

*Ломоносовские
чтения*



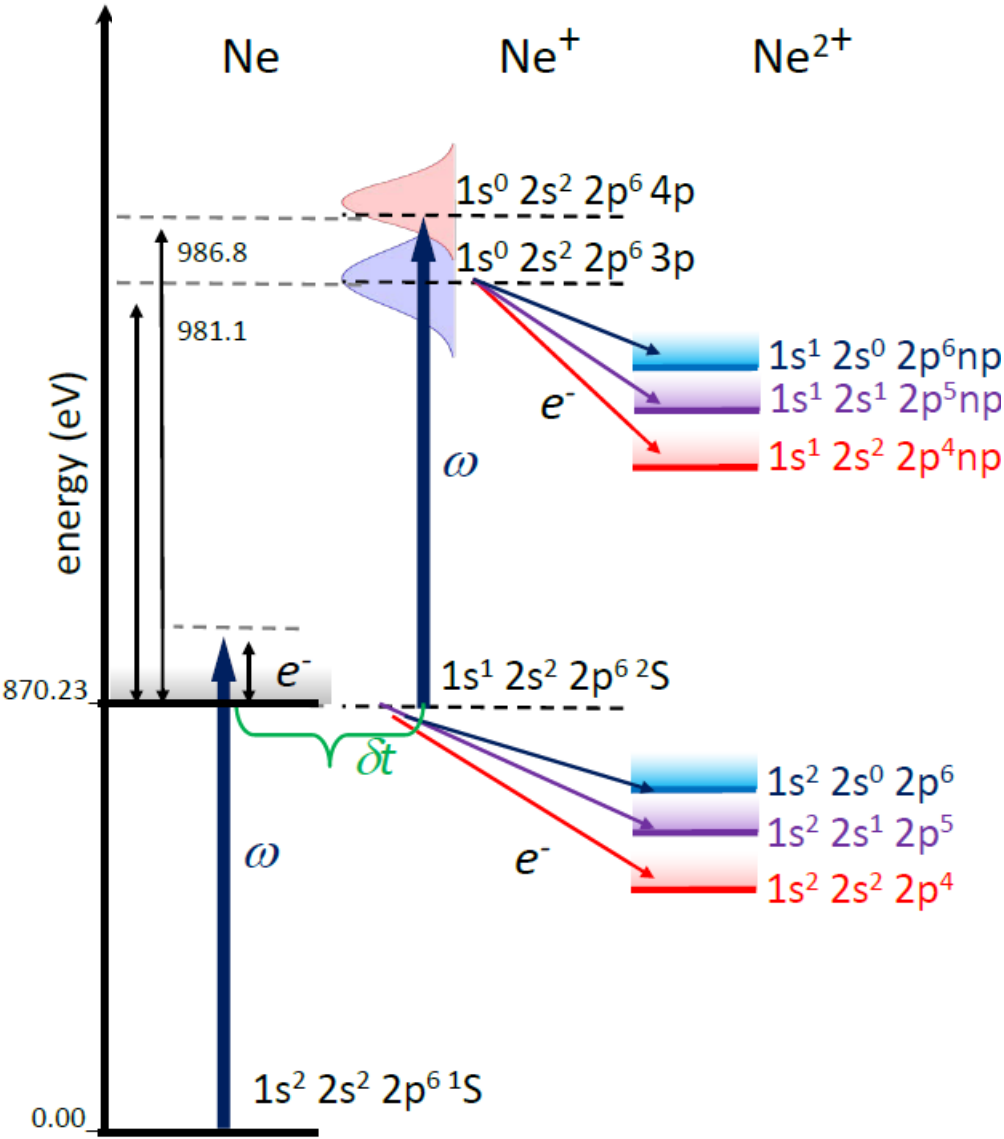
Эволюция двойной вакансии на $1s$ -оболочке неона в поле высокоинтенсивного импульса лазера на свободных электронах

аспирант Киселев М.Д.

с.н.с. Грызлова Е.В., в.н.с. Грум-Гржимайло А.Н.

21 апреля 2022

Множественная ионизация атома неона для энергий фотонов ниже порога ионизации 1s-оболочки иона неона





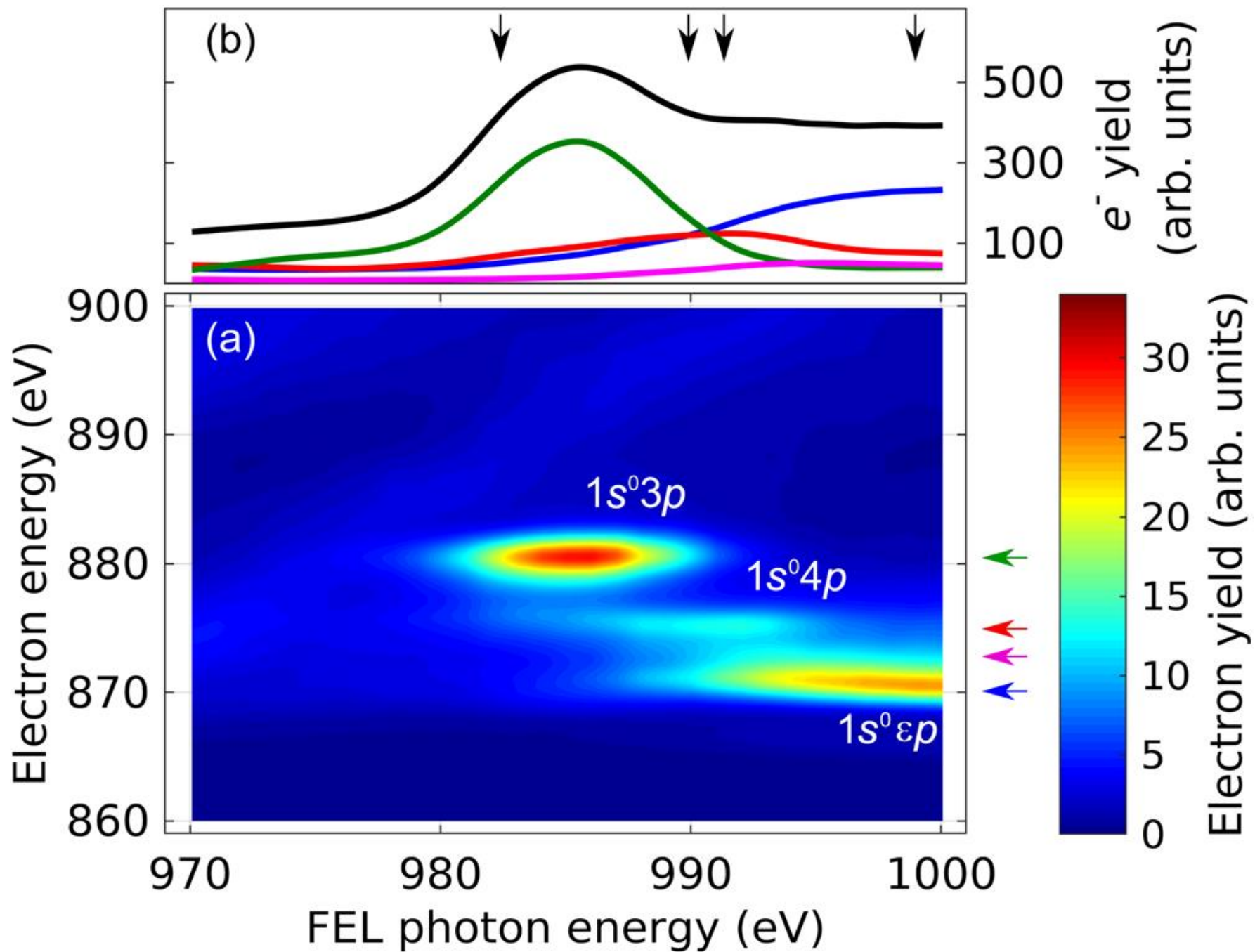
**Первое измерение
на линии European XFEL
The SQS (Small Quantum
Systems)
instrument, *M. Meyer***

$$\tau_{XFEL} \sim 25 \text{ fs}$$

Linear polarization
time-of-flight (TOF)
detector

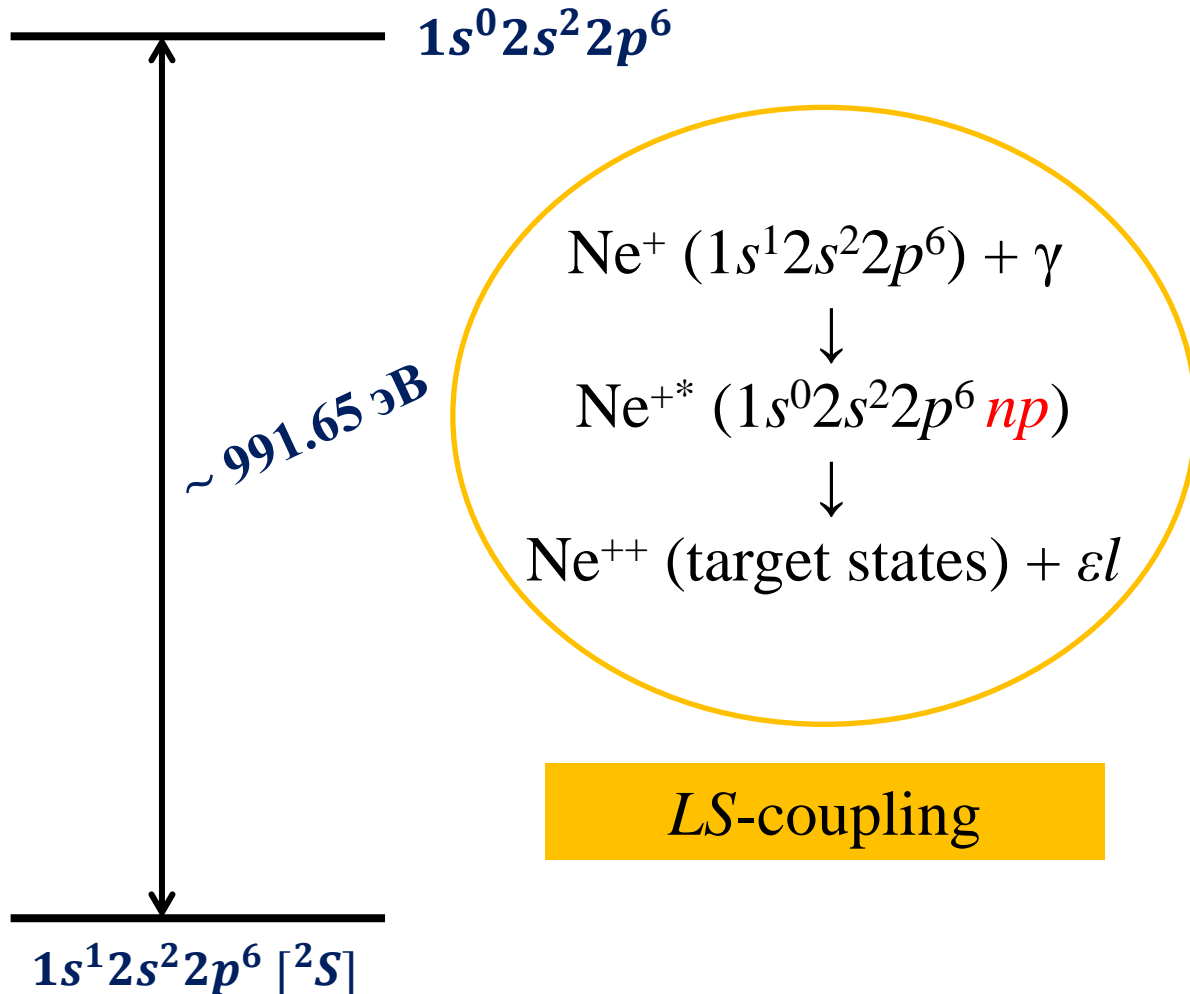
$$\Gamma \sim 8.5 \text{ eV (FWHM)}$$

$$\gamma \sim 2 \text{ eV (FWHM)}$$



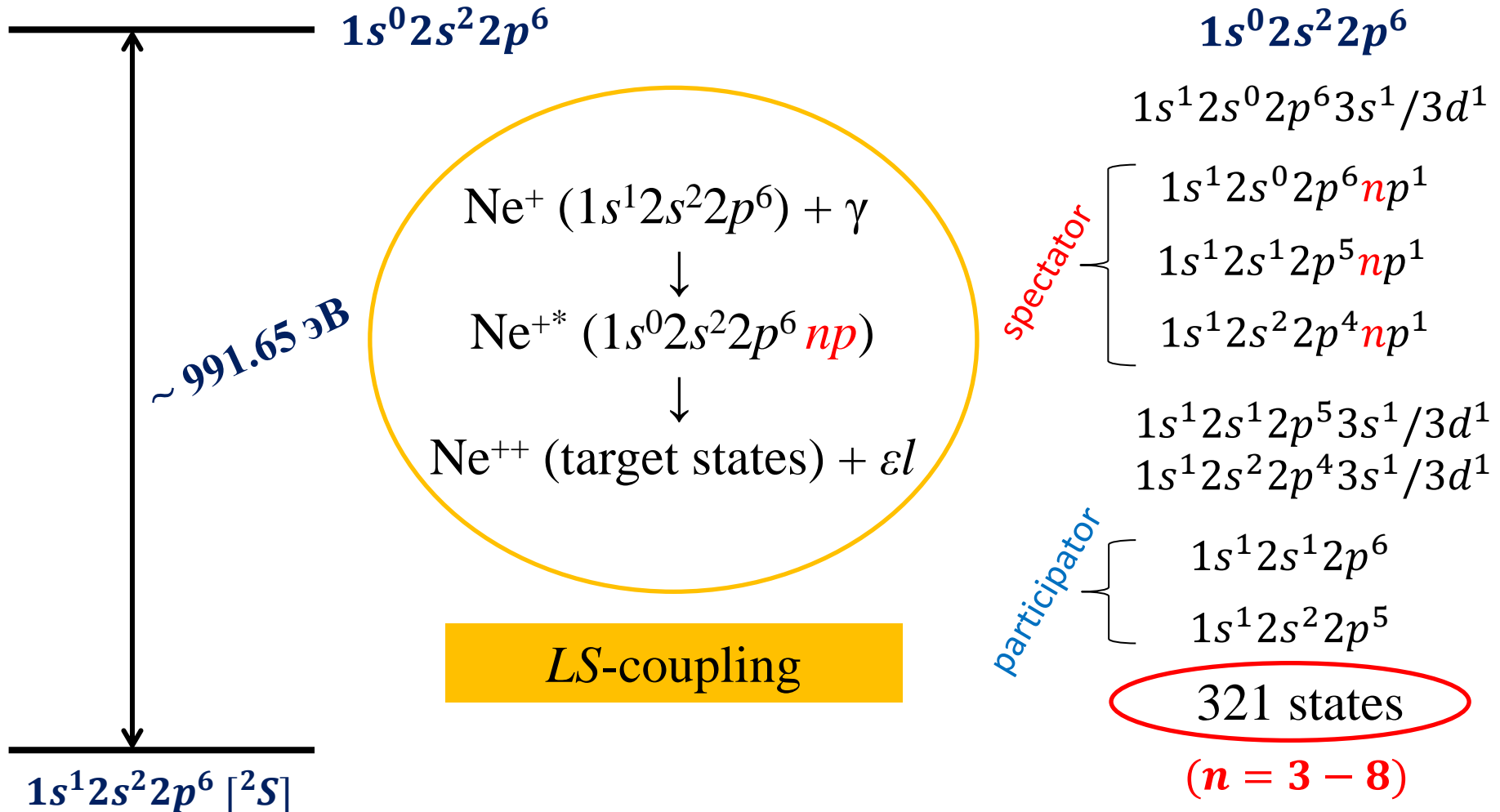
$$\text{Ne}^+ 1s^0 2s^2 2p^6 np \quad (n \geq 3)$$

Theory: R-matrix method, BSR¹



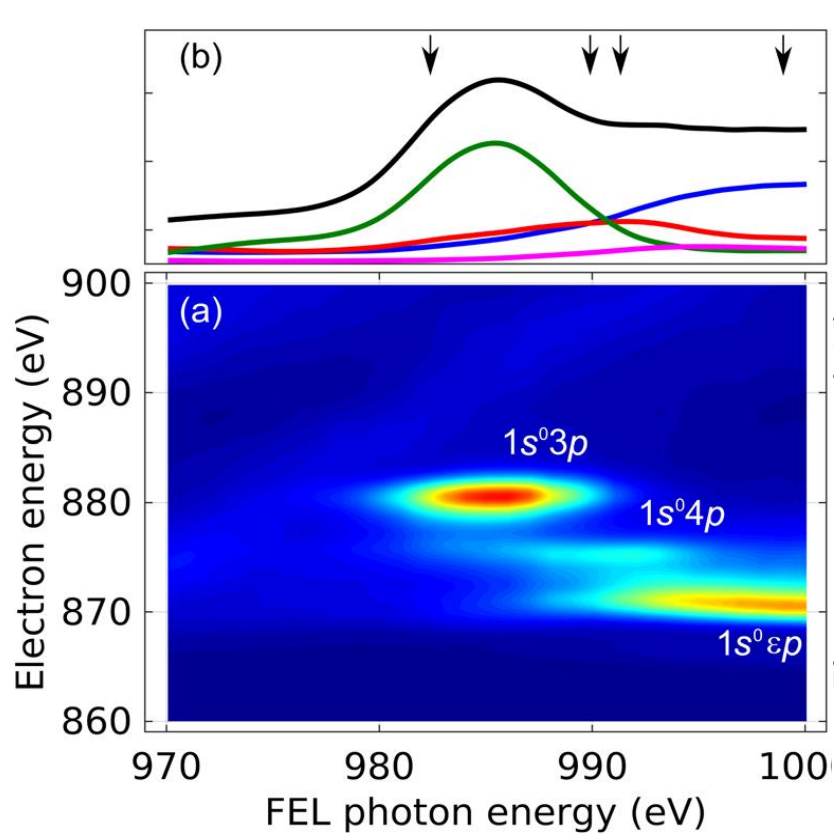
¹ (O. Zatsarinny, *Comput. Phys. Comm.* **174** (2006) 273-356)

$\text{Ne}^+ 1s^0 2s^2 2p^6 np \ (n \geq 3)$
 Theory: R-matrix method, BSR¹

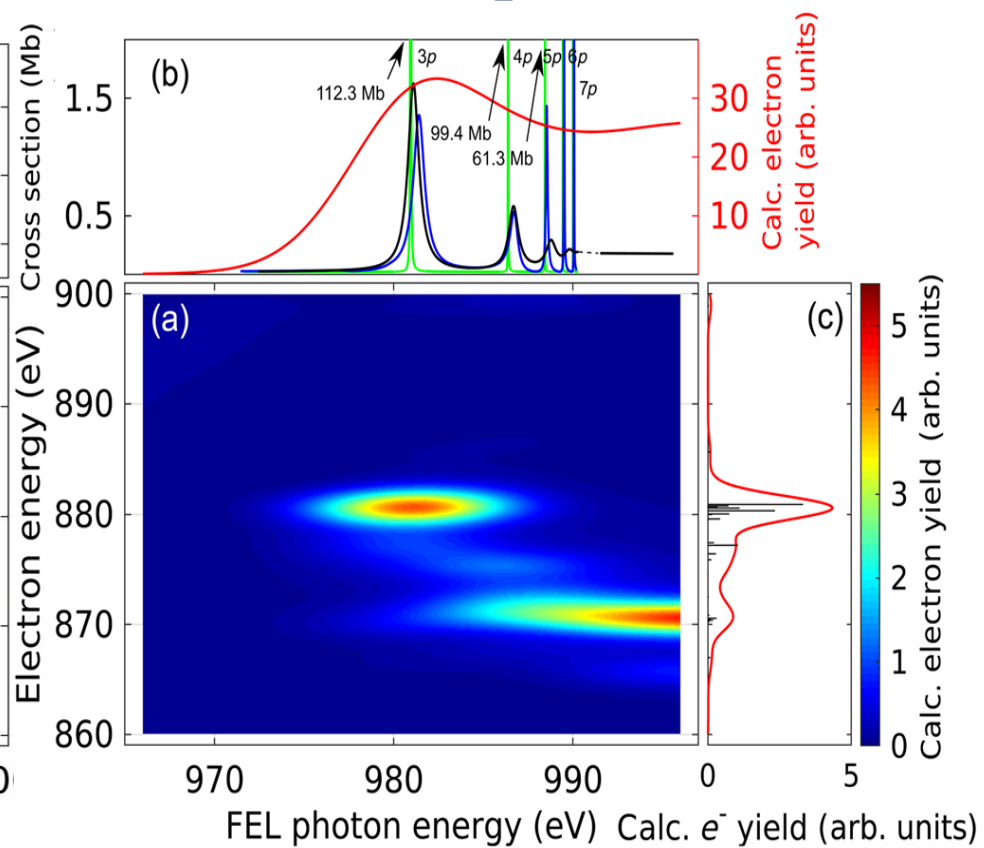


¹ (O. Zatsarinny, *Comput. Phys. Comm.* **174** (2006) 273-356)

Эксперимент



Теория



- Продемонстрирована возможность экспериментального наблюдения очень короткоживущих (~ 2.4 фс) экзотических резонансных состояний с двойной вакансией на К-оболочке неона, образующихся под действием импульса лазера на свободных электронах, методами электронной спектроскопии;
- Теоретически успешно интерпретированы данные эксперимента, а именно определены механизмы образования и доминирующие каналы распада состояний с глубокой двойной вакансией.

Работа опубликована:
T. Mazza *et al.*,
Mapping Resonance Structures in Transient Core-Ionized Atoms
(Phys. Rev. X **10**, 041056 (2020))
10.1103/PhysRevX.10.041056

only Participator configurations (\mathcal{P} -model)

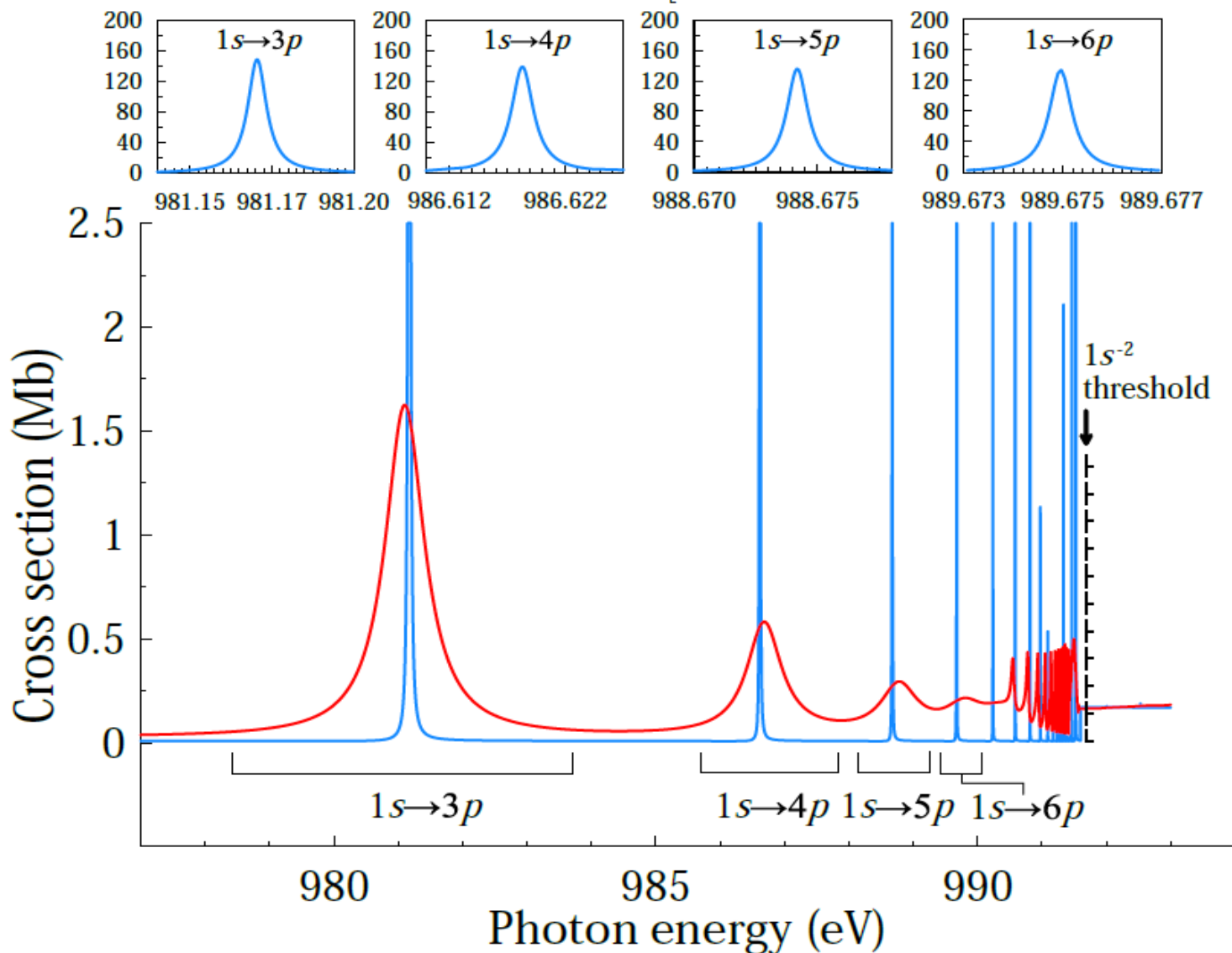
$$1s^1 2s^2 2p^5, 1s^0 2s^2 2p^6$$

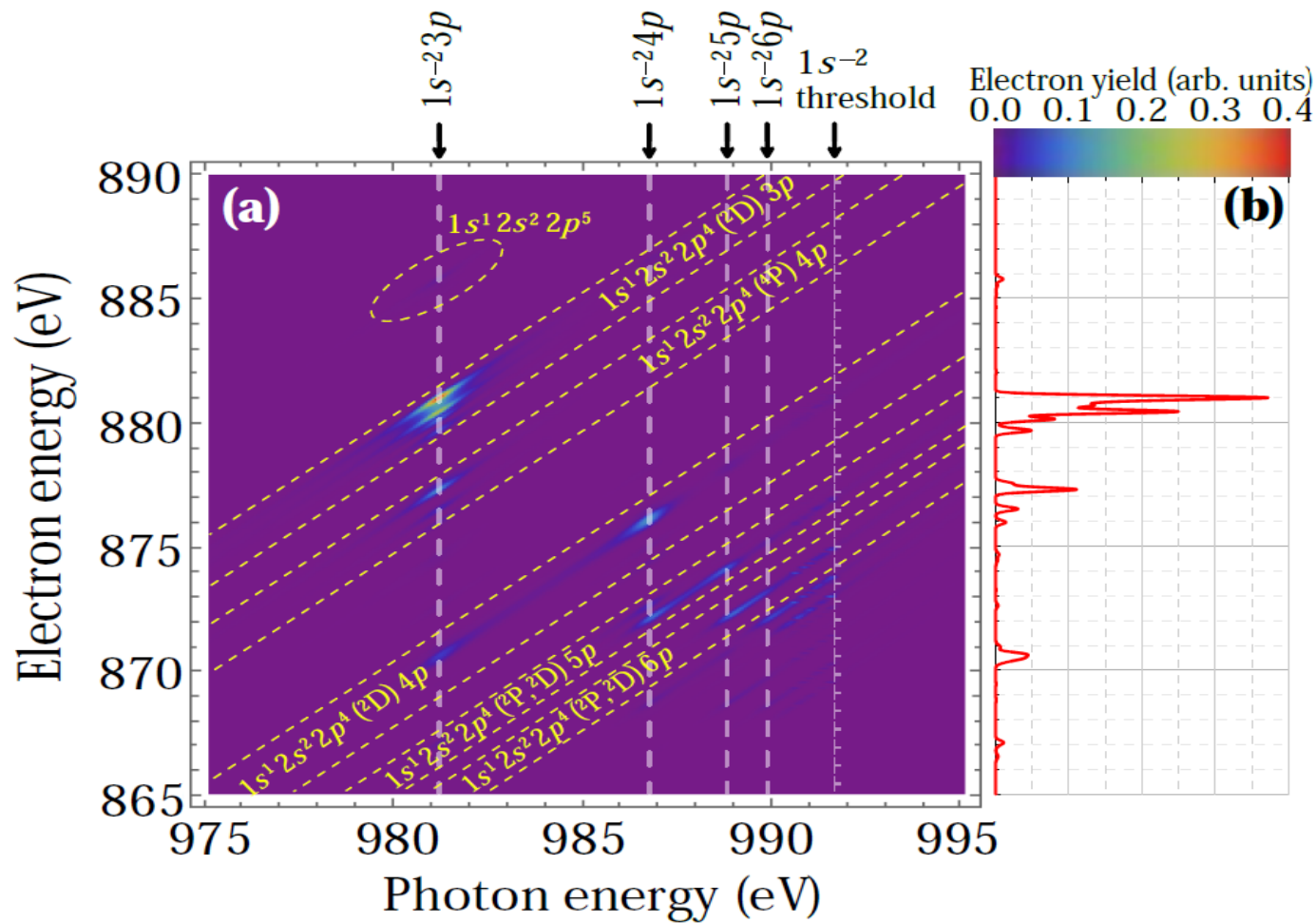
add to the \mathcal{P} -model Spectator configurations (\mathcal{SP} -model)

$$1s^1 2s^2 2p^5, 1s^1 2s^1 2p^6, 1s^0 2s^2 2p^6,$$

$$[1s^1 2s^2 2p^4, 1s^1 2s^0 2p^6, 1s^0 2s^2 2p^5, 1s^1 2s^1 2p^5, 1s^0 2s^1 2p^6]_{3s/3d},$$

$$[1s^1 2s^2 2p^4, 1s^1 2s^0 2p^6, 1s^0 2s^2 2p^5, 1s^1 2s^1 2p^5, 1s^0 2s^1 2p^6]_{np} (n = 3 - 8)$$





В рамках SP -модели для $1s^{-2}3p$ -резонанса:

< 3% - participator;

69.7% - spectator, затрагивающие только $2p$ -оболочку;

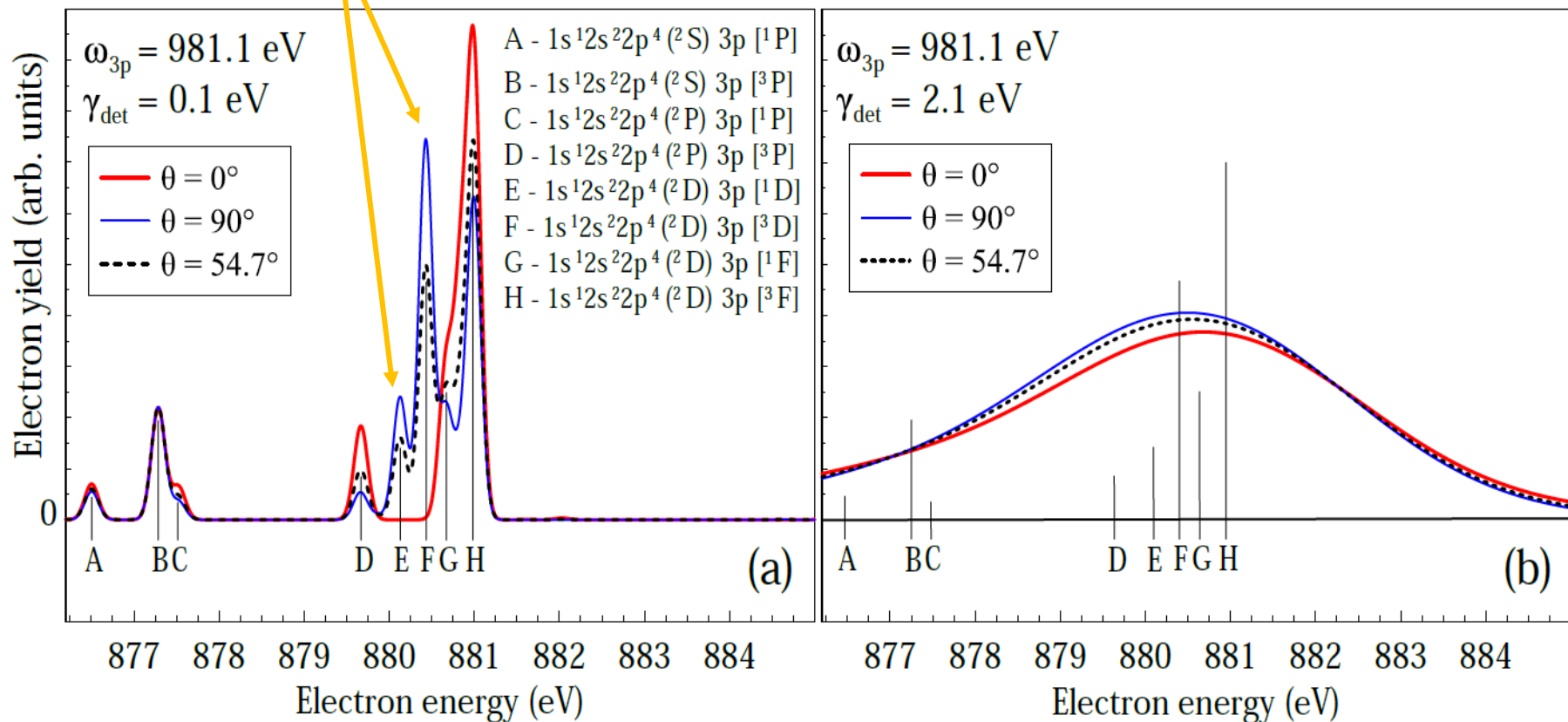
16.5% - spectator, затрагивающие $2s$ -оболочку с образованием как $2s^{-1}$, так и $2s^{-2}$ состояний;

11.7% - shake-up $3p \rightarrow np$ ($n \geq 4$).

Угловые распределения фотоэлектронов

$$W(\theta) = W_0(1 + \beta P_2(\cos \theta))$$

$$\beta = -1$$



Заселённости атомных и ионных состояний в поле интенсивного импульса ЛСЭ

$$j(t) = j_0 \exp(-4 \ln 2 t^2 / \tau^2)$$

$$j_0 = \frac{2\sqrt{\ln 2} F}{\sqrt{\pi} \tau} = 0.0063634 \frac{F [\text{ph}/\text{\AA}^2]}{\tau [\text{fs}]}$$

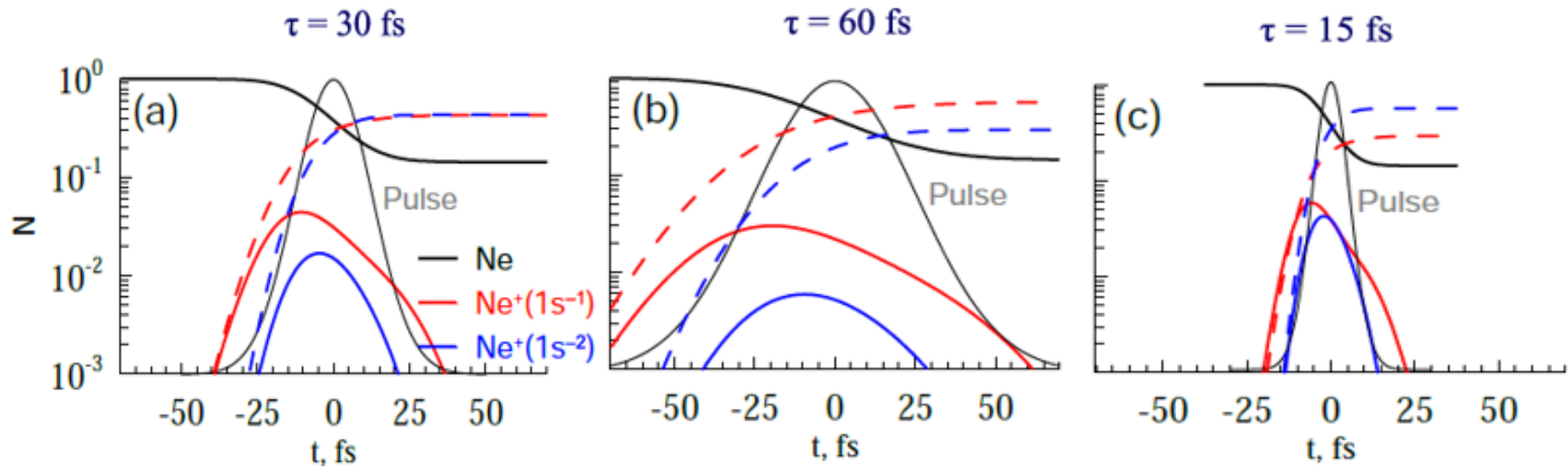
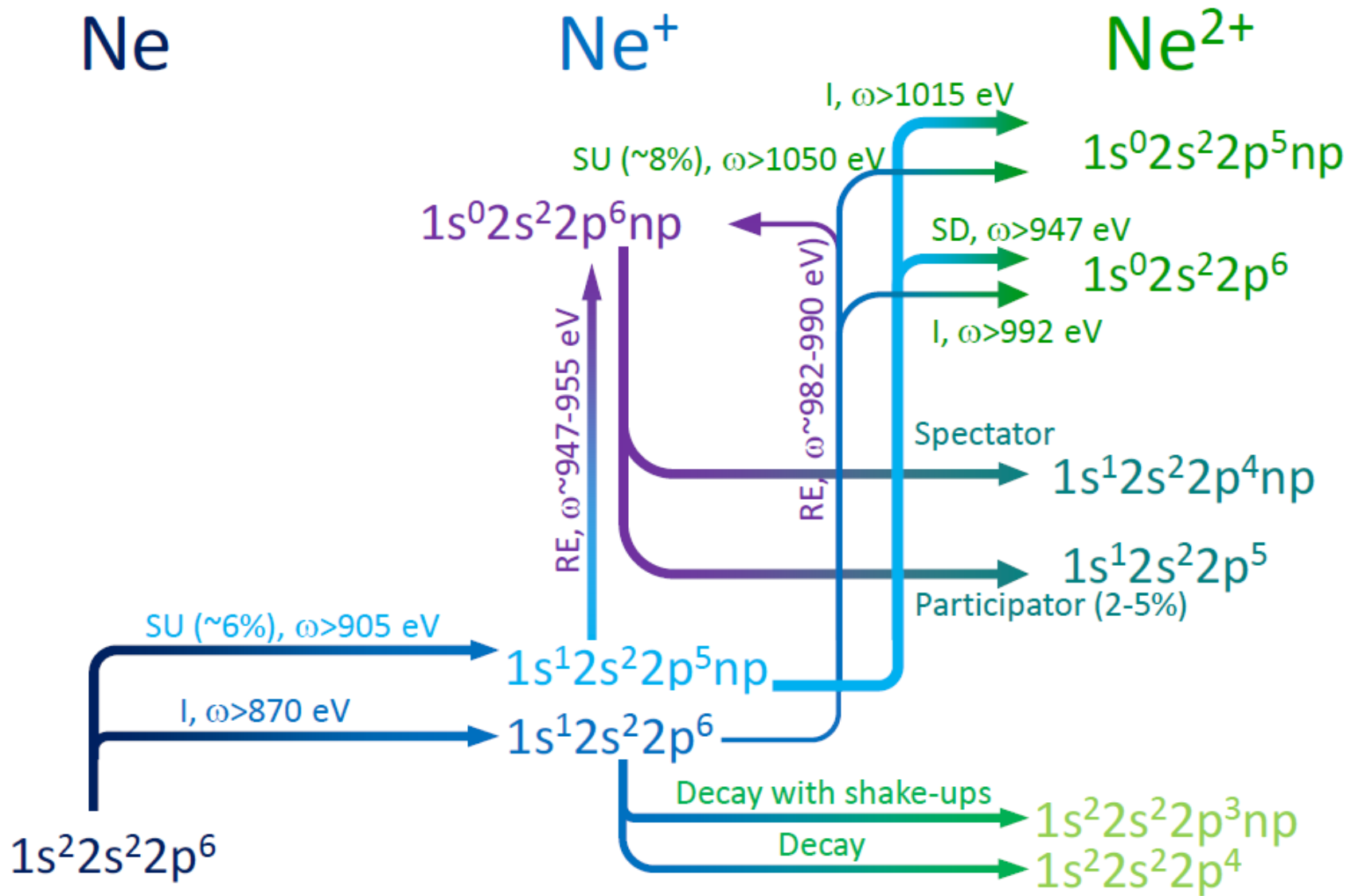


Схема возможных процессов для неона в поле интенсивного импульса ЛСЭ



Заключение:

- Подробно теоретически исследованы образование и распад DCH-состояний на глубокой $1s$ -оболочке иона неона при облучении интенсивным электромагнитным рентгеновским полем;
- Проанализирована динамическая конкуренция между распадом и возбуждением состояния одиночной дырки и найдены параметры импульса, соответствующие различным динамическим режимам. Проанализирована роль каналов с пассивным (spectator) и активным (participator) электронами и показано, что наиболее важными из них являются каналы пассивного типа, влияющие только на валентную $2p$ -оболочку;
- Рассчитаны угловые распределения фотоэлектронов, соответствующих различным остаточным ионным состояниям. В частности, предсказано полное отсутствие фотоэлектронов, соответствующих остаточному ионному состоянию $1s^1 2s^2 2p^n m p^n \ ^2S_f^{+1} D$ в направлении поляризации электрического поля.

Работа опубликована:
M.D. Kiselev *et al.*,
Mechanisms of 1s Double-Core-Hole Excitation and Decay in Neon
(Atoms **9**(4), 114 (2021))
10.3390/atoms9040114

Спасибо за внимание!

Back-up slides

Множественная ионизация атома неона для энергий фотонов ниже (a) или выше (b) порога ионизации 1s-оболочки иона неона

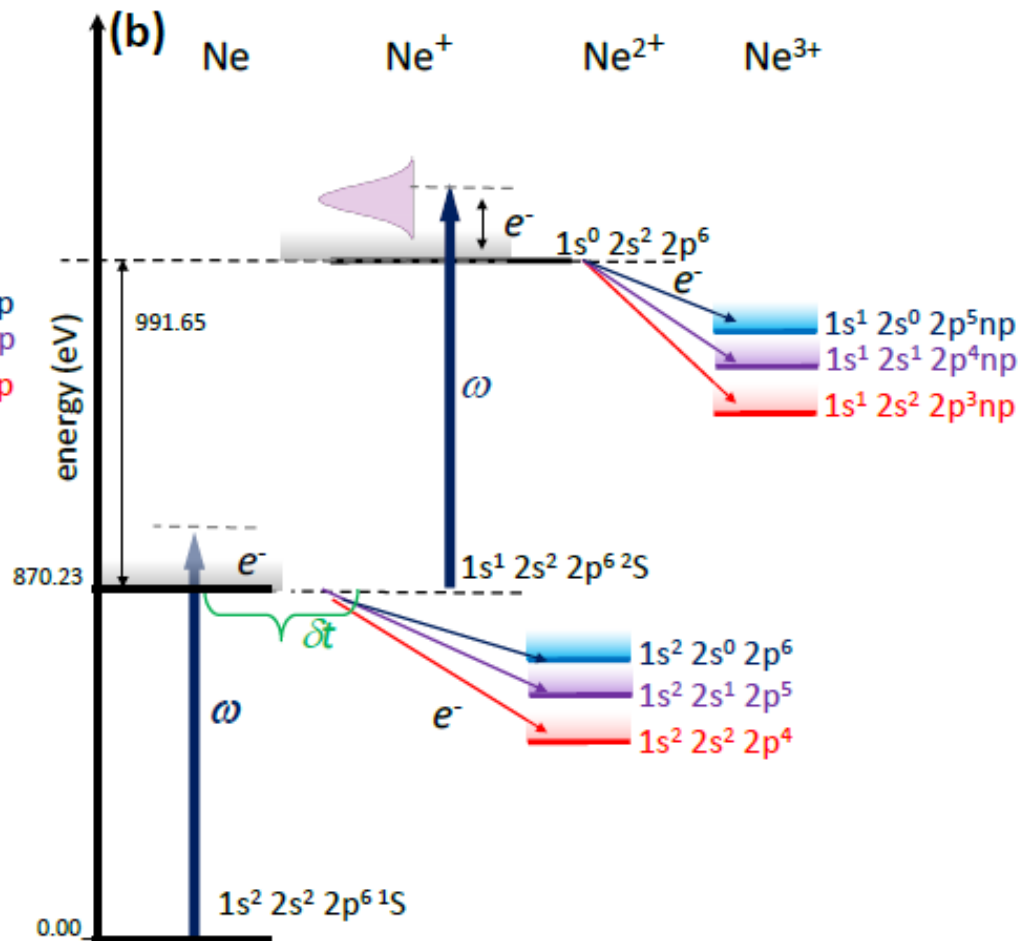
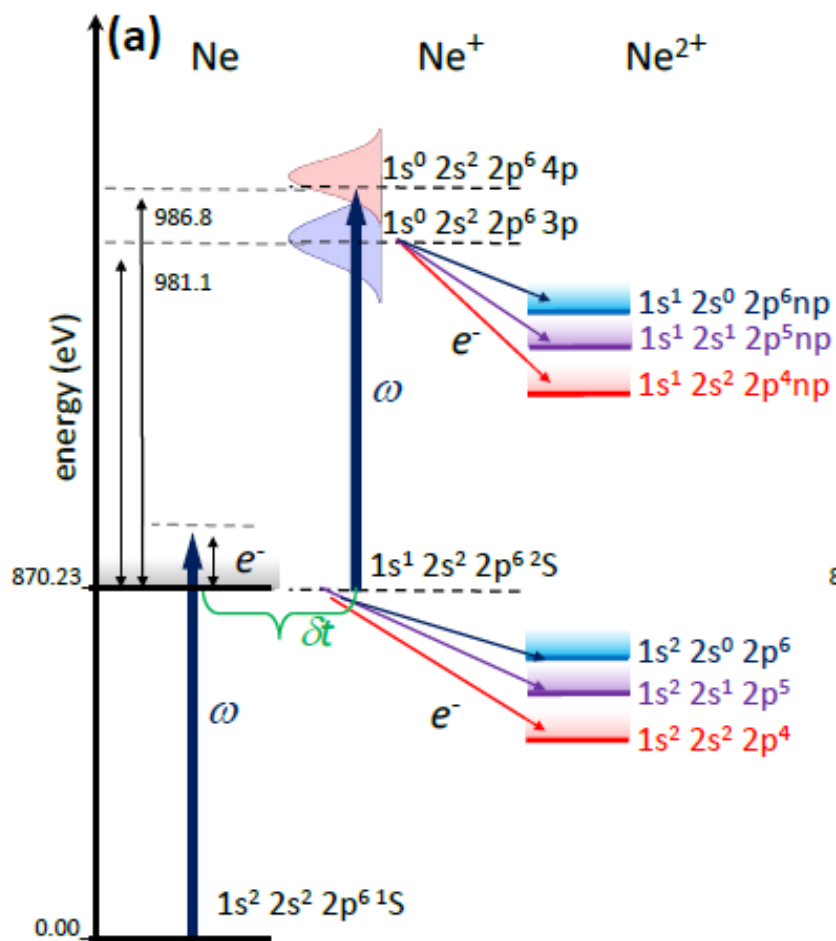
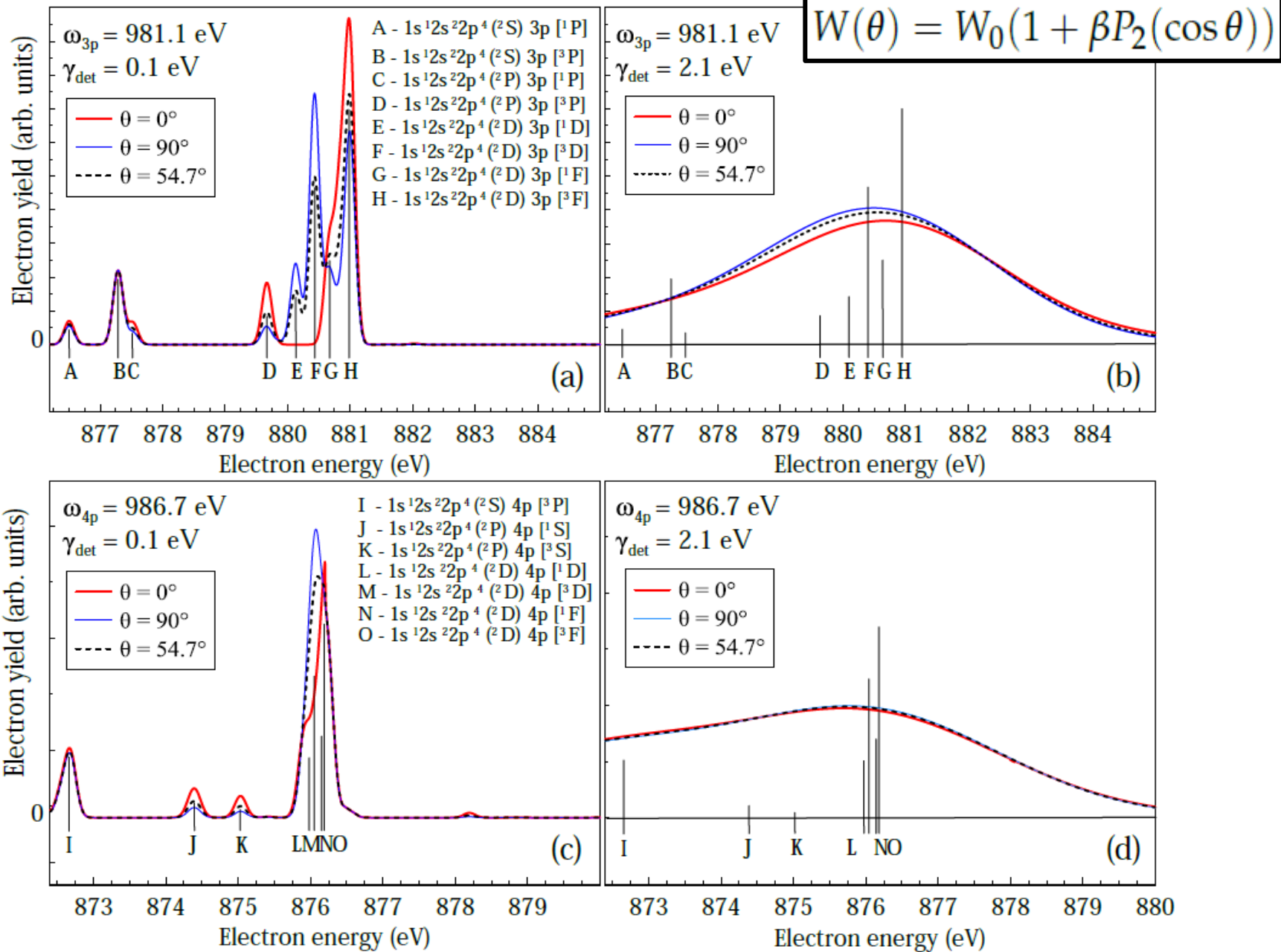
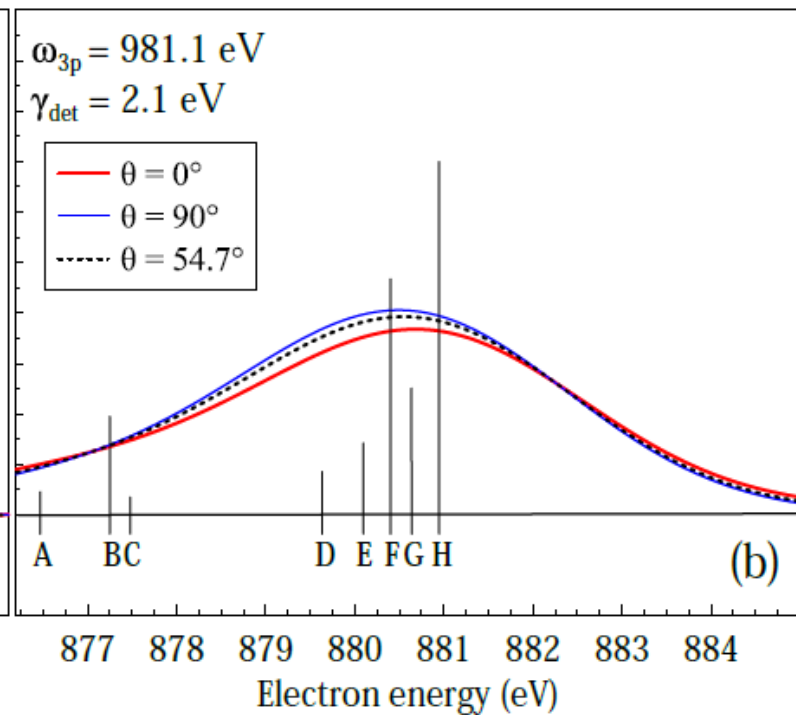
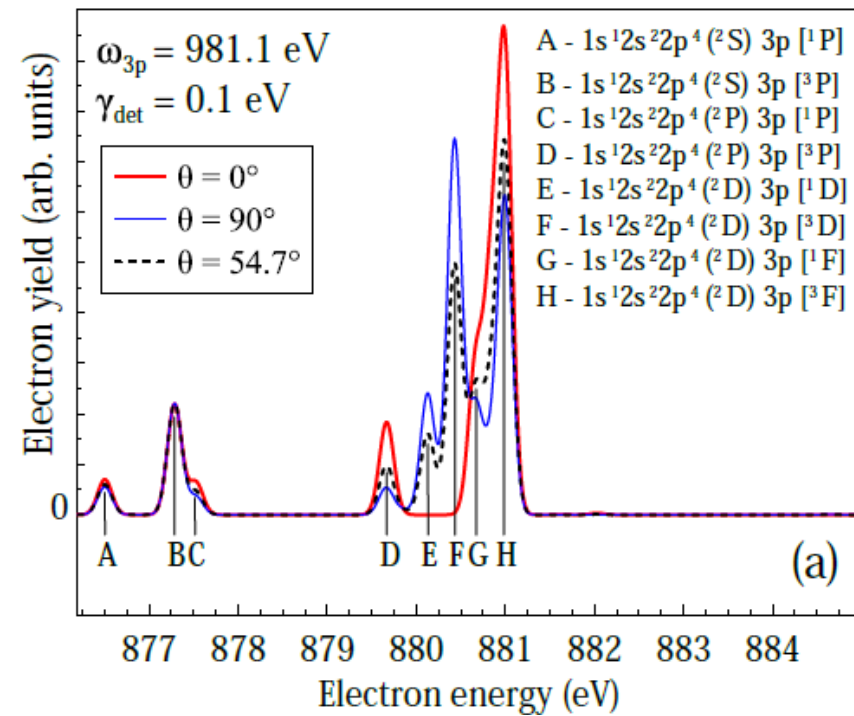


Table 1. Widths and lifetimes for the $1s^{-2}np$ ($n = 3-6$) states obtained in the two models.

Configuration	Model \mathcal{P}	Model \mathcal{SP}	Model \mathcal{P}	Model \mathcal{SP}
	Width, meV		Lifetime, fs	
$1s^{-2}3p$	5.6	740	117.5	0.88
$1s^{-2}4p$	2.3	650	286.1	1.02
$1s^{-2}5p$	1.1	-	598.4	-
$1s^{-2}6p$	0.57	-	1154.8	-

Угловые распределения фотоэлектронов





Экспериментальные данные
 (не опубликованы)
 М. Meyer, Т. Mazza *et al.*

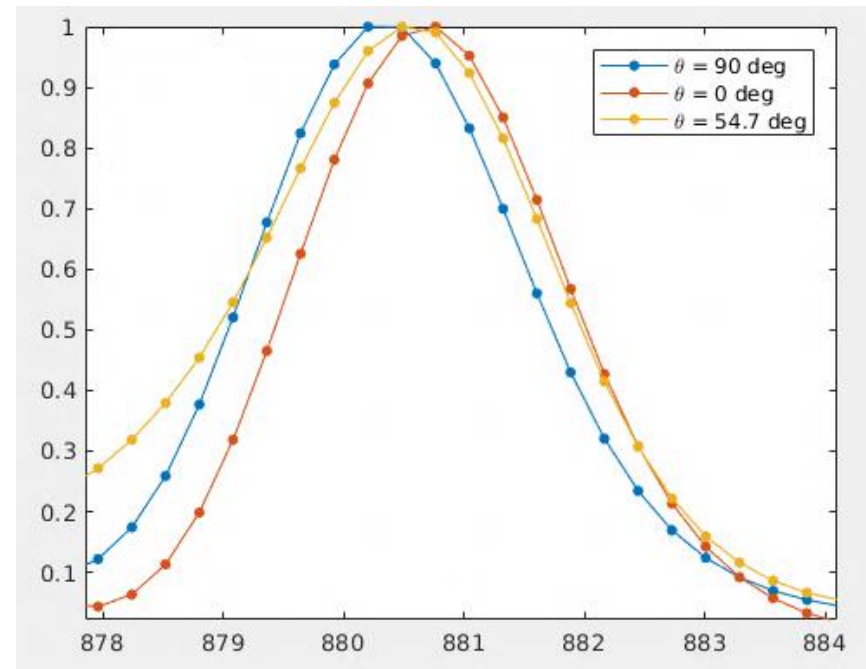


Table 2. $1s^{-2}3p$ autoionizing branching ratios (BR, in %) for the Ne^+ states obtained in the two models.

Target	Configuration	Term	BR (Model \mathcal{P})	BR (Model \mathcal{SP})
$1s^0 2s^2 2p^6 3p$				
1	$1s^1 2s^2 2p^5$	3P	62.0	1.12
2	$1s^1 2s^2 2p^5$	1P	38.0	0.60
3	$1s^1 2s^1 2p^6$	3S	-	0.68
4	$1s^1 2s^1 2p^6$	1S	-	0.29
5	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2S] 3p$	1P	-	1.85
6	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2S] 3p$	3P	-	6.77
7	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2P] 3p$	1P	-	1.40
8	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2P] 3p$	3P	-	2.81
9	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2D] 3p$	1D	-	4.93
10	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2D] 3p$	3D	-	15.22
11	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2D] 3p$	1F	-	7.23
12	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2D] 3p$	3F	-	21.61
13	$1s^1 2s^2 2p^4 [^4P] 3p$	3D	-	0.003
14	$1s^1 2s^2 2p^4 [^4P] 3p$	3P	-	0.62
15	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2D] 3p$	3P	-	4.70
16	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2D] 3p$	1P	-	2.15
17	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2P] 3p$	3D	-	0.19
18	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2P] 3p$	1D	-	0.18
19	$1s^1 2s^1 [^1S] 2p^5 [^2P] 3p$	3S	-	0.62
20	$1s^1 2s^1 [^1S] 2p^5 [^2P] 3p$	3D	-	3.60
21	$1s^1 2s^1 [^1S] 2p^5 [^2P] 3p$	1D	-	1.23
22	$1s^1 2s^1 [^1S] 2p^5 [^2P] 3p$	1P	-	0.74
23	$1s^1 2s^1 [^1S] 2p^5 [^2P] 3p$	1S	-	0.32
24	$1s^1 2s^1 [^1S] 2p^5 [^2P] 3p$	3P	-	2.21
25	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^2P] 3p$	3D	-	2.06
26	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^2P] 3p$	3P	-	1.06
27	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^2P] 3p$	1P	-	0.44
28	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^4P] 3p$	3D	-	5×10^{-4}
29	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^4P] 3p$	3P	-	3×10^{-4}
30	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^4P] 3p$	3S	-	0.02
31	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^2P] 3p$	1S	-	0.14
32	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^2P] 3p$	1D	-	0.70
33	$1s^1 2s^0 2p^6 3p$	3P	-	2.45
34	$1s^1 2s^0 2p^6 3p$	1P	-	0.84
Sum			100.0	88.33

Table 3. $1s^{-2}4p$ autoionizing branching ratios (BR, in %) for the Ne^+ states obtained in the two models.

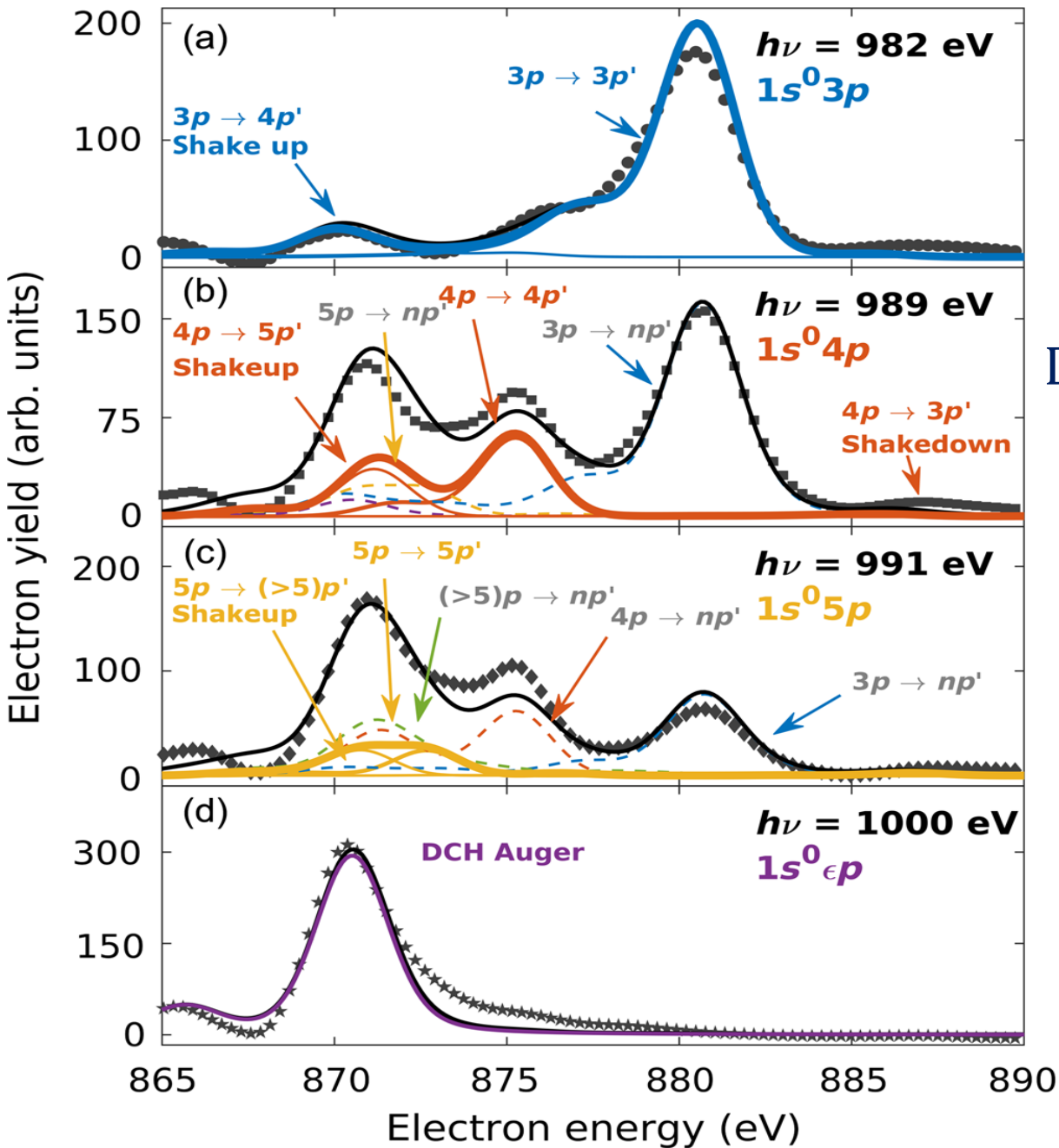
Target	Configuration	Term	BR (Model \mathcal{P})	BR (Model \mathcal{SP})
$1s^0 2s^2 2p^6 4p$				
1	$1s^1 2s^2 2p^5$	3P	96.5	1.70
2	$1s^1 2s^2 2p^5$	1P	3.5	0.55
3	$1s^1 2s^1 2p^6$	3S	-	2.05
4	$1s^1 2s^1 2p^6$	1S	-	0.38
5	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2S] 4p$	1P	-	1.59
6	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2S] 4p$	3P	-	4.64
7	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2P] 4p$	1P	-	0.04
8	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2P] 4p$	3P	-	0.65
9	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2D] 4p$	1D	-	3.46
10	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2D] 4p$	3D	-	10.00
11	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2D] 4p$	1F	-	4.64
12	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2D] 4p$	3F	-	13.42
13	$1s^1 2s^2 2p^4 [^4P] 4p$	3D	-	2×10^{-4}
14	$1s^1 2s^2 2p^4 [^4P] 4p$	3P	-	0.04
15	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2D] 4p$	3P	-	2.94
16	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2D] 4p$	1P	-	1.65
17	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2P] 4p$	3D	-	0.003
18	$1s^1 2s^2 2p^4 [^2P] 4p$	1D	-	0.014
19	$1s^1 2s^1 [^1S] 2p^5 [^2P] 4p$	3S	-	0.72
20	$1s^1 2s^1 [^1S] 2p^5 [^2P] 4p$	3D	-	3.77
21	$1s^1 2s^1 [^1S] 2p^5 [^2P] 4p$	1D	-	1.30
22	$1s^1 2s^1 [^1S] 2p^5 [^2P] 4p$	1P	-	0.79
23	$1s^1 2s^1 [^1S] 2p^5 [^2P] 4p$	1S	-	0.34
24	$1s^1 2s^1 [^1S] 2p^5 [^2P] 4p$	3P	-	2.32
25	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^2P] 4p$	3D	-	2.21
26	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^2P] 4p$	3P	-	1.36
27	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^2P] 4p$	1P	-	0.48
28	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^4P] 4p$	3D	-	3.1×10^{-4}
29	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^4P] 4p$	3P	-	1.4×10^{-4}
30	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^4P] 4p$	3S	-	0.01
31	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^2P] 4p$	1S	-	0.14
32	$1s^1 2s^1 [^3S] 2p^5 [^2P] 4p$	1D	-	0.77
33	$1s^1 2s^0 2p^6 4p$	3P	-	2.62
34	$1s^1 2s^0 2p^6 4p$	1P	-	0.91
Sum			100.0	65.51

Table 4. Probabilities (in %) for shake-up processes in atomic ionization for the extensive model at photon energy $\hbar\omega = 1080$ eV.

Target	Configuration	Term	Probability (Model $\mathcal{SP}^{(0)}$)
1	$1s^1 2s^2 2p^6$	2S	93.60
2	$1s^1 2s^2 2p^5 [^3P] 3p$	2D	0.07
3	$1s^1 2s^2 2p^5 [^3P] 3p$	2P	0.03
4	$1s^1 2s^2 2p^5 [^3P] 3p$	2S	0.90
5	$1s^1 2s^2 2p^5 [^1P] 3p$	2D	0.08
6	$1s^1 2s^2 2p^5 [^1P] 3p$	2P	0.017
7	$1s^1 2s^2 2p^5 [^1P] 3p$	2S	1.40
Sum (3p)			2.50
8	$1s^1 2s^2 2p^5 [^3P] 4p$	2D	0.02
9	$1s^1 2s^2 2p^5 [^3P] 4p$	2P	0.012
10	$1s^1 2s^2 2p^5 [^3P] 4p$	2S	1.22
11	$1s^1 2s^2 2p^5 [^1P] 4p$	2D	0.021
12	$1s^1 2s^2 2p^5 [^1P] 4p$	2P	0.006
13	$1s^1 2s^2 2p^5 [^1P] 4p$	2S	1.16
Sum (4p)			2.44
14	$1s^1 2s^2 2p^5 [^3P] 5p$	2D	0.01
15	$1s^1 2s^2 2p^5 [^3P] 5p$	2P	0.005
16	$1s^1 2s^2 2p^5 [^3P] 5p$	2S	0.97
17	$1s^1 2s^2 2p^5 [^1P] 5p$	2D	0.009
18	$1s^1 2s^2 2p^5 [^1P] 5p$	2P	0.003
19	$1s^1 2s^2 2p^5 [^1P] 5p$	2S	0.45
Sum (5p)			1.45

Table 5. Same as Table 4 for ionization of the $1s^1 2s^2 2p^6 2S$ Ne^+ ion.

Target	Configuration	Term	Probability (Model $\mathcal{SP}^{(0)}$)
1	$1s^0 2s^2 2p^6$	1S	92.20
2	$1s^0 2s^2 2p^5 3p$	3D	0.87
3	$1s^0 2s^2 2p^5 3p$	3P	0.35
4	$1s^0 2s^2 2p^5 3p$	3S	0.25
5	$1s^0 2s^2 2p^5 3p$	1D	0.13
6	$1s^0 2s^2 2p^5 3p$	1P	0.04
7	$1s^0 2s^2 2p^5 3p$	1S	2.60
Sum (3p)			4.24
8	$1s^0 2s^2 2p^5 4p$	3D	0.33
9	$1s^0 2s^2 2p^5 4p$	3P	0.15
10	$1s^0 2s^2 2p^5 4p$	3S	0.08
11	$1s^0 2s^2 2p^5 4p$	1D	0.08
12	$1s^0 2s^2 2p^5 4p$	1P	0.025
13	$1s^0 2s^2 2p^5 4p$	1S	0.98
Sum (4p)			1.65
15	$1s^0 2s^2 2p^5 5p$	3D	0.17
18	$1s^0 2s^2 2p^5 5p$	3P	0.08
14	$1s^0 2s^2 2p^5 5p$	3S	0.03
16	$1s^0 2s^2 2p^5 5p$	1D	0.05
17	$1s^0 2s^2 2p^5 5p$	1P	0.03
19	$1s^0 2s^2 2p^5 5p$	1S	1.58
Sum (5p)			1.94



Dominant decay channel:



↓



(spectator transition)