zehnder³, H J Wörner³,
F Merkt³ and H Hotop²



$3s \rightarrow 13p'$

$3s \rightarrow 3p \Rightarrow 13p'$

$$|2p_{3/2}^5 3s\rangle = 0.645 |2p_{1/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle + 0.764 |2p_{3/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle$$

$$|2p_{1/2}^5 3s'\rangle = 0.764 |2p_{1/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle - 0.645 |2p_{3/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle$$

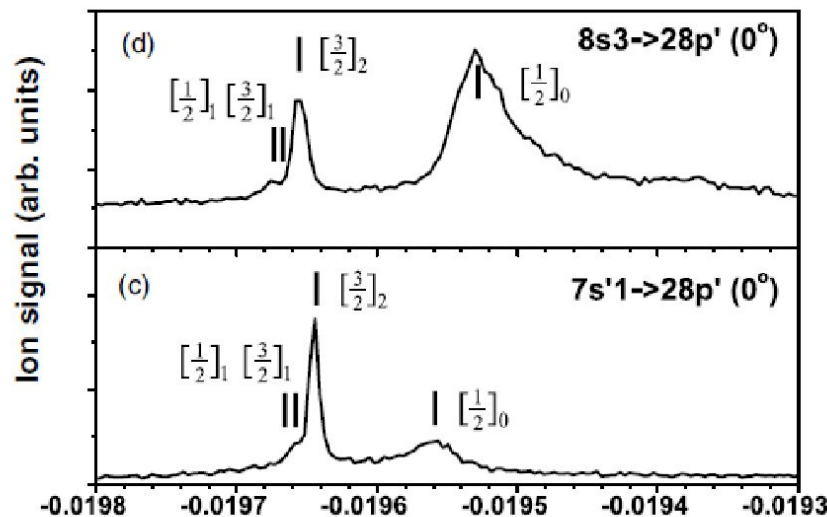
$$|2p_{1/2}^5 13p'\rangle = 0.99984 |2p_{1/2}^5 13p_{1/2}; 0\rangle + 0.00449 |2p_{3/2}^5 13p_{3/2}; 0\rangle$$

Фотоионизация Ar ($3p^5 ms, J=1$)

Eur. Phys. J. D 40, 18
DOI: 10.1140/epjd/e2

Lineshapes
of Ar, Kr and

I.D. Petrov^{1,2}, T. Petrov^{1,2},
V.L. Sukhorukov^{1,2,3}



EUROPEAN
PHYSICAL JOURNAL D

Resonances

PHYSICAL REVIEW A 78, 022509 (2008)

Autoionizing Rydberg series (np' , nf') of Ar investigated by stepwise excitations with lasers and synchrotron radiation

Yin-Yu Lee, Tzan-Yi Dung, Re-Ming Hsieh, Jih-Young Yuh, Yen-Fang Song, Grace H. Ho, and Tzu-Ping Huang
National Synchrotron Radiation Research Center, Hsinchu Science Park, Hsinchu 30076, Taiwan

Wan-Chun Pan and I-Chia Chen
Department of Chemistry, National Tsing-Hua University, Hsinchu 30013, Taiwan

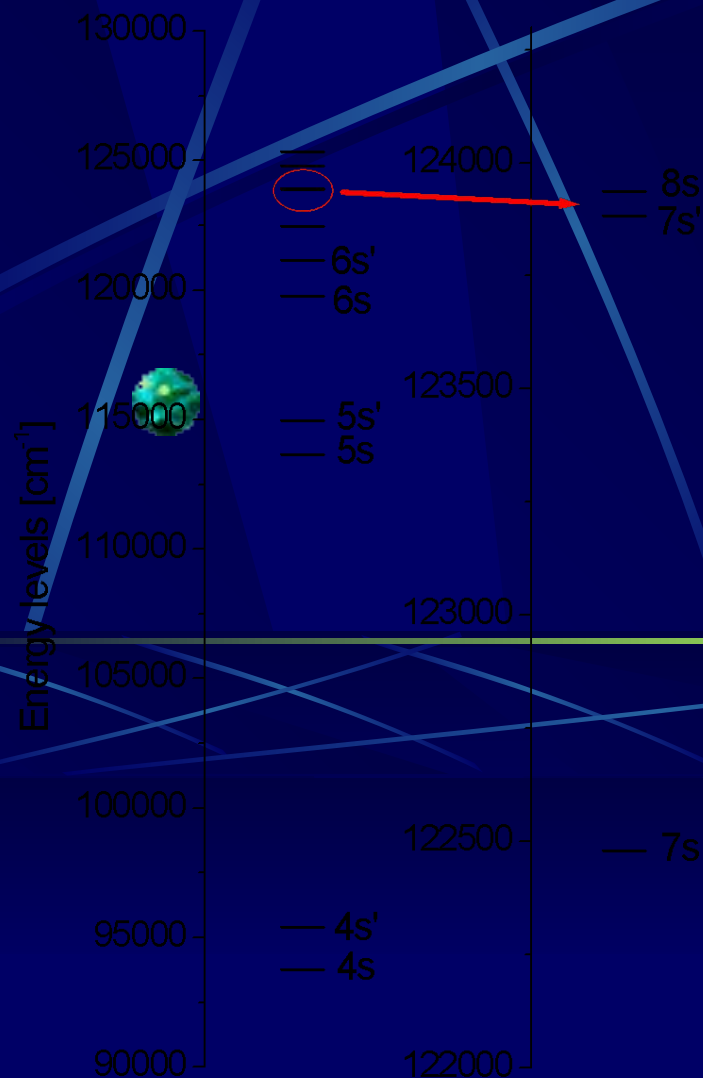
Shih-Yu Tu and A. H. Kung
Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia Sinica, Taipei, Taiwan Department of Photonics, National Chiao-Tung University, Hsinchu 30010, Taiwan

L. C. Lee
Department of Electrical and Computer Engineering, San Diego State University, San Diego, California 92182, USA
(Received 27 June 2008; published 12 August 2008)



Новосибирск, 24-27 мая 2010 года

Уровни энергии Ar(3p⁵ ms, J=1)



Condition of the energy levels
equality for ns and $(n - 1)s'$ levels

$$\frac{1}{(n - 2.14)^2} - \frac{1}{(n - 2.14 - 1)^2} = IP_{3/2} - IP_{1/2},$$

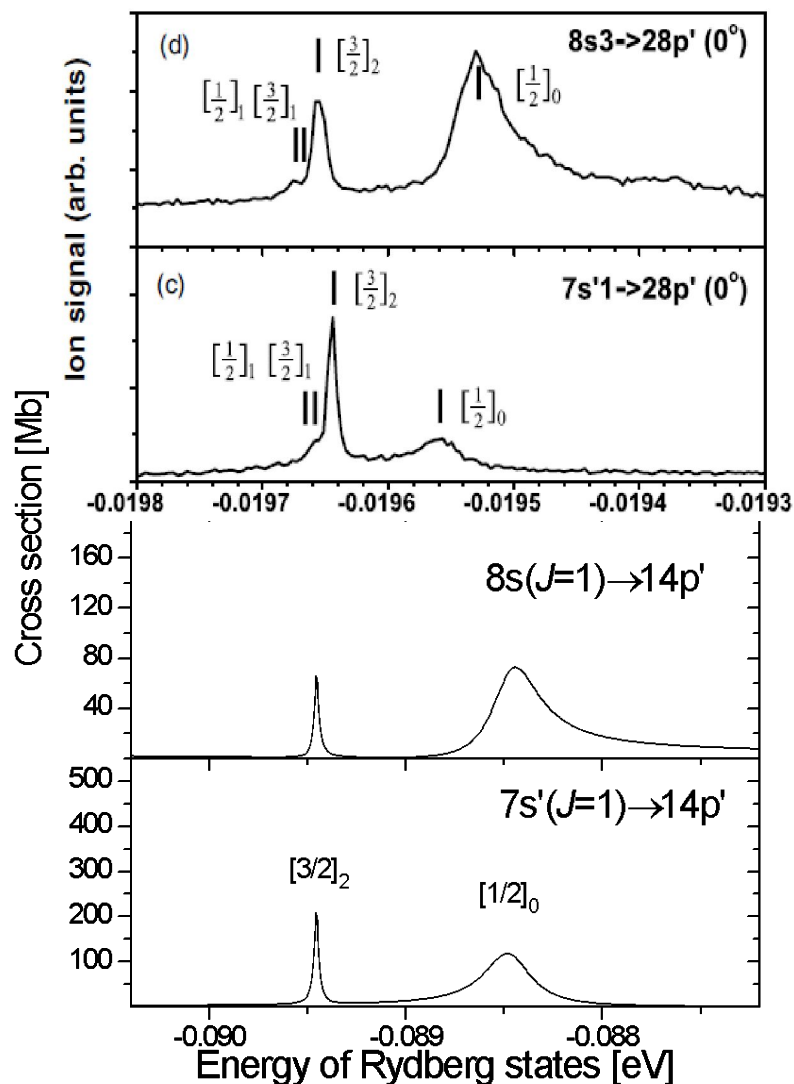
Solution : $\{[n = 8.028]\} \{8s, 7s'\}$

Condition of the energy levels
equality for ns and $(n - 2)s'$ levels

$$\frac{1}{(n - 2.14)^2} - \frac{1}{(n - 2.14 - 2)^2} = IP_{3/2} - IP_{1/2},$$

Solution : $\{[n = 9.9872]\} \{10s, 8s'\}$

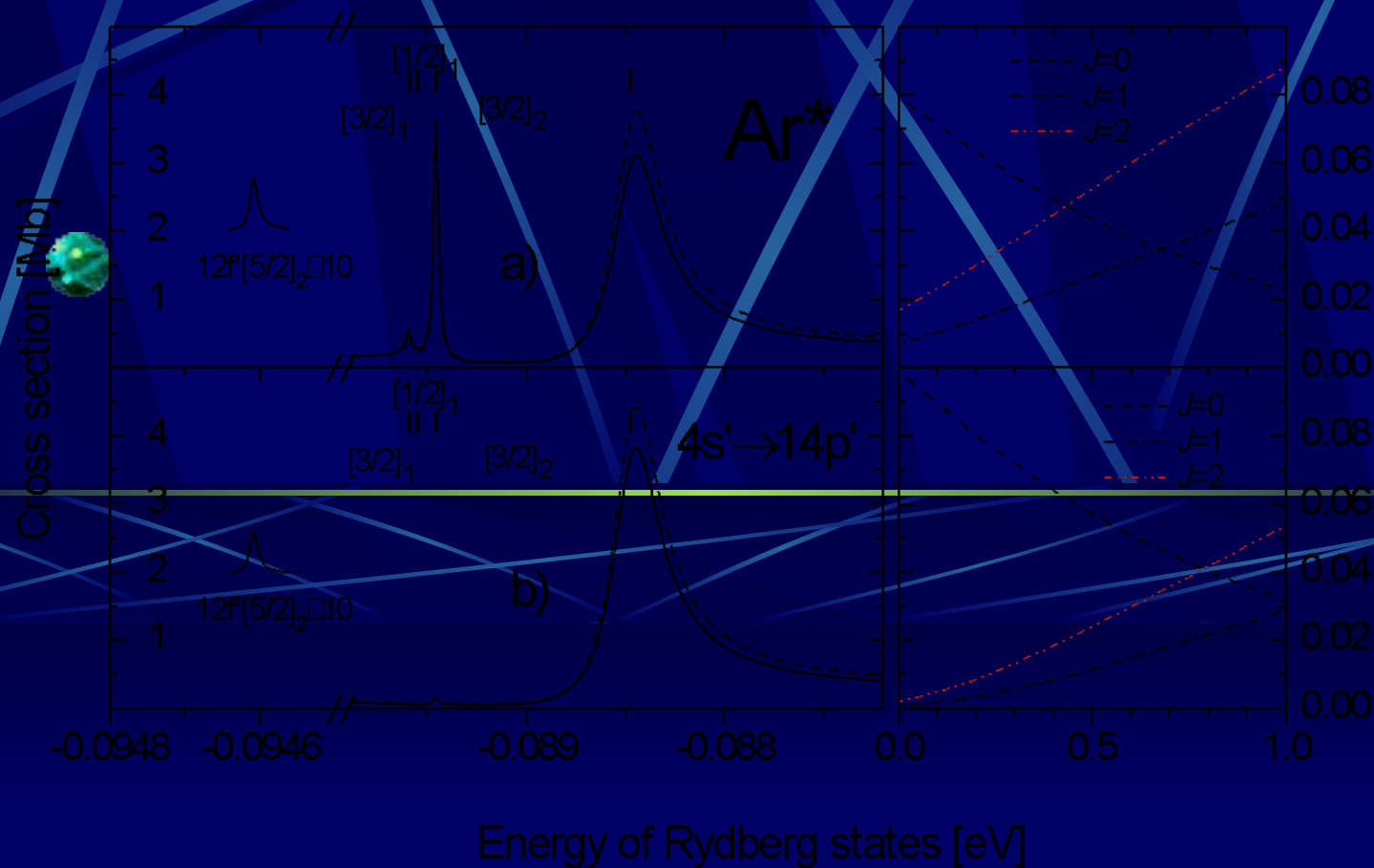
Смешивание $7s'$ и $8s$ состояний



$$|8s\rangle = -0.5357|3p_{1/2}^5 7s\rangle + 0.8442|3p_{3/2}^5 8s\rangle$$

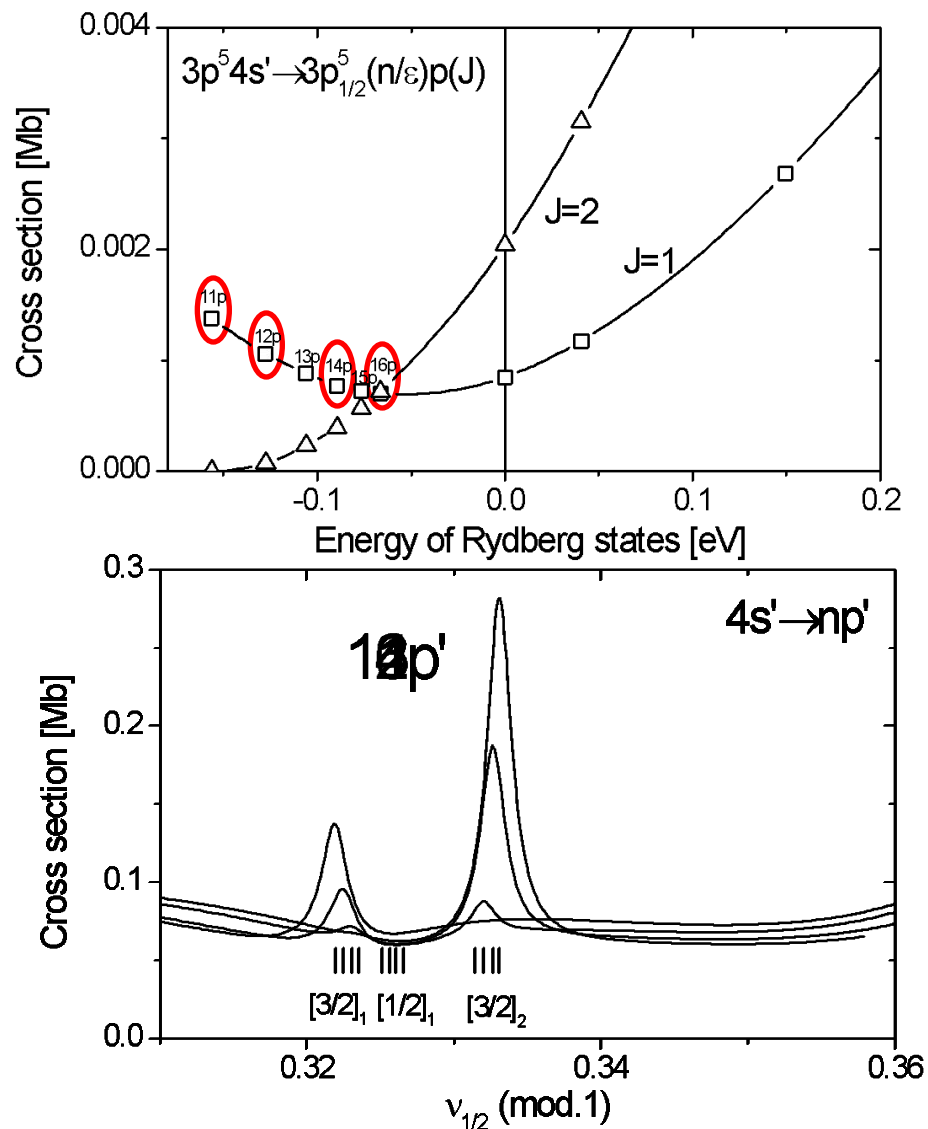
$$|7s'\rangle = 0.8427|3p_{1/2}^5 7s\rangle + 0.5380|3p_{3/2}^5 8s\rangle$$

Куперовский минимум и форма пр-резонансов



a) CP potential decreased by the factor 1.25 relative to case b)

Зависимость формы np -резонансов от n



Заключение

Исследованы автоионизационные резонансы для большинства атомов благородных газов

□ **Вероятности распада резонансов (ширины) подвержены влиянию:**

- Поляризации остова
- Взаимодействия между резонансами (“маленькая примесь больших величин” и “много маленьких примесей”)
- Корреляционного уменьшения Кулоновского взаимодействия

□ **Форма автоионизационных резонансов подвержена влиянию:**

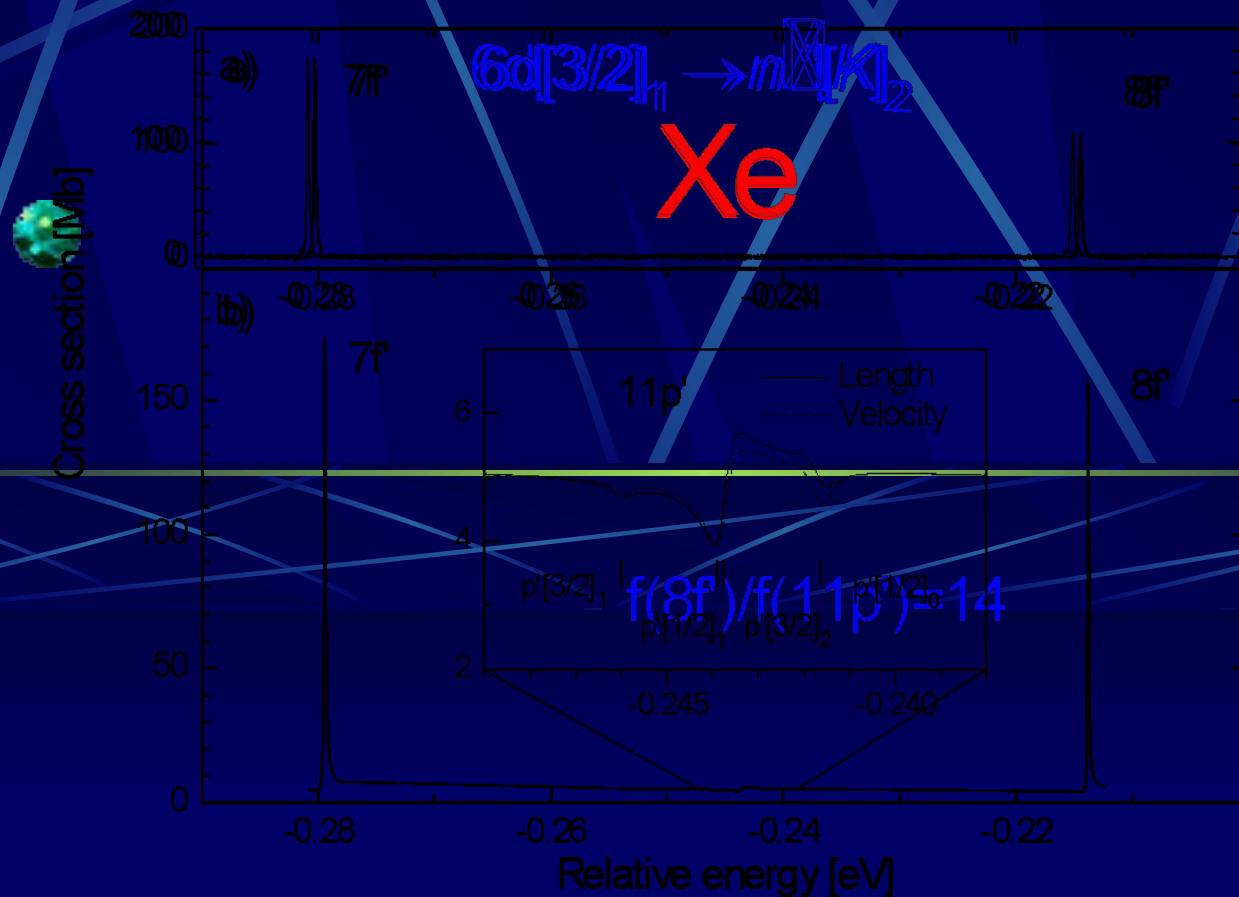
- Интерференции между каналами возбуждения
- внутриатомных взаимодействий

□ **Ридберговские состояния являются чувствительным инструментом для исследования атомных процессов**

Исчезающие серии:

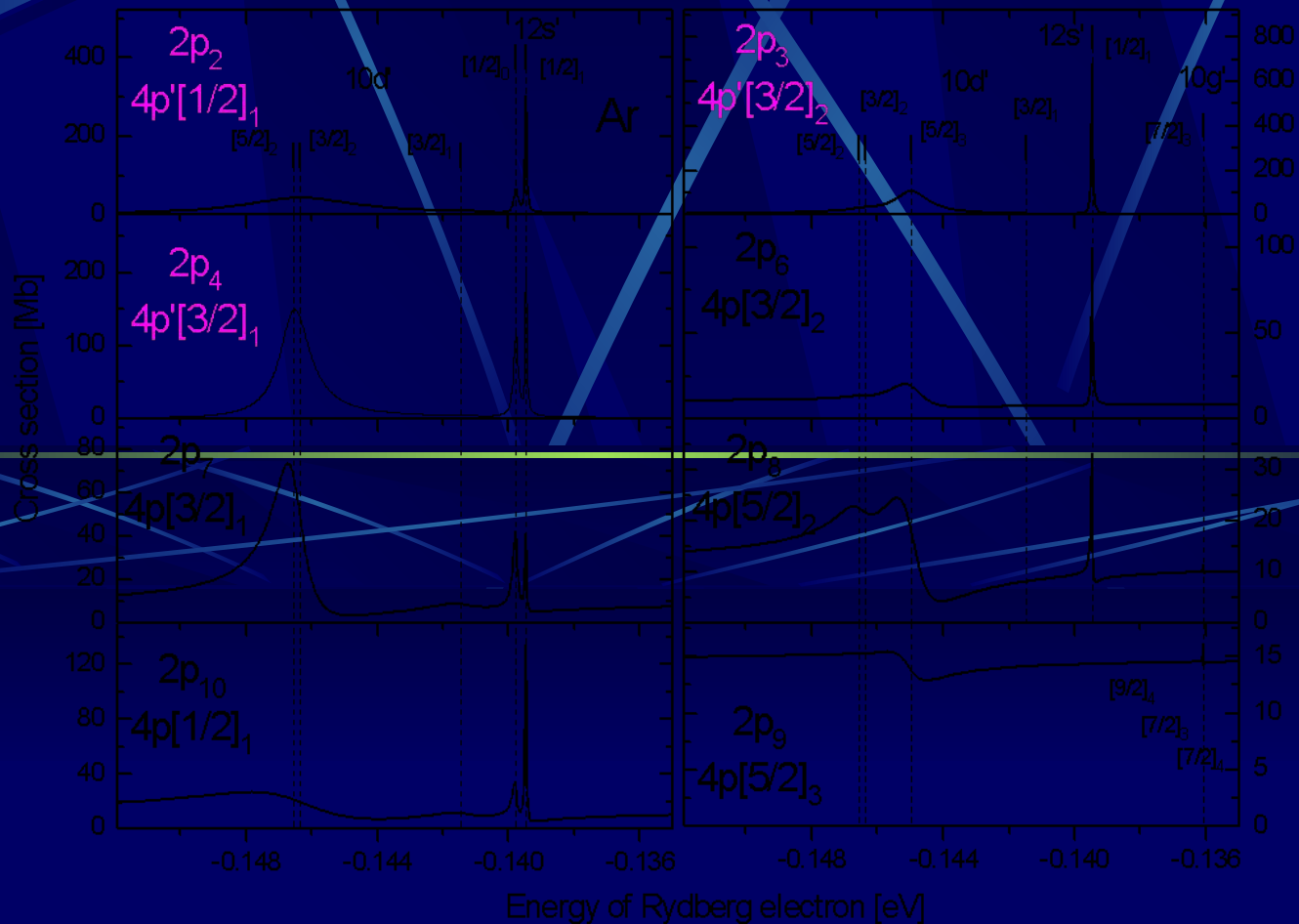
Xe 6d[3/2]₁ → np'/f'

Meyer JPB 2005

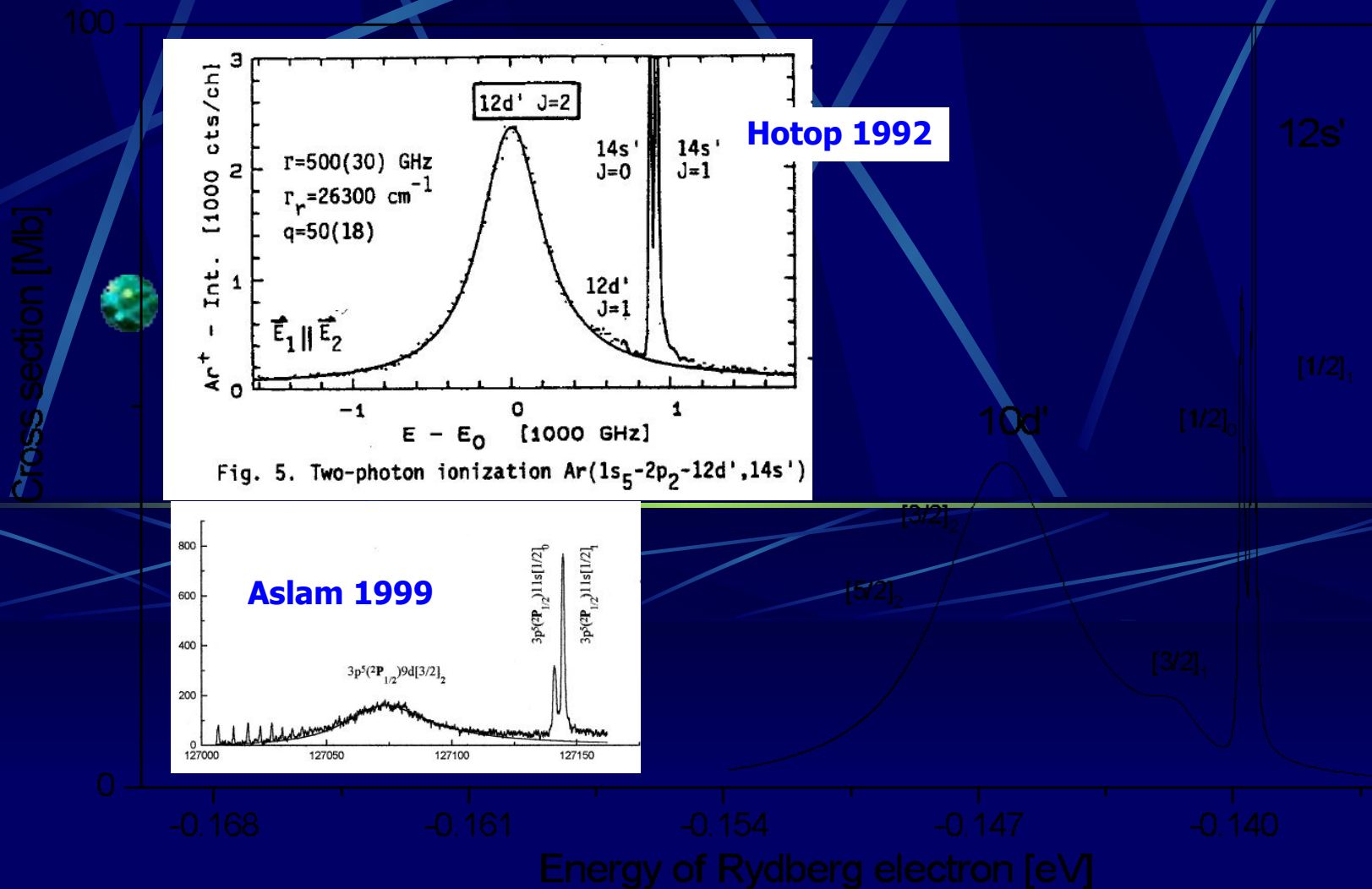


Форма резонансов Ar $3p^5 4p$ ($J=1,2,3$)

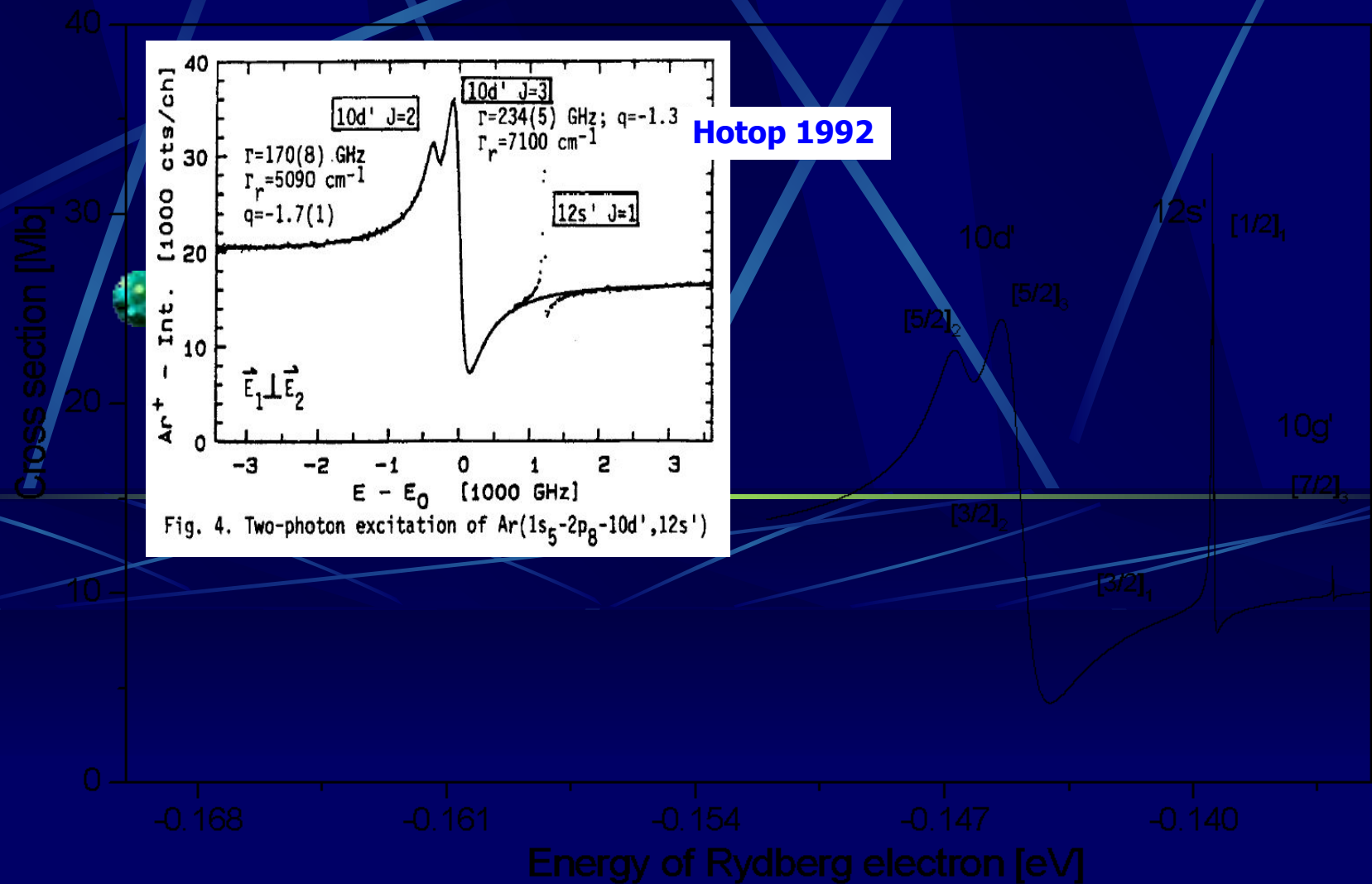
□ $n d'/s'$



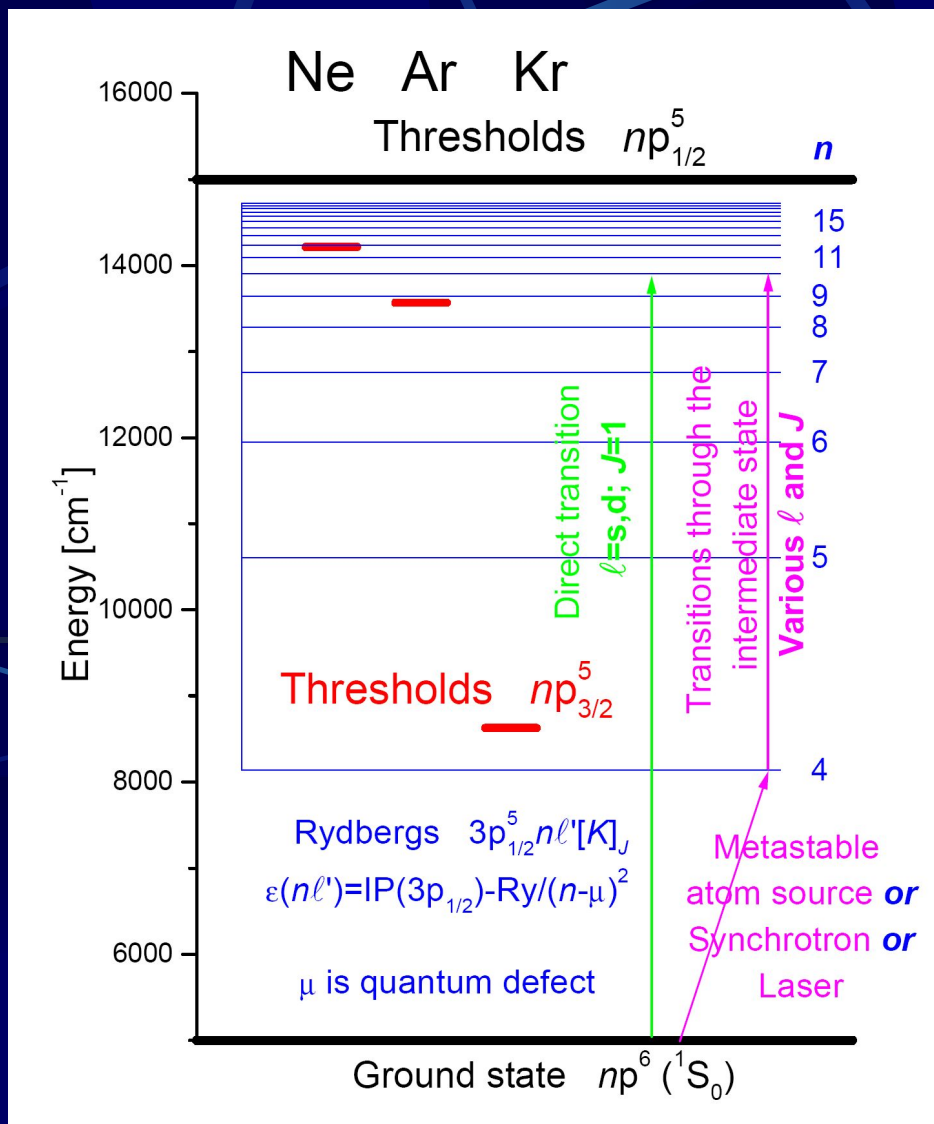
Ar $2p_2$ $4p'[1/2]_1 \rightarrow n d'/s'$



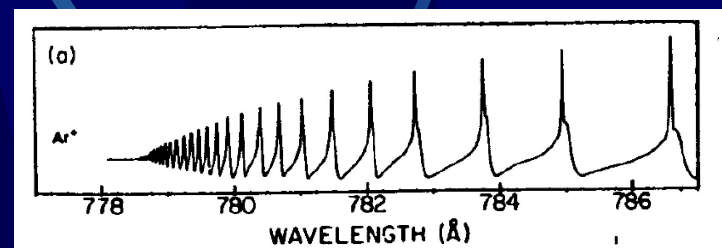
Ar $2p_8$ $4p[5/2]_2 \rightarrow n d'/s'$



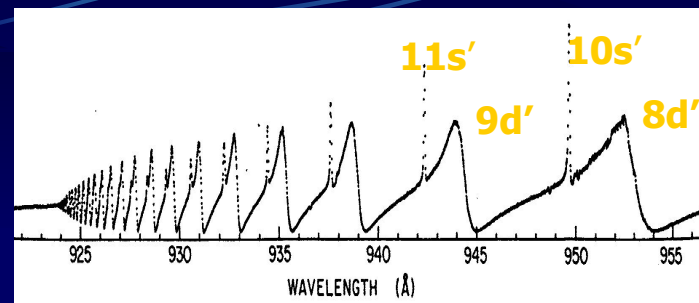
Энергетический масштаб



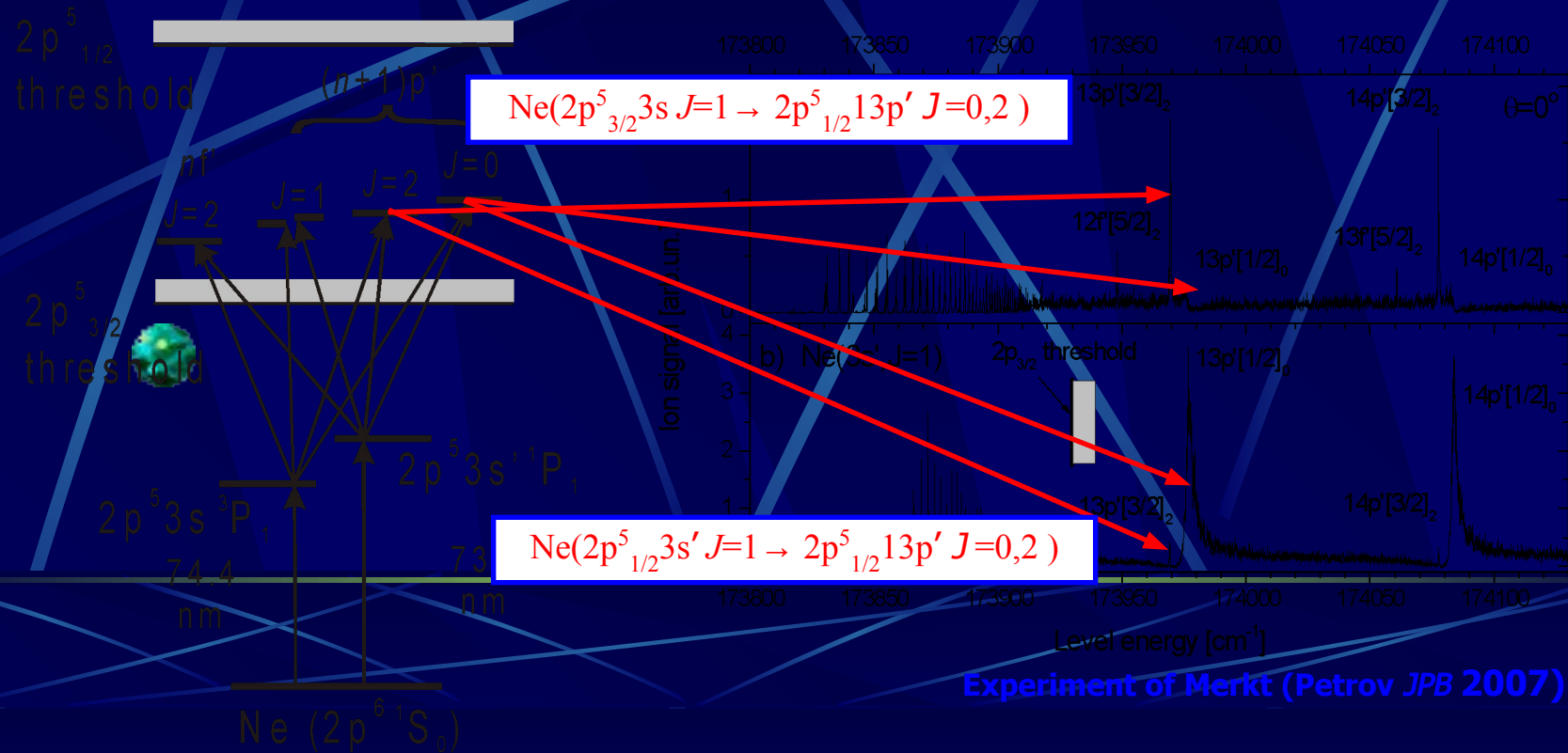
Ar



Xe



Форма резонансов (Ne)



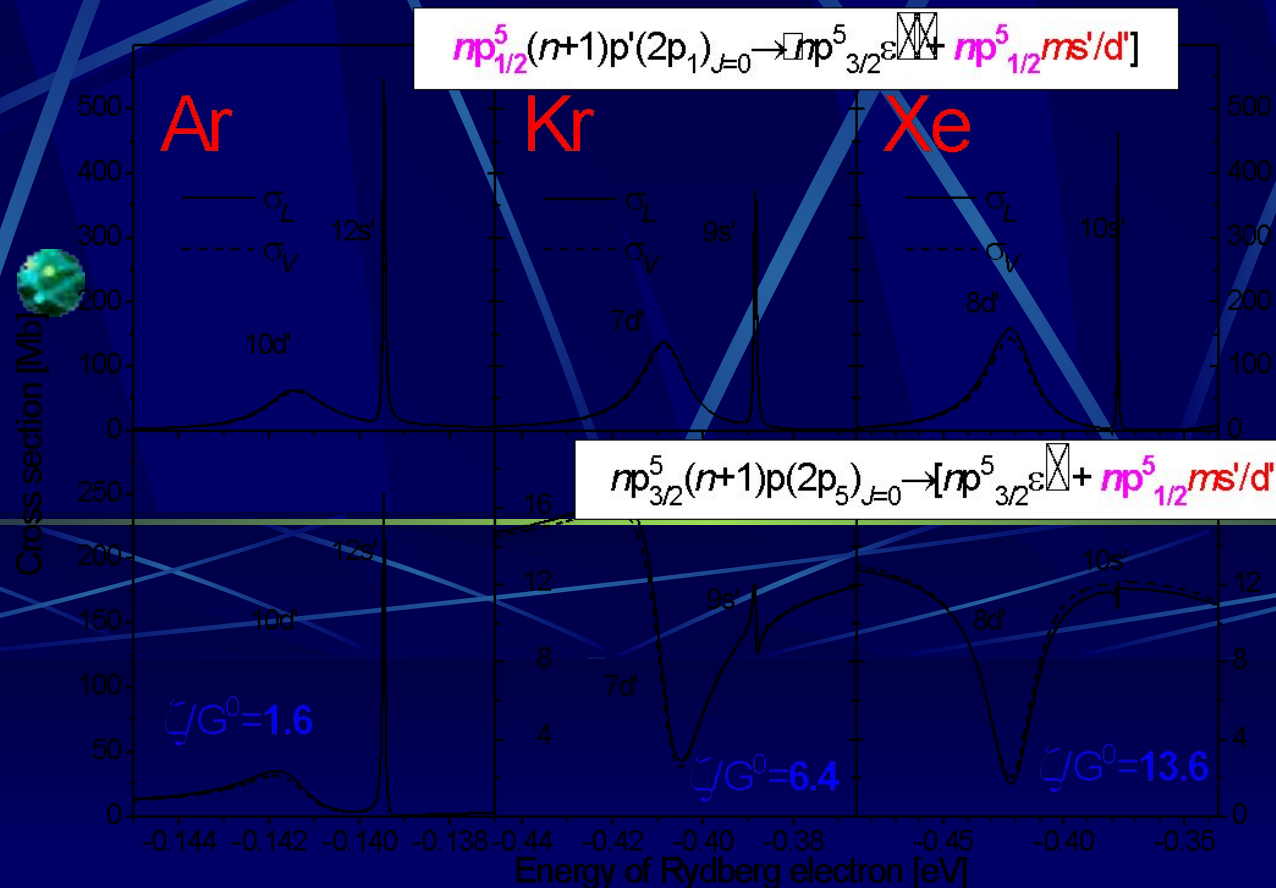
Experiment of Merkt (Petrov *JPB* 2007)

Strong interference between the following pathways

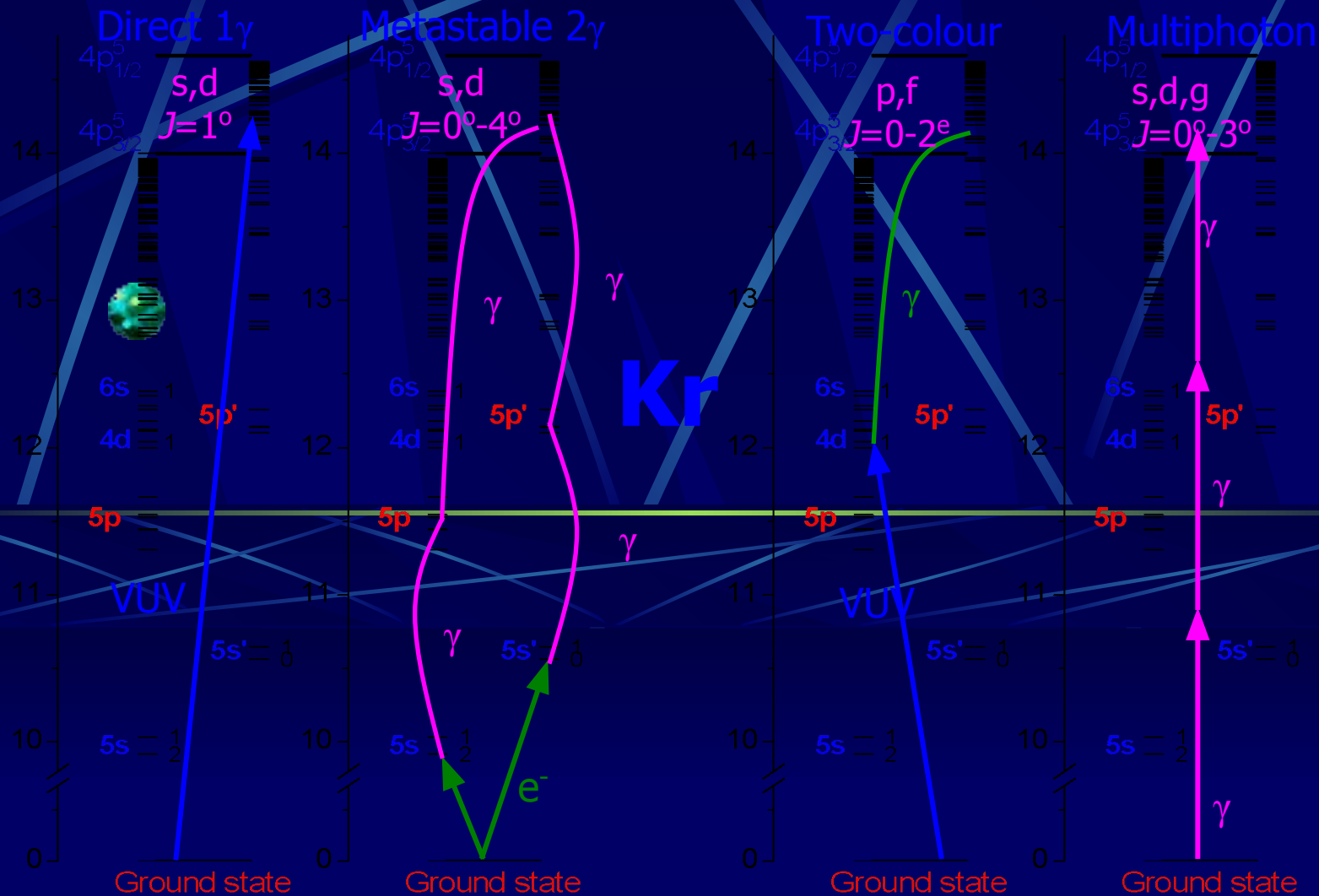


Новосибирск, 24-27 мая 2010 года

Форма резонансов (Rg начальное состояние $J=0$)



Энергетический масштаб и экспериментальные схемы



Ar 2p, 4p[5/2]₃ → n l' / e l' cross sections

