

Теоретическая субмолекулярная физика

II.1 Угловое распределение частиц в фотопроцессах

- Общий принцип построения наблюдаемых
- Еще раз о дипольных и квадрупольных операторах
- Угловое распределение частиц без спина в дипольном приближении
 - s-состояние
 - поляризованное p-состояние
 - неполяризованное p-состояние
- Интерференция E1 и E2 амплитуд

Грызлова Е.В.
2020 г.

Общий принцип

Чистое начальное состояние $|jm\rangle\langle jm|$

Взаимодействие $\hat{O}|jm\rangle\langle jm|\hat{O}^+$

Суммирование по
интересующим
конечным состояниям

$$\sum_{\gamma} \langle \gamma | \hat{O} | jm \rangle \langle jm | \hat{O}^+ | \gamma \rangle$$

Общий принцип

Чистое начальное состояние $|jm\rangle\langle jm|$

Взаимодействие $\hat{O}|jm\rangle\langle jm|\hat{O}^+$


Суммирование по
интересующим
конечным состояниям

$$\sum_{\gamma} \langle \gamma | \hat{O} | jm \rangle \langle jm | \hat{O}^+ | \gamma \rangle$$


примеры

Частица без спина в
направлении $k=\{\theta\varphi\}$


$$\langle \vec{k} | \hat{O} | jm \rangle \langle jm | \hat{O}^+ | \vec{k} \rangle$$


$$\sum_{lm'l'm'} \langle Y_{lm}(\theta\varphi) | \hat{O} | jm \rangle^* \langle jm | \hat{O}^+ | Y_{l'm'}(\theta\varphi) \rangle$$

Частица с s и m_s в
направлении $k=\{\theta\varphi\}$


$$\sum_{lm'l'm'} \langle Y_{lm}(\theta\varphi) sm_s | \hat{O} | jm \rangle^* \langle jm | \hat{O}^+ | Y_{l'm'}(\theta\varphi) sm_s \rangle$$

Частица с s в
направлении $k=\{\theta\varphi\}$


$$\sum_{lm'l'm's} \langle Y_{lm}(\theta\varphi) sm_s | \hat{O} | jm \rangle \langle jm | \hat{O}^+ | Y_{l'm'}(\theta\varphi) sm_s \rangle$$

Общий принцип

Чистое начальное состояние $|jm\rangle\langle jm|$

Взаимодействие $\hat{O}|jm\rangle\langle jm|\hat{O}^+$

Суммирование по
интересующим
конечным состояниям

$$\sum_{\gamma} \langle \gamma | \hat{O} | jm \rangle \langle jm | \hat{O}^+ | \gamma \rangle$$

Какие частицы наблюдаются?

У каких частиц есть спин?

Есть ли совпадения?

Общий принцип

Чистое начальное состояние $|jm\rangle\langle jm|$

Взаимодействие $\hat{O}|jm\rangle\langle jm|\hat{O}^+$

Суммирование по интересующим конечным состояниям $\sum_{\gamma} \langle \gamma | \hat{O} | jm \rangle \langle jm | \hat{O}^+ | \gamma \rangle$

$$|\gamma\rangle \equiv \frac{1}{r} \sum_{lm} P_l(r) i^l e^{-i\sigma_l} Y_{lm}(\vec{r}/r) Y_{lm}^+(\vec{k}/k)$$

Предположим дипольный оператор с фиксированной поляризацией

$$D = r e_{\lambda}$$

Начальное состояние

$$|jm\rangle = R(r) Y_{jm}(\vec{r}/r)$$

Общий принцип

Чистое начальное состояние $|jm\rangle\langle jm|$

Взаимодействие $\hat{O}|jm\rangle\langle jm|\hat{O}^+$

Суммирование по интересующим конечным состояниям $\sum_{\gamma} \langle \gamma | \hat{O} | jm \rangle \langle jm | \hat{O}^+ | \gamma \rangle$

$$|\gamma\rangle \equiv \frac{1}{r} \sum_{lm} P_l(r) i^l e^{-i\sigma_l} Y_{lm}(\vec{r}/r) Y_{lm}^+(\vec{k}/k)$$

Предположим дипольный оператор с фиксированной поляризацией

$$D = r e_{\lambda}$$

Начальное состояние

$$|jm\rangle = R(r) Y_{jm}(\vec{r}/r)$$

Значения некоторых (приведенных) матричных элементов

определить $\langle Y_{l'm'} \| Y_{kq} \| Y_{lm} \rangle$

$$D_{0\mu}^l(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2l+1}} Y_{l-\mu}(\beta, \gamma)$$

$$\begin{aligned} \langle Y_{l'm'} | Y_{kq} | Y_{lm} \rangle &= \iint \sin \vartheta d\vartheta d\varphi Y_{l'm'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{kq}(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \\ &= \frac{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)(2k+1)}}{(4\pi)^{3/2}} \iint \sin \vartheta d\vartheta d\varphi D_{m'0}^{l'}(\varphi, \vartheta, \gamma) D_{q0}^{k*}(\varphi, \vartheta, \gamma) D_{m0}^{l*}(\varphi, \vartheta, \gamma) = \\ &= \frac{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)(2k+1)}}{(4\pi)^{3/2}} \iint \sin \vartheta d\vartheta d\varphi D_{m'0}^{l'}(\varphi, \vartheta, \gamma) \sum_L D_{M0}^{L*}(\varphi, \vartheta, \gamma) (lmkq | LM)(k0k0 | L0) \end{aligned}$$

$$\int d\gamma$$

$$2\pi \langle Y_{l'm'} | Y_{kq} | Y_{lm} \rangle = \frac{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)(2k+1)}}{(4\pi)^{3/2}} (lmkq | l'm')(l0k0 | l'0) \frac{8\pi^2}{2l'+1}$$

$$\frac{\sqrt{2l'+1}}{(lmkq | l'm')}$$

$$\langle Y_{l'm'} \| Y_{kq} \| Y_{lm} \rangle = \frac{\sqrt{(2l+1)(2k+1)}}{\sqrt{4\pi}} (l0k0 | l'0)$$

Еще раз о дипольных и квадрупольных операторах

Оператор взаимодействия эм поля с частицей

$$V \sim (\vec{A}\vec{p}) = (\vec{e} \exp[i\vec{k}\vec{r}] \vec{p})$$

$$V \sim (\vec{A}\vec{p}) = (\boxed{\vec{e}\vec{p}} + i\omega / c(\vec{e}\vec{p})(\vec{k}\vec{r}))$$

E1

$$-i \frac{\omega}{c} (\boxed{\{\vec{k} \otimes \vec{e}\}_2 \{\vec{r} \otimes \vec{p}\}_2}) - i \frac{\omega}{c} (\boxed{[\vec{k} \times \vec{e}][\vec{r} \times \vec{p}]})$$

E2

M1

Дипольное приближение

Фотоиспускание частицы без спина **из s состояния**

$$\sum_{mm'} Y_{1m}(\vartheta\varphi) Y_{1m'}^*(\vartheta\varphi) \frac{(001\lambda | 1m)(001\lambda' | 1m')}{3} \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle^*$$
$$\sum_{k\lambda\lambda'} \frac{3}{4\pi} (-1)^{\lambda'} (1010 | k0)(1\lambda 1 - \lambda' | k\lambda - \lambda') \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2k+1}} Y_{k\lambda-\lambda'}(\vartheta\varphi) \frac{1}{3} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2$$

Линейная поляризация (z||E) $\lambda=0$

$$\frac{1}{4\pi} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2 \left((1010 | 00)^2 \cdot 1 + (1010 | 20)^2 P_2(\cos \vartheta) \right) =$$
$$\frac{1}{4\pi} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2 \frac{1}{3} (1 + 2P_2(\cos \vartheta)) = \frac{1}{4\pi} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2 \cos^2 \vartheta$$

Правая поляризация (z||k) $\lambda=1$

$$\frac{1}{4\pi} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2 (-1) \left((1010 | 00)(111-1 | 00) + (1010 | 20)(111-1 | 20) P_2(\cos \vartheta) \right) =$$
$$\frac{1}{4\pi} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2 \frac{1}{3} (1 - P_2(\cos \vartheta)) = \frac{1}{4\pi} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2 \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta$$

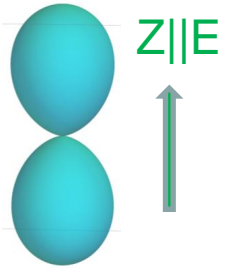
Дипольное приближение

Фотоиспускание частицы без спина **из s состояния**

$$\sum_{k\lambda\lambda'} \frac{3}{4\pi} (-1)^{\lambda'} (1010 | k0)(1\lambda 1 - \lambda' | k\lambda - \lambda') \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2k+1}} Y_{k\lambda-\lambda'}(\vartheta, \varphi) \frac{1}{3} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2$$

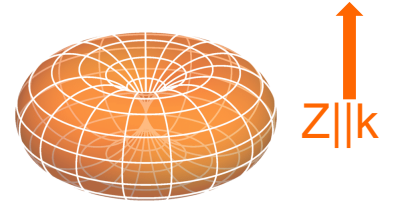
Линейная поляризация (z||E) $\lambda=0$

$$\frac{1}{4\pi} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2 \frac{1}{3} (1 + 2P_2(\cos \vartheta)) = \frac{1}{4\pi} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2 \cos^2 \vartheta$$



Правая поляризация (z||k) $\lambda=1$

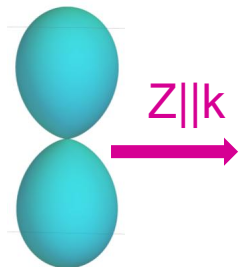
$$\frac{1}{4\pi} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2 \frac{1}{3} (1 - P_2(\cos \vartheta)) = \frac{1}{4\pi} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2 \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta$$



Линейная поляризация (z||k) $(-\lambda=-1 + |\lambda=1\rangle) / \text{Sqrt}[2]$

$$\frac{1}{4\pi} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2 \frac{1}{2} \left[2 \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta + \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} (Y_{22}(\vartheta, \varphi) + Y_{2-2}(\vartheta, \varphi)) \right] =$$

$$\frac{1}{4\pi} \left| \langle \varepsilon p \| D \| 1s \rangle \right|^2 \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi$$



Дипольное приближение

Фотоиспускание частицы без спина из чистого pm состояния

$$\sum_{l'l'mm'} Y_{1m}(\vartheta\varphi) Y_{1m'}^*(\vartheta\varphi) \frac{(1m_0 1\lambda | lm)(1m_0 1\lambda' | l'm')}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle^*$$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_{kl'} (-1)^l (l0l'0 | k0)(lml'-m | k0)(1m_0 1\lambda | lm)(1m_0 1\lambda' | l'm') \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2k+1}} Y_{k0}(\vartheta\varphi) \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle$$

Линейная поляризация ($z \| E$) $\lambda=0$, состояние $m_0=0$

	K=0	K=2	K=4
s+s			
d+d			
s+d			

Дипольное приближение

Фотоиспускание частицы без спина из чистого pm состояния

$$\sum_{l'mm'} Y_{1m}(\vartheta\varphi) Y_{1m'}^*(\vartheta\varphi) \frac{(1m_0 1\lambda | lm)(1m_0 1\lambda' | l'm)}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle^*$$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_{kl'} (-1)^l (l0l'0 | k0)(1m1-m | k0)(1m_0 1\lambda | lm)(1m_0 1\lambda | l'm) \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2k+1}} Y_{k0}(\vartheta\varphi) \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle$$

Линейная поляризация ($z \parallel E$) $\lambda=0$, состояние $m_0=0$

	K=0	K=2	K=4
s+s		---	---
d+d			
s+d	---		---

Дипольное приближение

Фотоиспускание частицы без спина из чистого pm состояния

$$\sum_{l'mm'} Y_{1m}(\vartheta\varphi) Y_{1m'}^*(\vartheta\varphi) \frac{(1m_0 1\lambda | lm)(1m_0 1\lambda' | l'm)}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle^*$$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_{kl'} (-1)^l (l0l'0 | k0)(1m1-m | k0) (1m_0 1\lambda | lm)(1m_0 1\lambda | l'm') \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2k+1}} Y_{k0}(\vartheta\varphi) \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle^*$$

Линейная поляризация ($z \parallel E$) $\lambda=0$, состояние $m_0=0$

	K=0	K=2	K=4
s+s	$\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{3}}$	---	---
d+d	$\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$	$\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$	$\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$
s+d	---	$\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$	---

$$W = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{3} d_s^2 + \frac{2}{15} d_d^2 + \left(\frac{4}{21} d_d^2 - \frac{2\sqrt{2}}{3} \text{Re}[d_d d_s^+] \right) P_2(\cos \vartheta) + \frac{12}{35} d_d^2 P_4(\cos \vartheta) \right)$$

Дипольное приближение

Фотоиспускание частицы без спина из чистого pm состояния

$$\sum_{l'mm'} Y_{1m}(\vartheta\varphi) Y_{1m'}^*(\vartheta\varphi) \frac{(1m_0 1\lambda | lm)(1m_0 1\lambda' | l'm)}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle^*$$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_{kl'} (-1)^l (l0l'0 | k0)(1m1-m | k0)(1m_0 1\lambda | lm)(1m_0 1\lambda' | l'm) \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2k+1}} Y_{k0}(\vartheta\varphi) \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle^*$$

Линейная поляризация ($z \| E$) $\lambda=0$, состояние $m_0=0$

	K=0	K=2	K=4
s+s	$\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{3}} 1 \cdot 1$	---	---
d+d	$\frac{1}{\sqrt{5}} \frac{1}{\sqrt{5}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{7}} \sqrt{\frac{2}{7}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$	$3\sqrt{\frac{2}{35}} 3\sqrt{\frac{2}{35}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$
s+d	---	$1 \cdot 1 \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$	---

$$W = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{3} d_s^2 + \frac{2}{15} d_d^2 + \left(\frac{4}{21} d_d^2 - \frac{2\sqrt{2}}{3} \text{Re}[d_d d_s^+] \right) P_2(\cos \vartheta) + \frac{12}{35} d_d^2 P_4(\cos \vartheta) \right)$$

Дипольное приближение

Фотоиспускание частицы без спина из чистого $1m$ состояния

$$\sum_{l'l'm'} Y_{1m}(\vartheta\varphi) Y_{1m'}^*(\vartheta\varphi) \frac{(1m_0 1\lambda | lm)(1m_0 1\lambda' | lm)}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle^*$$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_{kl'} (-1)^l (l0l'0 | k0)(1m1-m | k0) (1m_0 1\lambda | lm)(1m_0 1\lambda' | l'm') \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2k+1}} Y_{k0}(\vartheta\varphi) \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle^*$$

Линейная поляризация ($z \parallel E$) $\lambda=0$, состояние неполяризовано

	K=0	K=2	K=4
s+s	$\frac{1}{3}$	---	---
d+d	$\frac{2}{15}$	$\frac{4}{21}$	$\frac{12}{35}$
s+d	---	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	---

$$W = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{3} d_s^2 + \frac{2}{15} d_d^2 + \left(\frac{4}{21} d_d^2 - \frac{2\sqrt{2}}{3} \text{Re}[d_d d_s^+] \right) P_2(\cos \vartheta) + \frac{12}{35} d_d^2 P_4(\cos \vartheta) \right)$$




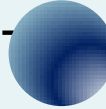

Дипольное приближение

Фотоиспускание частицы без спина из чистого $1m$ состояния

$$\sum_{l'mm'} Y_{1m}(\vartheta\varphi) Y_{1m'}^*(\vartheta\varphi) \frac{(1m_0 1\lambda | 1m)(1m_0 1\lambda' | 1m)}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle^*$$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_{kl} (-1)^l (l 0 l' 0 | k 0) (1m 1-m | k 0) (1m_0 1\lambda | 1m)(1m_0 1\lambda' | 1'm') \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2k+1}} Y_{k0}(\vartheta\varphi) \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle^*$$

Линейная поляризация ($z \parallel E$) $\lambda=0$, состояние неполяризовано

	K=0	K=2	K=4
s+s	$\frac{1}{3}$ 	--- 	 ---
d+d	$\frac{2}{15}$	$\frac{4}{21}$	$\frac{12}{35}$
s+d	--- 	$\frac{\sqrt{2}}{3}$ 	---

$$W = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{3} d_s^2 + \frac{2}{15} d_d^2 + \left(\frac{4}{21} d_d^2 - \frac{2\sqrt{2}}{3} \text{Re}[d_d d_s^+] \right) P_2(\cos \vartheta) + \frac{12}{35} d_d^2 P_4(\cos \vartheta) \right)$$






Дипольное приближение

Фотоиспускание частицы без спина из чистого $l m$ состояния

$$\sum_{l'm'm'} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}^*(\vartheta, \varphi) \frac{(1m_0 1\lambda | lm)(1m_0 1\lambda' | l'm)}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle^*$$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_{kl} (-1)^l (l 0 l' 0 | k 0) (1m 1-m | k 0) (1m_0 1\lambda | lm) (1m_0 1\lambda' | l'm) \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2k+1}} Y_{k0}(\vartheta, \varphi) \langle \varepsilon l \| D \| 1p \rangle \langle \varepsilon l' \| D \| 1p \rangle^*$$

Линейная поляризация ($\mathbf{z} \parallel \mathbf{E}$) $\lambda=0$, состояние неполяризовано

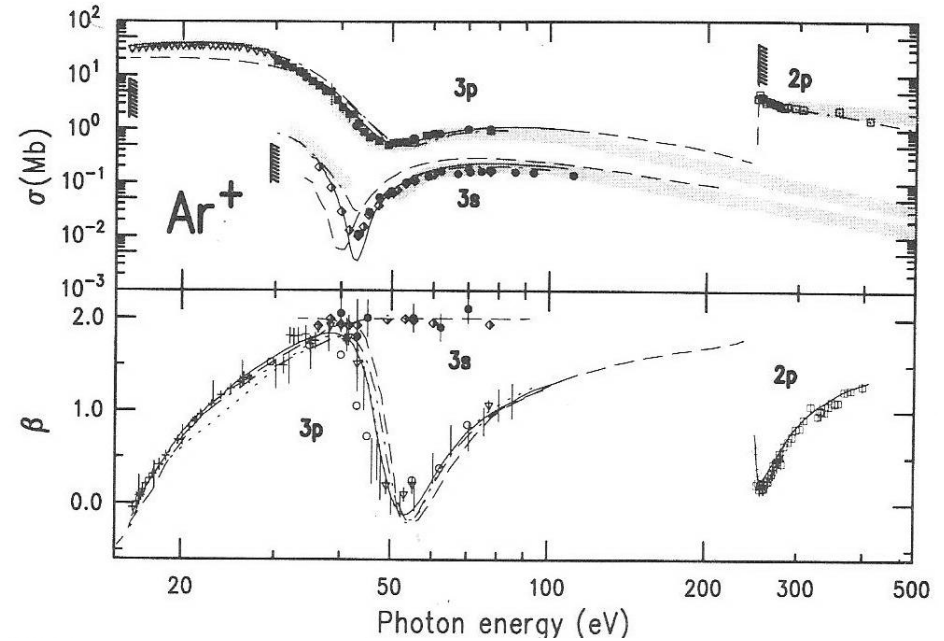
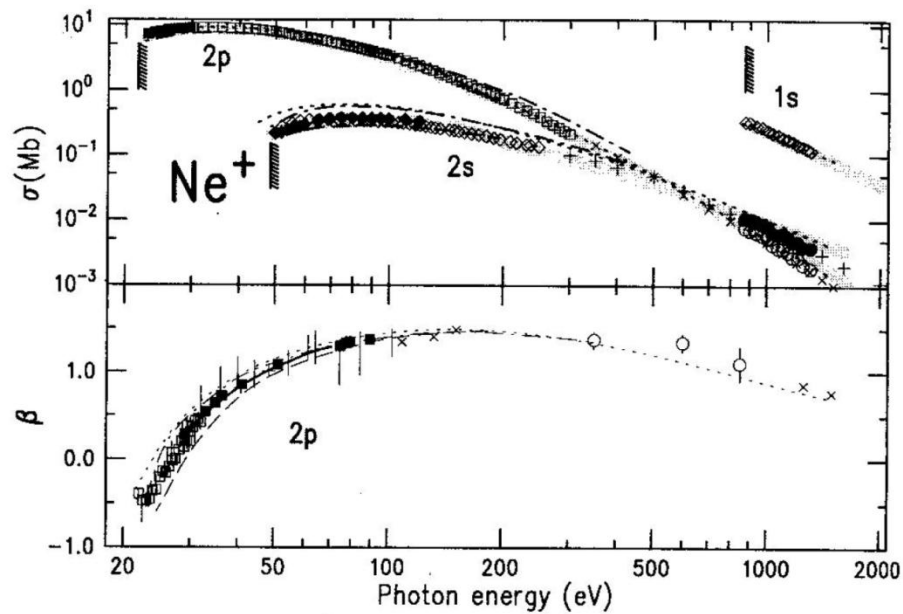
	K=0	K=2	K=4
s+s	$\frac{1}{3}$ 	--- 	 ---
d+d	$\frac{2}{15} + \frac{1}{\sqrt{5}} \frac{1}{\sqrt{5}} 2 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2$	$\frac{4}{21} + \sqrt{\frac{2}{7}} \frac{1}{\sqrt{14}} 2 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2$	$\frac{12}{35} - 3 \sqrt{\frac{2}{35}} 2 \sqrt{\frac{2}{35}} 2 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2$
s+d	--- 	$\frac{\sqrt{2}}{3}$ 	---

$$W = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{3} d_s^2 + \frac{2}{15} d_d^2 + \left(\frac{4}{21} d_d^2 - \frac{2\sqrt{2}}{3} \text{Re}[d_d d_s^+] \right) P_2(\cos \vartheta) + \frac{12}{35} d_d^2 P_4(\cos \vartheta) \right)$$

$$W = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{3} d_s^2 + \frac{1}{3} d_d^2 + \left(\frac{1}{3} d_d^2 - \frac{2\sqrt{2}}{3} \text{Re}[d_d d_s^+] \right) P_2(\cos \vartheta) \right)$$

Дипольное приближение

Параметры угловой анизотропии при ионизации 2p оболочки неона и 3p аргона



$$W = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{3} \left(d_s^2 + d_d^2 + (d_d^2 - 2\sqrt{2} \operatorname{Re}[d_d d_s^+]) P_2(\cos \vartheta) \right)$$

$$\beta = \frac{d_d^2 - 2\sqrt{2} \operatorname{Re}[d_d d_s^+]}{d_s^2 + d_d^2}$$

Photoexcitation of a Dipole-Forbidden Resonance in Helium

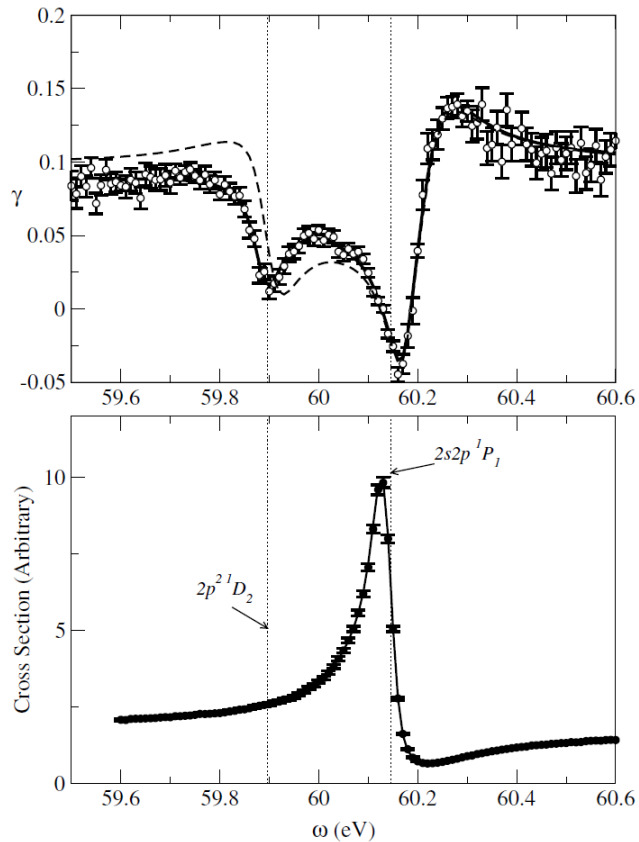


FIG. 1. Energy dependence of the cross section (bottom) and asymmetry parameter γ (top) in the region of the helium $(2s2p)\ ^1P_1$ and $(2p^2)\ ^1D_2$ autoionizing levels. The dashed curve shows the *a priori* prediction, using Eq. (4) and the theoretical parameters described in text and convoluted with the experimental resolution. The data and statistical errors are indicated in each figure as discrete points. Systematic effects are estimated to contribute ± 0.02 to the error in the absolute value of γ . The fits, described in text, are shown as solid lines.