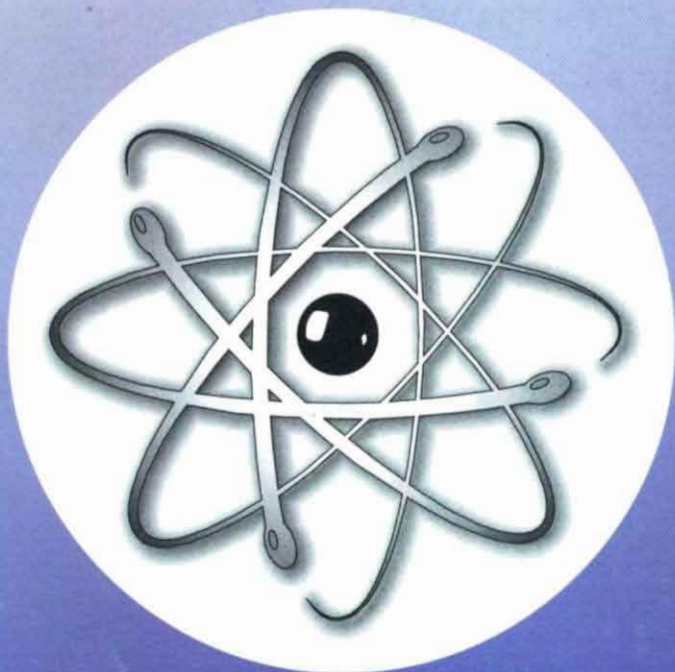


МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ)
ФАКУЛЬТЕТ ФИЗИЧЕСКОЙ И КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

В.А. АСТАПЕНКО

ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ
В ТЕОРИИ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФОТОНОВ
И
ЭЛЕКТРОНОВ С АТОМАМИ



МОСКВА
2002

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Московский физико-технический институт
(государственный университет)

В.А. Астапенко

**ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ
В ТЕОРИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
ФОТОНОВ И ЭЛЕКТРОНОВ
С АТОМАМИ**

*Рекомендовано Учебно-методическим советом
Московского физико-технического института
(государственного университета)
в качестве учебного пособия
для студентов высших учебных заведений
по направлению "Прикладная математика и физика"*

МОСКВА 2002

УДК 530.145

A91

Рецензенты:

Кафедра физики Московского института
радиотехники, электроники и автоматики (технического университета)
Доктор физико-математических наук, профессор *А.В. Елецкий*

Астапенко В.А.

A91 Приближенные методы в теории взаимодействия фотонов и электронов с атомами: Учеб. пособие. — М.: МФТИ, 2002. — 104 с.

ISBN 5-7417-0185-x

Цель книги — изложить малоизвестные в учебной литературе методы описания некоторых процессов взаимодействия фотонов и электронов с атомами. К этим явлениям относятся: рассеяние фотона на атоме, атомный фотоэффект, тормозное излучение на многоэлектронных атомах в ионах с учетом поляризационного канала. Подробно изложены квантовые и классические подходы к вычислению динамической поляризуемости атомных систем, величины, играющей роль в описании многих явлений атомной физики.

Рассмотренные методы отличаются математической простотой и физической наглядностью, обеспечивая в то же время разумную точность результатов. Широкое использование в пособии статистической модели атома позволяет придать описанию универсальность и выявить важные качественные закономерности.

Книга будет полезна лицам, специализирующимся в области физики взаимодействия излучения и вещества, квантовой электроники, лазерной физики и физики плазмы.

УДК 530. 145

ISBN 5-7417-0185-x

© Московский физико-технический институт
(государственный университет), 2002
© Астапенко В.А., 2002

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	6
Глава 1. ОСНОВНЫЕ РАДИАЦИОННЫЕ И СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ АТОМНОЙ ФИЗИКИ	
1.1. Общие положения	7
1.2. Рассеяние электронов на атомах и ионах	8
1.3. Взаимодействие фотонов с атомами	13
1.4. Тормозное излучение электрона на атоме	15
Глава 2. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ В РАМКАХ ПРИБЛИЖЕННЫХ МОДЕЛЕЙ	
2.1. Одноэлектронное приближение для слабосвязанных электронов	19
2.2. Приближение Слэтера	22
2.3. Квантово-механические методы расчета структуры многоэлектронных атомов.	24
2.4. Статистические методы описания структуры многоэлектронных атомов	28
Глава 3. СТАНДАРТНЫЕ ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ	
3.1. Борновское приближение	33
3.2. Квазиклассическое приближение	35
3.3. Формулы Крамерса для вероятностей радиационных	

процессов и связанных с ними величин	36
3.4. Метод эквивалентных фотонов Ферми	39
Глава 4. РАССЕЙЯНИЕ ФОТОНА НА ЭЛЕКТРОНЕ	
4.1. Комптоновское рассеяние на свободном электроне	42
4.2. Рассеяние электромагнитного излучения на связанных электронах. Высокочастотное приближение	44
4.3. Импульсное приближение в теории комптоновского рассея- ния рентгеновских лучей на атомах	49
Глава 5. КЛАССИЧЕСКИЕ И КВАНТОВЫЕ ПОДХОДЫ К РАСЧЕТУ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ АТОМНЫХ СИСТЕМ	
5.1. Определение дипольной поляризуемости	56
5.2. Общие выражения для дипольной поляризуемости	58
5.3. Водородоподобное приближение	64
5.4. Динамическая поляризуемость отрицательных ионов	65
5.5. Статическая поляризуемость атомов и ионов	66
5.6. Модель локальной плазменной частоты для поляризуемости многоэлектронных атомов и ионов	67
Глава 6. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ ОПИСАНИЯ ФО- ТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ	
6.1. Общие соотношения	72
6.2. Водородоподобное приближение	74
6.3. Модель локальной плазменной частоты	77
6.4. Приближенные квантовые методы расчета фотопоглощения	81

6.5. Гибридный метод Роста	83
Глава 7. ВРАЩАТЕЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ КРАМЕРСОВСКОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ	
7.1. Вращательное приближение в теории статического тормозного излучения и рекомбинации	85
7.2. Обобщение вращательного приближения на случай поляризационного канала	91
7.3. Поляризационный заряд в рамках статистической модели атома и вращательного приближения	92
7.4. Спектральные потери энергии квазиклассических электронов при рассеянии на атоме Томаса–Ферми.	94
Заключение	100
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	101

Введение

Учебное пособие посвящено ряду приближенных методов в теории радиационных и радиационно-столкновительных процессов. Эти методы основаны в большей мере на соображениях физической интуиции, нежели на последовательном математическом формализме. Тем не менее их использование часто оказывается весьма эффективным с точки зрения соответствия получаемых результатов экспериментальным данным и результатам сложных численных расчетов. Другой отличительной особенностью излагаемых подходов является широкое использование качественных аналогий, позволяющее переносить приемы и методы, развитые для расчета одних процессов, на исследование других, часто слабоизученных явлений.

В пособии широко используются статистические модели атома и квазиклассические методы описания радиационных процессов. В ряде случаев дается сравнение с результатами альтернативных подходов. Большое внимание уделено эффектам поляризованности электронного остова мишени, интенсивно исследующимся в последние годы.

Материал 5–7 глав в значительной мере основан на оригинальных работах автора и его коллег Л.А. Буревой и В.С. Лисицы, а также В.И. Когана и А.Б. Кукушкина.

Характерной чертой пособия является то, что изложенные сведения носят, с одной стороны, учебно-методический, а с другой – прикладной характер, сочетая интуитивные соображения и простые расчетные формулы. В этой связи можно надеяться, что предлагаемая книга будет полезной как для более глубокого усвоения физической сути рассматриваемых процессов, так и для практического использования приведенных формул в конкретных расчетах.

ОСНОВНЫЕ РАДИАЦИОННЫЕ И СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ АТОМНОЙ ФИЗИКИ

1.1. Общие положения

В атомной физике и ее многочисленных приложениях важную роль играют процессы взаимодействия электронов и фотонов с атомными системами. К этим процессам относятся: (а) упругое рассеяние электронов и фотонов на атомах, (б) столкновительное возбуждение и ионизация атомов электронным ударом, (в) фотовозбуждение, фотоионизация атомов и рекомбинация электронов на ионах, (г) неупругое рассеяние фотонов на атомах, включая эффект Комптона, (д) тормозное излучение (ТИ) заряженных частиц на атомах. Широкое использование лазеров делает актуальным рассмотрение (наряду со спонтанными) также и индуцированных процессов электрон-атомного взаимодействия. Так, например, неупругое рассеяние электронов на атомах может сопровождаться поглощением или излучением нескольких лазерных фотонов (*laser-assisted scattering*). Отметим, что в случае индуцированного электронного рассеяния, как и в тормозном излучении, процесс носит характер трехчастичного столкновения: электрона, фотона и атома. Существуют и другие трехчастичные радиационно-столкновительные явления, такие, как возбуждение атома при одновременном столкновении с электроном и фотоном. В этом случае энергия возбуждения атома черпается из двух источников: кинетической энергии электрона и энергии фотона. Трехчастичные явления, как правило, происходят с меньшей вероятностью, чем двухчастичные, тем не менее в ряде случаев их роль может быть весьма значительной.

Основной количественной характеристикой радиационно-столкновительного процесса является его сечение σ . Данная ве-

личина имеет размерность площади и определяется в соответствии с равенством

$$\sigma = \frac{w}{j}, \quad (1.1)$$

где w — вероятность процесса в единицу времени, j — плотность потока частиц, вызывающих рассматриваемый процесс. Например, в случае электронного рассеяния под j , естественно, понимается плотность потока электронов. В случае трехчастичного рассеяния имеют место две плотности потока: электронов и фотонов. Тогда сечение процесса определяется по отношению к одному из потоков в зависимости от постановки задачи. Например, если рассчитывается поглощение фотонов при столкновении электронов с атомом в лазерном поле, то в определении (1.1) фигурирует плотность потока фотонов.

Когда на эксперименте фиксируется одна из характеристик процесса рассеяния, формула (1.1) определяет соответствующее дифференциальное сечение. Так, ионизация атомов с фиксированной энергией выбитого электрона описывается дифференциальным сечением по отношению к энергии ионизированного электрона. В случае рассеяния фотонов рассматривается дифференциальное сечение по углу рассеяния фотона. При исследовании тормозного излучения возникает дважды дифференциальное сечение: по углу рассеяния электрона и по углу вылета фотона.

1.2. Рассеяние электронов на атомах и ионах

Схема рассеяния электрона на угол ϑ на притягивающем потенциале в рамках классической картины процесса изображена на рис. 1.1. Налетающая частица движется по траектории с прицельным параметром ρ и начальной скоростью v . В классической механике каждому значению прицельного параметра (за исключением специальных случаев) соответствует свой угол рассеяния $\vartheta = \vartheta(\rho)$. Дифференциальное по углу рассеяния сечение процесса может быть представлено в виде

$$\frac{d\sigma}{d\vartheta} = 2\pi \rho(\vartheta) \frac{d\rho}{d\vartheta}, \quad (1.2)$$

где введена функция $\rho(\vartheta)$, обратная к $\vartheta(\rho)$. При записи (1.2) была учтена аксиальная симметрия задачи, т.е. независимость величины ϑ от азимутального угла φ .

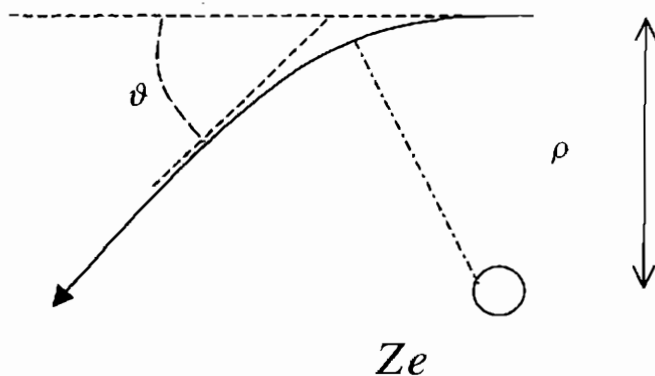


Рис. 1.1

Схема рассеяния электрона на угол ϑ на притягивающем потенциале в рамках классической картины процесса, ρ — прицельный параметр

Если энергия НЧ не изменяется после рассеяния, то имеет место упругое рассеяние, в противном случае — неупругое.

В квантовой механике отсутствует понятие траектории частицы, так что нет и прицельного параметра, роль которого играет изменение импульса НЧ. Сечение процесса в этом случае определяется через амплитуду рассеяния $f(\vartheta)$, которая связана с волновой функцией НЧ по формуле

$$\psi \approx e^{ikz} + \frac{f(\vartheta)}{r} e^{ikr}, \quad (1.3)$$

где $k = mv/\hbar$ — модуль волнового вектора НЧ, z — направление движения НЧ до рассеяния, r — расстояние до силового центра. С помощью амплитуды рассеяния дифференциальное сечение процесса представляется в виде

$$\frac{d\sigma}{d\vartheta} = 2\pi \sin \vartheta |f(\vartheta)|^2. \quad (1.4)$$

В простейшем случае рассеяния электрона во внешнем кулоновском поле заряда Ze сечение процесса дается равенством (формула Резерфорда):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{2m v^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}, \quad (1.5)$$

где e , m , v — заряд, масса и скорость электрона, $d\Omega$ — элемент телесного угла рассеяния. Замечательно, что выражение (1.5) получается как в рамках классической (с помощью формулы (1.2)), так и квантовой механики (по формуле (1.4)), что связано со специальными свойствами симметрии кулоновского поля. Полное сечение рассеяния электрона в кулоновском поле $\sigma_{el}(E)$, получающееся при интегрировании правой части (1.5) по телесному углу, расходится на малых углах рассеяния ϑ . Физически последнее обстоятельство связано с дальнедействующим характером кулоновского поля, когда (в классической картине) даже очень большие прицельные параметры приводят к заметному искривлению траектории налетающей частицы.

В предположении бесконечно большой массы рассеивающего заряда, когда отдачей при столкновении можно пренебречь, сечение (1.5) описывает упругое рассеяние электрона, в процессе которого энергия налетающей частицы не изменяется. Это имеет место при рассеянии электронов на голых ядрах или ионах. Если же рассеиватель легкий, например, атомный электрон, то при достаточно больших углах ϑ энергией отдачи уже пренебречь нельзя, и рассеяние приобретает неупругий характер. В частности, если энергия отдачи превышает энергию связи электрона в атоме, рассеяние происходит с ионизацией мишени. Таким образом, резерфордское сечение (1.5) является исходным выражением для вывода сечения ударной ионизации атома в рамках классического рассмотрения (формула Томсона).

Как видно из формулы (1.5), сечение упругого рассеяния в кулоновском поле обратно пропорционально квадрату кинетической энергии падающего электрона.

В случае упругого рассеяния электронов на атоме описание процесса существенно усложняется наличием связанных электронов и соответственно некулоновским характером поля мишени. В частности, при малых энергиях электрона E , рассеивающегося на ряде атомов инертных газов (Ar, Kr, Xe), монотонный характер энергетической зависимости сечения упругого рассеяния $\sigma_{el}(E)$ нарушается. В зависимости $\sigma_{el}(E)$ появляется минимум, так называемый провал Рамзауэра, обнаруженный экспериментально в начале 20-х годов прошлого века при исследовании свободных пробегов электронов с энергиями 0.75—1.1 эВ в различных газах. Данное явление связано с волновыми свойствами электрона и аналогично просветлению интерферометра Фабри–Перо для внешнего электромагнитного излучения на определенных длинах волн. Расчет сечения рассеяния в случае электрон-атомных столкновений должен, вообще говоря, проводиться в рамках квантовой механики с помощью выражений (1.3) — (1.4). Задача существенно упрощается для быстрых падающих электронов, когда возможно использование борновского приближения (см. главу 3). В общем случае для расчета сечения нужно использовать фазовую теорию рассеяния, на которой мы здесь останавливаться не будем, поскольку она подробно изложена во многих хорошо известных учебниках по квантовой механике и теории столкновений. Приведем здесь лишь общую формулу для полного сечения упругого рассеяния:

$$\sigma_{el} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k), \quad (1.6)$$

где $\delta_l(k)$ — парциальные фазы рассеяния сферических составляющих волновой функции НЧ с квантовым числом орбитального момента l . Таким образом, в общем случае задача сводится к нахождению парциальных фазовых сдвигов как функций энергии НЧ. Данная задача не имеет решения в общем виде, хотя для предельных случаев быстрых и медленных электронов возможно

получить аппроксимационные выражения для $\delta_l(k)$. Так, если выполняется неравенство $k \ll a^{-1}$, где a — характерный размер атома, основной вклад в сечение дает сферическая компонента волновой функции с нулевым орбитальным моментом. Выражение для соответствующей фазы имеет вид

$$\delta_0 = -Lk - \frac{\pi \alpha k^2}{3a_0}, \quad (1.7)$$

где L — длина рассеяния, являющаяся индивидуальной характеристикой атома, α — статическая поляризуемость атома, a_0 — борковский радиус. В пределе малых k сдвиги фаз парциальных волн с $l > 0$ пренебрежимо малы по сравнению с нулевой фазой δ_0 . Этот факт имеет простое объяснение. Отличные от нуля значения орбитального момента для медленных электронов соответствуют большим эффективным расстояниям до ядра, где поле нейтрального атома экспоненциально мало, так что рассеянием парциальной волны можно пренебречь. Подставляя (1.7) в (1.6) и пренебрегая слагаемым с поляризуемостью, находим $\sigma_{el} = 4\pi L^2$, т.е. длина рассеяния электрона на атоме в случае медленных столкновений играет роль эффективного атомного радиуса, определяющего сечение рассеяния. Коэффициент 4 в последней формуле связан с квантовой интерференцией между рассеянными и не рассеянными частицами. Длина рассеяния L в зависимости от вида атома может принимать как положительные, так и отрицательные значения, причем отрицательные значения L соответствуют атомам, для которых имеет место эффект Рамзауэра.

В ряде приложений теории рассеяния, например в теории кинетических явлений, важную роль играет так называемое транспортное сечение, связанное с упругим сечением по формуле

$$\sigma_{tr} = \int_0^\pi (1 - \cos \vartheta) d\sigma_{el}(\vartheta). \quad (1.8)$$

Данная величина определяет вероятность передачи импульса от НЧ мишени в процессе упругого рассеяния и поэтому входит в выражения для ряда кинетических коэффициентов (диффузии, вязкости и т.д.) Приведем здесь общее выражение для транспортного сечения через сдвиги фаз парциальных волн, аналогичное (1.6):

$$\sigma_{tr} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2(\delta_l - \delta_{l+1}). \quad (1.9)$$

Из сравнения формул (1.9) и (1.6) следует, что транспортное сечение совпадает с сечением упругого рассеяния для медленных столкновений, когда основной вклад в процесс дает парциальная волна с нулевым моментом. Для транспортного сечения рассеяния электронов на атомах тяжелых инертных газов также имеет место провал в зависимости от энергии налетающего электрона, соответствующий эффекту Рамзауэра.

1.3. Взаимодействие фотонов с атомами

Взаимодействие электромагнитного излучения с атомами может приводить как к поглощению, так и рассеянию фотонов атомными электронами.

Поглощение фотонов вызывает возбуждение связанных электронов на дискретные энергетические уровни либо приводит к ионизации атома (атомный фотоэффект), если энергия фотона превышает потенциал ионизации атома. Атомный фотоэффект подробно рассматривается в главе 6. Явление, обратное фотоионизации, называется фоторекомбинацией. Оно представляет собой переход электрона из непрерывного спектра исходного иона в дискретный, сопровождающийся спонтанным испусканием фотона и образованием нейтрального атома (или иона меньшей зарядности). Фоторекомбинация электронов на ионах рассматривается в главе 7 в рамках так называемой крамерсовской электродинамики.

Рассеяние фотонов на атомах может быть также нескольких видов: релеевское (без изменения частоты), комбинационное (с изменением частоты и возбуждением/девозбуждением атома в дискретном спектре) и комптоновское (с ионизацией атома). По-

следний тип рассеяния характерен для фотонов рентгеновского диапазона длин волн, когда энергия отдачи превышает потенциал ионизации атома.

Для сечения поглощения фотона при переходе между дискретными состояниями в атоме справедливо следующее выражение:

$$\sigma(\omega) = \frac{4\pi^2 \omega}{3\hbar c} |\mathbf{d}_{01}|^2 g(\omega, \omega_0), \quad (1.10)$$

где \mathbf{d}_0 — матричный элемент дипольного момента, ω_0 — собственная частота перехода, ω — частота поглощаемого фотона. Функция $g(\omega, \omega_0)$ описывает форму линии электронного перехода в атоме. В случае однородного уширения спектральной линии ее форма описывается лоренцевским контуром:

$$g(\omega) = \frac{\Delta\omega/2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Delta\omega/2)^2}, \quad (1.11)$$

где $\Delta\omega$ — полуширина. В пределе бесконечно узкой спектральной линии ($\Delta\omega \rightarrow 0$) функция (1.11) стремится к дельта-функции Дирака.

Формулу (1.10) можно обобщить на случай фотоэффекта, когда конечное состояние возбуждаемого электрона относится к непрерывному спектру. Подробно эти вопросы рассматриваются в главе 6.

Описание взаимодействия фотонов с заряженными частицами упрощается за счет наличия малого параметра теории, константы тонкой структуры $e^2/\hbar c \cong 1/137$, что позволяет использовать теорию возмущений в качестве основного метода вычислений. Заметим, что при описании электрон-атомного взаимодействия аналогичный параметр $Ze^2/\hbar v$ меньше единицы только для достаточно быстрых НЧ, когда справедливо борновское приближение. Сечение поглощения фотона атомом получается в первом порядке теории возмущений по электрон-фотонному взаимодействию, поэтому соответствующее выражение (1.10) первого порядка малости по постоянной тонкой структуры.

Рассеяние фотона атомом можно представить как виртуальное поглощение фотона связанными электронами с последующим его испусканием. Поэтому соответствующее сечение является величиной второго порядка малости по параметру $e^2/\hbar c$. В общем случае данное сечение выражается через тензор рассеяния электромагнитного поля, а в случае упругого (релеевского) рассеяния через динамическую поляризуемость атома (см. подробнее в главе 4).

Комптоновское рассеяние электромагнитного поля происходит с уменьшением частоты рассеянного фотона (эффект Комптона), поскольку, как уже отмечалось выше, часть энергии излучения передается в этом случае ионизированному электрону. В отличие от релеевского и комбинационного рассеяния при комптоновском рассеянии связь атомного электрона с ядром проявляется в меньшей степени. Приближенным методам учета этой связи посвящена глава 4.

1.4. Тормозное излучение электрона на атоме

Тормозное излучение (ТИ) в традиционной постановке задачи, восходящей к Зоммерфельду, Бете и Гайтлеру, представляет собой процесс излучения фотона заряженной частицей в результате ее рассеяния в поле силового центра (ядра, атома, иона). При этом начальное и конечное состояния налетающей частицы принадлежат к непрерывному спектру энергии, т.е. на языке классической механики движение НЧ инфинитно. В терминологии квантовой теории ТИ принадлежит к классу свободно-свободных переходов и этим отличается от фоторекомбинации электрона на ионе, когда конечное состояние электрона является связанным. Тормозное излучение может быть как спонтанным, происходящим в отсутствие внешнего поля, так и вынужденным, т.е. индуцированным внешним электромагнитным полем. В последнем случае имеет место также и обратный тормозной эффект, т.е. ускорение рассеивающейся на силовом центре частицы за счет поглощения кванта внешнего поля. Отметим, что этот процесс является основным механизмом поглощения излучения в плазме.

В простейшем случае спонтанного ТИ нерелятивистского электрона в кулоновском поле заряда Ze для спектрального сечения процесса имеет место следующая формула, впервые полученная Зоммерфельдом:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{\sigma_0}{\omega} \frac{\pi^2 x_0}{(e^{2m\eta_0} - 1)(1 - e^{-2m\eta})} \frac{d}{dx} |F(i\eta_0, i\eta, 1, x)|^2_{x=x_0}, \quad (1.12)$$

где $\sigma_0 = \frac{16}{3} \frac{Z^2 e^6}{\hbar c^3 (m v_0)^2}$, $x_0 = -\frac{4\eta_0 \eta}{(\eta - \eta_0)^2}$, $\eta = \frac{Ze^2}{\hbar v}$, $\eta_0 = \frac{Ze^2}{\hbar v_0}$,

$F(a, b, c, x)$ — невырожденная гипергеометрическая функция, разложение для которой в области $x < 1$ имеет вид

$$F(a, b, c, x) = 1 + \frac{ab}{c} x + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)} \frac{x^2}{2!} + \dots$$

Выражение (1.12) выведено в дипольном приближении по излучаемому фотону с учетом точного вида волновых функций электрона в непрерывном спектре кулоновского центра. Для быстрых, но нерелятивистских электронов, когда выполняется борновское условие $\eta = Ze^2/\hbar v \ll 1$, формула (1.12) может быть существенно упрощена за счет разложения входящей в нее гипергеометрической функции по борновскому параметру η . Заметим, что сечение дипольного ТИ при столкновении частиц с одинаковым отношением заряда к массе равно нулю, так что дипольное ТИ при столкновении электронов отсутствует.

Важной характеристической чертой сечения (1.12) является его обратная пропорциональность квадрату массы НЧ. Поэтому тормозное излучение тяжелых заряженных частиц в кулоновском поле пренебрежимо мало по сравнению с ТИ электрона.

Угловая направленность ТИ нерелятивистской частицы имеет дипольный характер, т.е. пропорциональна множителю $1 + \cos^2 \vartheta$, где ϑ — угол между вектором начальной скорости НЧ и направлением излучения фотона.

При обобщении формулы (1.12) на случай ТИ электрона (в том числе релятивистского) на атоме первоначально было ис-

пользовано так называемое приближение экранировки. В рамках данной модели роль атомных электронов сводилась к экранировке заряда атомного ядра, их динамическими свойствами полностью пренебрегалось. ТИ, возникающее в соответствии с такой физической картиной, было позже названо статическим ТИ (СТИ). СТИ релятивистского электрона характеризуется острым угловым распределением излучаемых фотонов в узком конусе вокруг направления вектора его скорости. Это обстоятельство связано с тем, что при приближении величины скорости электрона к скорости света длина формирования СТИ возрастает с уменьшением угла испускания фотона, увеличивая тем самым интенсивность излучения в направлении движения электрона.

Приближение экранировки долгое время широко использовалось в расчетах сечения ТИ. В ряде случаев оно вполне адекватно физике столкновительно-излучательного явления. Позднее, однако, было осознано, что это приближение имеет свои ограничения. Формально его недостаточность видна уже из отсутствия правильного предельного перехода сечения ТИ к случаю отсутствия ядра. Как было показано рядом исследователей, приближение экранировки в некоторых ситуациях не только не дает правильного количественного результата, но и искажает физическую картину процесса.

Существует и более общий подход к описанию ТИ на атоме, восходящий к идеологии М. Борна, который рассматривал излучение системы сталкивающихся частиц как обусловленное их полным дипольным моментом. Если встать на эту точку зрения, то излучения фотона при столкновении заряженной частицы с атомом возникает не только в результате ее ускорения в поле мишени, но и за счет наведения ее электромагнитным полем излучающего дипольного момента в электронном остове атома.

Таким образом, ТИ на мишенях, обладающих связанными электронами, идет по двум каналам: статическому и поляризационному. Поляризационный канал обусловлен переменной поляризацией электронного остова, возникающей в ходе столкновения. Соответствующее тормозное излучение было названо поляризационным ТИ (ПТИ) и может быть интерпретировано как рас-

сеяние собственного поля заряженной части (виртуального фотона) в реальный фотон на атомных электронах. Такая интерпретация позволяет развивать удобные количественные способы описания ПТИ, аналогичные методу эквивалентных фотонов Ферми в теории столкновительного возбуждения и ионизации атомов.

ПТИ обладает рядом замечательных характеристических черт, отличающих его от СТИ. К этим свойствам в первую очередь относится независимость сечения ПТИ от массы налетающей частицы. Таким образом, сечение поляризационного канала ТИ тяжелой заряженной частицы на атоме имеет величину, сравнимую с величиной сечения СТИ электрона на ядре. Количественное описание поляризационного канала базируется на знании обобщенной динамической поляризуемости атома $\alpha(\omega, q)$ (ω — частота ТИ, $\hbar q$ — импульс отдачи). Последовательный расчет величины $\alpha(\omega, q)$ требует сложных квантово-механических вычислений. В главе 5 рассматриваются упрощенные модели расчета поляризуемости атомных систем, позволяющие развить приближенные методы вычисления сечения ПТИ, излагаемые в главе 7.

МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ В РАМКАХ ПРИБЛИЖЕННЫХ МОДЕЛЕЙ

2.1. Одноэлектронное приближение для слабосвязанных электронов

Возможность использования одноэлектронного приближения при описании взаимодействия атомов с внешними полями и частицами обуславливается спецификой конкретной рассматриваемой задачи. В случае невозбужденных атомов такая ситуация характерна в первую очередь для щелочно-подобных атомных систем, когда имеется один относительно слабосвязанный (валентный) электрон и компактный атомный остаток. Одноэлектронное приближение справедливо также для возбужденных электронных состояний с большими радиусами орбиты. Кроме того, одноэлектронное приближение используется для внешнего электрона отрицательных ионов, взаимодействие которого с нейтральным остатком весьма слабое. В перечисленных случаях валентный электрон (в первом приближении) можно рассматривать изолированно от других атомных электронов, взаимодействие с которыми может быть учтено по теории возмущений. Поскольку значительная часть пространственной плотности валентного электрона находится вне атомного остатка, для его описания адекватно использование так называемого кулоновского приближения. В соответствии с этим приближением волновая функция валентного электрона конструируется из собственных функций гамильтониана с кулоновской потенциальной энергией. При этом так же, как и в одноэлектронном атоме, электронное состояние описывается двумя квантовыми числами (ν, λ) , аналогичными главному и орбитальному квантовому числу (n, l) водородоподобного атома. В отличие от целых квантовых чисел (n, l) их аналоги (ν, λ) принимают (в зависимости от модели), вообще говоря, нецелые значения. Так, в *методе квантового дефекта*

нецелым является главное квантовое число $\nu_{nl} = n - \Delta_l$ при целом орбитальном $\lambda = l$ (здесь Δ_l — квантовый дефект, зависящий от орбитального квантового числа). Радиальная волновая функция дискретного спектра в методе квантового дефекта имеет вид

$$R_{nl}(r) = \sqrt{C_{nl}} (Z/r) W_{\nu_{nl}, l+1/2}(2Zr/\nu_{nl}), \quad (2.1)$$

где C_{nl} — нормировочный коэффициент, $W_{\nu, \lambda}$ — функция Уиттекера, Z — заряд атомного остатка. В водородоподобном случае, когда $\nu = n_r + l + 1$ (n_r — целое радиальное квантовое число), функция Уиттекера выражается через вырожденную гипергеометрическую функцию ${}_1F_1(-n_r, 2l + 2, x)$, приводя тем самым к обычным водородоподобным функциям связанных состояний. Энергия состояния с собственной функцией (2.1) дается формулой (в атомных единицах):

$$E_{nl} = -\frac{Z^2}{2[n - \Delta_l]^2}. \quad (2.2)$$

Данное выражение оправдывает название «квантовый дефект» для величины Δ_l . Легко понять, что квантовый дефект всегда положителен. Действительно, проникновение волновой функции валентного электрона в атомный остаток усиливает его связь с ядром, увеличивая тем самым (по абсолютной величине) энергию состояния, поэтому в соответствии с (2.2) $\Delta_l > 0$. Кроме того, величина Δ_l уменьшается с ростом орбитального момента, поскольку при этом уменьшается проникновение валентного электрона в остов атома. Волновая функция непрерывного спектра в методе квантового дефекта имеет вид

$$R_l(k, r) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \frac{1}{r} \{F_l(k, r) \cos \delta_l(E) + G_l(k, r) \sin \delta_l(E)\}, \quad (2.3)$$

где $k = \sqrt{2E}$ — волновой вектор (в атомных единицах); $F_l(k, r)$, $G_l(k, r)$ — регулярная и нерегулярная (в начале координат)

нат) кулоновские функции, $\delta_l(E) = \pi \Delta_l(E)$ — фаза рассеяния электрона на некулоновской части потенциала атомного остатка, связанная с квантовым дефектом, экстраполированным на положительные значения энергии. Как следует из (2.3), для нулевого квантового дефекта (т.е. в чисто кулоновском потенциале) волновая функция непрерывного спектра выражается через регулярную в нуле кулоновскую волновую функцию, давая тем самым водородоподобную волновую функцию.

Отметим, что метод квантового дефекта нашел широкое применение в задачах атомной физики, астрофизики и теории твердого тела.

В отличие от метода квантового дефекта в *методе модельного потенциала*, напротив, главное квантовое число $\nu = n$ — целое, а аналог орбитального квантового числа λ_l — нецелое число, связанное с целым орбитальным квантовым числом по формуле

$$(\lambda_l + 1/2)^2 = (l + 1/2)^2 + 2B_l. \quad (2.4)$$

Здесь B_l — параметры модельного потенциала Фьюса, который имеет вид

$$V_F(\mathbf{r}) = -\frac{Z}{r} + \sum_l B_l \frac{\hat{P}_l}{r^2}, \quad (2.5)$$

где \hat{P}_l — оператор проектирования на подпространство сферических функций с заданным значением орбитального квантового числа. Параметры B_l определяются из условия равенства экспериментального значения энергии нижнего уровня с заданным l и соответствующего собственного значения гамильтониана. Для квантового числа λ_l это равенство дает:

$$\lambda_l = \frac{Z}{\sqrt{-2E_{\text{exp}}^{0l}}} - 1, \quad (2.6)$$

где E_{exp}^{0l} — минимальное экспериментальное значение энергии валентного электрона с заданным l . Существенно, что определенное таким образом значение λ_l хорошо воспроизводит экспериментальные значения всех вышележащих уровней с заданным l . Из равенств (2.2) и (2.6) следует, что между квантовым дефектом Δ_l и орбитальным параметром λ_l существует связь:

$$\lambda_l = n - \Delta_l - p - 1, \quad (2.7)$$

где p — целочисленный положительный параметр, равный нулю для нижнего энергетического уровня с заданным l .

Волновые функции метода модельного потенциала даются своими водородоподобными аналогами, в которых произведена замена $l \rightarrow \lambda_l$. Таким образом, метод модельного потенциала оказывается более простым с вычислительной точки зрения по сравнению с методом квантового дефекта (так как в нем отсутствуют сингулярные функции), обеспечивая при этом точность, лишь немногим уступающую точности последнего.

2.2. Приближение Слэтера

Для определения эффективного поля атомного остатка, простых оценок и в ряде приложений, в которых существенно поведение волновых функций атомных электронов на больших расстояниях, используются безузловые функции Слэтера вида:

$$P_\gamma(r) = \sqrt{\frac{(2\beta)^{2\mu+1}}{\Gamma(2\mu+1)}} r^\mu e^{-\beta r}, \quad (2.8)$$

где $\gamma = (nl)$ — набор квантовых чисел, характеризующих электронное состояние, β, μ — слэтеровские параметры. Волновые функции (2.8) нормированы, имеют правильную асимптотику на больших расстояниях. Основное достоинство функций (2.8) заключается в их простоте.

Для определения параметров β, μ Слэтером были предложены эмпирические правила, которые для оболочек, заполненных более чем наполовину, имеют вид

$$\beta_{\gamma} = \frac{Z - S_{\gamma}}{\mu_{\gamma}}, \quad (2.9)$$

где Z — заряд ядра атома, S_{γ} — экранировочная постоянная, значения которой вместе с параметром μ_{γ} и числом электронов N_{γ} для различных электронных оболочек приведены в таблице 2.1.

Т а б л и ц а 2.1

Оболочка $\gamma = (nl)$	S_{γ}	μ_{γ}	N_{γ}
$1s^2$	0.30	1	2
$2(sp)^8$	4.15	2	8
$3(sp)^8$	11.25	3	8
$3d^{10}$	21.15	3	10
$4(sp)^8$	27.75	3.5	8
$4d^{10}$	39.15	3.5	10
$5(sp)^8$ без 4f	45.75	4	8
$4(df)^{24}$	44.05	3.5	24
$5(sp)^8$ с 4f	57.65	4	8
$5d^{10}$ с 4f	71.15	4	10

Для оболочек, заполненных наполовину или менее, лучшие результаты дает другое правило:

$$\mu = \text{ближайшее полуцелое } Z/\sqrt{2|E|}, \beta = \mu 2|E|/Z, \quad (2.10)$$

где E — энергия электронного состояния в атомных единицах.

С помощью функций (2.8) может быть получено радиальное распределение электронной плотности атома в слэтеровском приближении в виде

$$\rho(r) = \sum_{\gamma} N_{\gamma} P_{\gamma}^2(r). \quad (2.11)$$

Соответствующий этой электронной плотности атомный (слэтеровский) потенциал равен

$$U_s(r) = -\frac{\zeta_s(r)}{r}, \quad (2.12)$$

где $\zeta_s(r)$ — эффективный заряд остова:

$$\zeta_s(r) = Z - \int_0^r \rho(r') dr' - r \int_r^\infty \frac{\rho(r')}{r'} dr'. \quad (2.13)$$

Можно убедиться, что потенциал (2.12) — (2.13) удовлетворяет электростатическому уравнению Пуассона с граничными условиями:

$$\zeta_s(0) = Z, \quad \zeta_s(\infty) = Z_i, \quad (2.14)$$

где Z_i — заряд иона, равный, естественно, нулю для нейтрального атома. Подставляя в (2.13) формулы (2.8), (2.11) и производя интегрирование, находим

$$\zeta_s(r) = Z - \sum_{\gamma} N_{\gamma} \left[1 - e^{-2\beta r} \sum_{k=0}^{2\mu-1} \frac{2\mu-k}{2\mu} \frac{(2\beta r)^k}{k!} \right]_{\gamma}. \quad (2.15)$$

Итак, выражения (2.12), (2.15) дают атомный потенциал в приближении Слэтера.

2.3. Квантово-механические методы расчета структуры многоэлектронных атомов

Последовательные квантово-механические методы расчета структуры многоэлектронных атомов базируются на решении уравнения Шредингера с многочастичным гамильтонианом, учитывающим электрон-ядерное и электрон-электронное взаимодействие, которое содержит прямую и обменную составляющие. Многоэлектронная волновая функция атома Ψ зависит как от пространственных координат \mathbf{r}_i , так и от спиновых переменных атомных электронов s_i . Общий вид функции Ψ для атомов с двумя и более электронами неизвестен. Это отражает принципиальную невозможность решения задачи многих тел. Поэтому ис-

пользуются различные приближенные способы, заключающиеся в том или ином выборе общего вида атомной волновой функции, которая затем подставляется в уравнение Шредингера.

В пренебрежении обменными эффектам простейший вид многочастичной функции $\Psi(\mathbf{r}_i, s_i)$ представляет собой мультипликативную форму одночастичных координатных волновых функций ψ_{γ_i} , зависящих от «своих» пространственных переменных. Данный подход был предложен Хартри на начальном этапе квантовой теории многоэлектронных атомов (приближение Хартри). Это приближение было распространено В.А. Фоком на учет обменного межэлектронного взаимодействия. Соответствующий подход — метод Хартри–Фока — нашел широкое применение в расчетах структуры электронных оболочек атомов. В этом методе многочастичная волновая функция записывается в виде слэтеровского детерминанта:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det_N \{ \psi_i(x_k) \}, \quad (2.16)$$

где \det_N — обозначает детерминант N -го порядка (N — число атомных электронов) с номером строки i и номером столбца k , x_k — совокупность пространственных и спиновых координат k -го электрона. Представление (2.16) автоматически учитывает свойства антисимметрии полной волновой функции атома по отношению к перестановке электронных координат (включая их спины). Физически приближенное выражение для многочастичной волновой функции (2.16) связано с представлением о самосогласованном поле, согласно которому каждый выделенный атомный электрон движется в сферически-симметричном электрическом поле, созданным ядром и остальными атомными электронами.

В случае основного невырожденного состояния атома его волновая функция дается одним слэтеровским детерминантом типа (2.16) с заданной электронной конфигурацией, т.е. с указанным распределением электронов по оболочкам. В общем случае приходится рассматривать линейную суперпозицию функций (2.16).

Для основного состояния с помощью подстановки детерминанта (2.16) в многочастичное уравнение Шредингера можно получить следующую интегро-дифференциальную систему уравнений Хартри–Фока:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \varphi_i(\mathbf{r}_i) - \frac{Ze^2}{r_i} \varphi_i(\mathbf{r}_i) + \frac{e^2}{2} \sum_{j \neq i} \frac{|\varphi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \varphi_i(\mathbf{r}_i) - \\
 & - \frac{e^2}{2} \sum_{j \neq i} \frac{\varphi_j^*(\mathbf{r}_j) \varphi_i(\mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \varphi_j(\mathbf{r}_i) = \varepsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}_i),
 \end{aligned}
 \tag{2.17}$$

где $i, j = 1 \div N$, N — число электронов в атоме, $\varphi_i(\mathbf{r}_i)$ — одноэлектронные координатные волновые функции, ε_i — соответствующие им одноэлектронные энергии. Первое и второе слагаемые в (2.17) представляют собой одночастичные члены, связанные с оператором кинетической энергии и кулоновским потенциалом ядра атома соответственно. Вторые два слагаемые описывают двухчастичное электрон-электронное взаимодействие, причем третье относится к прямому, а четвертое слагаемое — к обменному взаимодействию. Существенно, что потенциал прямого межэлектронного взаимодействия является локальным, т.е. зависящим от электронной координаты в данной точке. В то же время потенциал обменного взаимодействия нелокален и определяется распределением электронной плотности рассматриваемого электронного состояния во всем пространстве, что существенно усложняет решение системы (2.17). Заметим, что данная система без последнего слагаемого в левой части равенств представляет собой систему уравнений Хартри, не учитывающую обменного взаимодействия между электронами, которое, вообще говоря, весьма существенно для корректного расчета атомной структуры. Практически для определения одноэлектронных орбиталей φ_i и соответствующих им энергий ε_i вместо уравнений Хартри–Фока (2.17) часто используется эквивалентный им вариационный метод, в котором производится минимизация соответствующего функционала энергии итерационным способом. Вычислительная

сложность метода Хартри–Фока быстро возрастает с ростом числа атомных электронов, так что соответствующее расчетное время для тяжелых атомов оказывается слишком большим даже при использовании современных компьютеров. Другим недостатком данного метода является то, что в нем не учитывается корреляционное взаимодействие между электронами, зависящее от разности их координат. Учет корреляционного взаимодействия находится за рамками приближения самосогласованного поля, которое является физической основой метода Хартри–Фока.

Указанные недостатки до некоторой степени удается преодолеть с использованием подходов, в которых производится локализация обменного потенциала. Одним из таких методов является приближение локальной электронной плотности, в котором плотность электронов $n(\mathbf{r})$ рассматривается как базовая величина, определяющая свойства основного состояния атома. В рамках данного приближения удается в известной мере учесть и корреляционное межэлектронное взаимодействие путем введения единого обменно-корреляционного потенциала. Соответствующая система уравнений имеет вид:

$$\left[-(\hbar^2/2m)\Delta + V_{\text{eff}}(\mathbf{r})\right]\varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}), \quad (2.18)$$

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{r} + e^2 \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\mathbf{r})}, \quad (2.19)$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\mathbf{r})|^2, \quad (2.20)$$

где $E_{xc}[n]$ — функционал обменно-корреляционной энергии, зависящий от локальной электронной плотности. Обменно-корреляционная энергия получается в результате функционального дифференцирования функционала $E_{xc}[n]$, как это видно из (2.19). Поскольку точный вид $E_{xc}[n]$, как правило, неизвестен, для него используются различные приближения. В рассматриваемом методе обменно-корреляционная энергия записывается в виде

$$E_{xc}[n] = \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})] d\mathbf{r}, \quad (2.21)$$

где ε_{xc} — обменно-корреляционная энергия в пересчете на один электрон. Аппроксимация (2.21) приводит к локальному обменно-корреляционному потенциалу:

$$V_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial n(\mathbf{r})} \{n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})]\}. \quad (2.22)$$

На практике вместо (2.22) часто используется следующее простое выражение (в атомных единицах):

$$V_{xc}(\mathbf{r}) = -\frac{0.611}{r_s(\mathbf{r})} - 0.0333 \ln \left(1 + \frac{11.1}{r_s(\mathbf{r})} \right), \quad (2.23)$$

где функция $r_s(\mathbf{r})$ определяется из решения уравнения $(4/3)\pi r_s^3 = n^{-1}(\mathbf{r})$. С учетом (2.23) уравнения (2.18) — (2.20) становятся существенно более простыми, чем уравнения Хартри–Фока (2.17), в которых присутствует нелокальное обменное взаимодействие.

2.4. Статистические методы описания структуры многоэлектронных атомов

Как отмечалось выше, приближение Хартри–Фока становится исключительно трудоемким с ростом числа атомных электронов. В то же время именно для описания многоэлектронных атомов ($N \geq 20$) существует альтернативный подход, основанный на статистической модели атомного остова. Самой известной моделью такого рода является приближение Томаса–Ферми. Существуют различные способы вывода этого приближения. Мы здесь приведем один из них, основанный на плазменной модели для подсистемы связанных электронов атома. Аргументом в пользу такого подхода является тот факт, что плазменные модели атома сохраняют свою привлекательность для исследований в области атомной физики на протяжении многих лет, несмотря на бурное развитие вычислительных методов. Очевидным достоинством этих моделей является их простота и универсальность, по-

зволяющая описать многие свойства сложных атомов и ионов на единой основе. К таким свойствам относятся потенциалы взаимодействия атомов с заряженными частицами, сечения фотоионизации атомов, их статические и динамические поляризуемости и другие параметры.

Распределение Томаса–Ферми для многоэлектронного атома можно получить, следуя работам А.В. Виноградова с сотрудниками, из решения самосогласованных уравнений Власова, традиционно использующихся в физике плазмы. Соответствующая система уравнений имеет вид (далее в этой главе используем атомные единицы $\hbar = e = m_e = 1$)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{p} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \nabla U \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0, \quad (2.24)$$

$$\Delta U = 4\pi [Z \delta(\mathbf{r}) - n(\mathbf{r})], \quad (2.25)$$

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p}, \quad (2.26)$$

где $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ — функция распределения электронов, $U(\mathbf{r}, t)$ — энергия электронов в самосогласованном поле, $n(\mathbf{r}, t)$ — распределение электронной плотности, Z — заряд ядра атома. В отсутствие внешнего электромагнитного поля для функции распределения электронов и их энергии имеем: $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f_0(r, p)$, $U(\mathbf{r}, t) = \varphi(r)$, $n(\mathbf{r}, t) = n_0(r)$. Тогда решение уравнения (2.24) может быть представлено в виде

$$f_0(r, p) = \frac{2}{(2\pi)^3} \theta(E_F - E), \quad E = p^2/2 + \varphi(r). \quad (2.27)$$

При записи (2.27) было учтено наличие энергии Ферми для вырожденного электронного газа атомных электронов, подчиняющихся принципу Паули. Подстановка (2.27) в формулы (2.25) — (2.26) дает распределение Томаса–Ферми:

$$n_0(r) = \frac{p_F^3}{3\pi^2}, \quad p_F(r) = \sqrt{2(E_F - \varphi(r))}, \quad (2.28)$$

$$E_F - \varphi(r) = \frac{Z}{r} \chi\left(\frac{r}{r_{TF}}\right), \quad r_{TF} = \frac{b}{\sqrt[3]{Z}}, \quad b = \sqrt[3]{\frac{9\pi^2}{128}} \cong 0.8853, \quad (2.29)$$

где $\chi(x)$ — функция Томаса–Ферми, являющаяся решением одноименного уравнения, r_{TF} — радиус Томаса–Ферми. Заметим, что для нейтрального атома энергия Ферми равняется нулю: $E_F = 0$. В результате из (2.28) — (2.29) имеем распределение электронной плотности атома Томаса–Ферми:

$$n_{TF}(r) = Z^2 f_{TF}(x = r/r_{TF}), \quad (2.30)$$

где введена функция безразмерного расстояния до ядра, равная

$$f_{TF}(x) = \frac{1}{4\pi b^3} \left(\frac{\chi(x)}{x}\right)^{3/2}. \quad (2.31)$$

Представление электронной плотности в форме (2.30) является общим для всех статистических моделей. От конкретного приближения зависит вид функции $f(x)$. Так, в статистическом подходе, предложенном Ленцем и Иенсеном, для $f(x)$ получается следующее выражение:

$$f_{LI}(x) \cong 3.7 e^{-\sqrt{9.7x}} \frac{(1 + 0.26\sqrt{9.7x})^3}{(9.7x)^{3/2}}. \quad (2.32)$$

Отметим, что для $x \leq 1$ формулы (2.31) и (2.32) дают практически совпадающий результат, при больших x функция Ленца–Иенсена приводит к несколько более реалистичному уменьшению электронной плотности атома с расстоянием, чем функция Томаса–Ферми.

Наиболее простая статистическая модель соответствует экспоненциальному уменьшению электронной плотности на радиусе Томаса–Ферми, в этом случае

$$f_{\text{exp}}(x) = \pi^{-1} b^{-3} \exp(-2x). \quad (2.33)$$

Модель атомного остова (2.30), (2.33) часто используется при рассмотрении взаимодействия электромагнитного поля с атомами в составе твердых тел.

На рис. 2.1 приведена радиальная электронная плотность атома криптона, вычисленная в рамках различных приближений. Видно, что статистическая модель Ленца–Иенсена (2.30), (2.32) сглаженным образом передает квантово-механическую зависимость, полученную в приближении Хартри–Фока, не учитывая особенностей, связанных с оболочечной структурой атома. Модель Слэтера (2.8) — (2.11) до некоторой степени улавливает радиальные колебания электронной плотности особенно в области малых расстояний до ядра.

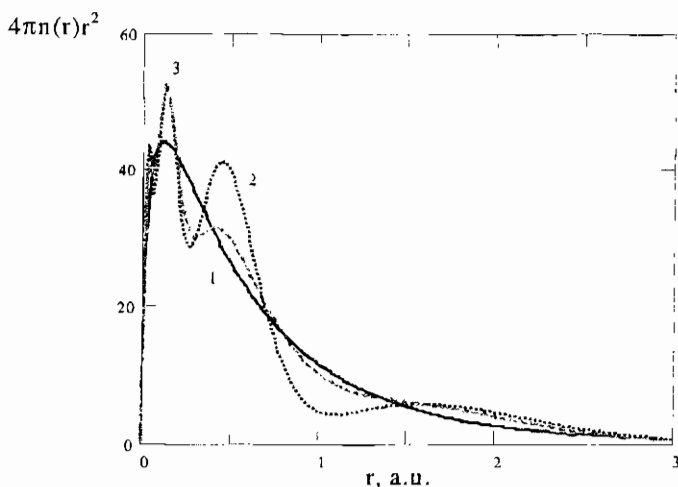


Рис. 2.1

Радиальная плотность электронного остова атома криптона, вычисленная в рамках различных моделей: 1 — Ленца–Иенсена, 2 — Хартри–Фока, 3 — Слэтера

Функция Томаса–Ферми $\chi(x)$, определяющая потенциал и электронную плотность атома в модели Томаса–Ферми, не имеет точного аналитического представления, однако существуют ее многочисленные аппроксимации. Приведем здесь для функции $\chi(x)$ аппроксимацию Зоммерфельда, описывающую не только нейтральные атомы, но и многоэлектронные ионы:

$$\chi(x, q) = \chi_0(x) \left[1 - \left(\frac{1 + z(x)}{1 + z_0(q)} \right)^{\lambda_1/\lambda_2} \right], \quad (2.34)$$

$$z(x) = \left(\frac{x}{\sqrt[3]{144}} \right)^{\lambda_2},$$

$q = Z_i/Z$ — степень ионизации, $x_0(q)$ — приведенный радиус иона, $\lambda_1 = (7 + \sqrt{73})/2$, $\lambda_2 = (-7 + \sqrt{73})/2$, $\chi_0(x)$ — функция Томаса–Ферми нейтрального атома, для которой можно использовать следующее выражение:

$$\chi_0(x) = \frac{1}{(1 + z(x))^{\lambda_1/2}}. \quad (2.35)$$

Параметр $x_0(q)$ может быть определен из решения трансцендентного уравнения $q = -x d\chi/dx$, в котором для функции $\chi(x, q)$ используются формулы (2.34) — (2.35). Для достаточно больших степеней ионизации хороший результат дает аппроксимация приведенного радиуса иона, полученная в модели Томаса–Ферми–Дирака:

$$x_0(q) = 2.96 \left(\frac{1-q}{q} \right)^{2/3}, \quad 0.2 < q \leq 1. \quad (2.36)$$

Модель Томаса–Ферми–Дирака обобщает приближение Томаса–Ферми на учет обменного взаимодействия между электронами. Это взаимодействие имеет принципиальное значение для статистической модели нейтрального атома, поскольку приводит к конечному размеру атома. Заметим, что в модели Томаса–Ферми радиус атома равен бесконечности. В приближении Томаса–Ферми–Дирака справедливо соотношение

$$x_0(q=0) \approx 4Z^{0.4}, \quad (2.37)$$

и, таким образом, радиус атома в рамках данной модели конечен.

СТАНДАРТНЫЕ ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Как известно, в квантовой теории очень мало точно решаемых задач, так что использование различного рода приближенных подходов или модельных соображений является по существу необходимым условием получения практического результата. Физическая адекватность применения тех или иных приближений определяется в каждом конкретном случае спецификой рассматриваемой задачи. В данной главе мы изложим некоторые приближенные методы, часто используемые в квантовой механике и ее приложениях.

3.1. Борновское приближение

Борновское приближение соответствует использованию волновых функций заряженных частиц в виде плоских волн при расчете количественных характеристик процесса. Это означает, что в силу особенностей рассматриваемой задачи движение частицы до и после взаимодействия в нулевом приближении можно считать невозмущенным. В случае неупругого рассеяния электронов на нейтральных атомах условие борновского приближения имеет вид

$$\frac{\Delta E}{E} \ll 1, \quad (3.1)$$

где E и ΔE — начальная энергия и изменение энергии электрона. Если же процесс рассеяния электрона происходит в дальнедействующем, например, кулоновском поле, то вместо (3.1) имеем неравенство

$$\frac{Ze^2}{\hbar v_i} \ll 1, \quad (3.2)$$

Ze — заряд кулоновского центра, v_i — начальная скорость электрона.

Таким образом, из (3.1) и (3.2) следует, что борновское приближение справедливо либо вдали от порога рассматриваемого процесса при рассеянии электронов на короткодействующем потенциале, либо для достаточно быстрых заряженных частиц в случае кулоновского поля. Тогда действие рассеивающего потенциала на электрон можно рассматривать как возмущение.

В случае выполнения борновского критерия матричные элементы физических величин, определяющие вероятность процесса, сводятся к пространственным фурье-образам. Например, амплитуда рассеяния электрона в поле $U(\mathbf{r})$ в условиях применимости борновского приближения равна

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (3.3)$$

где \mathbf{q} — изменение волнового вектора частицы при рассеянии. Зная амплитуду f , можно вычислить сечение процесса по формуле (1.4).

Аналогично сечение столкновительного возбуждения атома в дискретном спектре $|\gamma\rangle \rightarrow |\gamma'\rangle$ в борновском приближении выражается через фурье-образ оператора электронной плотности $\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})$:

$$\sigma_{\gamma\gamma'} = \frac{8\pi}{v_i^2} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} |\langle \gamma' | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \gamma \rangle|^2 \frac{dq}{q^3}, \quad (3.4)$$

где q_{\min} и q_{\max} — минимальное и максимальное значение модуля переданного в ходе процесса волнового вектора, разрешенные законами сохранения.

Как отмечалось выше, борновское приближение соответствует описанию волновой функции в виде плоской волны, когда пространственное распределение вероятности есть величина постоянная. Это значит, что отсутствует понятие траектории движения частицы. Таким образом, борновское приближение являет-

ся существенно квантово-механическим методом теории столкновительно-излучательных процессов.

3.2. Квазиклассическое приближение

Квазиклассическое приближение в квантовой механике аналогично приближению геометрической оптики в задачах распространения света. Геометрическая оптика справедлива в случае, когда длина волны излучения много меньше характерного размера изменения оптических констант среды. Также и квазиклассическое приближение в квантовой механике применимо для потенциалов, слабо изменяющихся на длине волны де Бройля $\lambda(x)$ рассматриваемой частицы. Это условие для случая одномерного движения может быть представлено в виде неравенства

$$\left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1, \quad \lambda(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-U(x))}}. \quad (3.5)$$

При выполнении (3.5) волновая функция квазиклассической системы представима в виде

$$\psi = e^{i\sigma/\hbar}, \quad \sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sigma_2 + \dots, \quad (3.6)$$

где второе равенство представляет собой разложение действия по степеням постоянной Планка. После подстановки (3.6) в уравнение Шредингера в первом приближении по \hbar можно получить

$$\sigma_0 = \pm \int p(x) dx, \quad p(x) = \sqrt{2m(E-U(x))}, \quad (3.7)$$

откуда следует, что главный член разложения (3.6) представляет собой не что иное, как не зависящую от времени часть классического действия.

Поскольку квазиклассическое приближение формально соответствует предельному переходу $\hbar \rightarrow 0$, то, как это видно из (3.6), квазиклассические волновые функции характеризуются большой величиной фазы. Это утверждение используется, в частности, при выводе квазиклассического выражения для амплитуды рассеяния.

Условие квазиклассического приближения для кулоновского поля представляет собой неравенство, обратное борновскому условию (3.2):

$$\frac{Ze^2}{\hbar v_i} > 1. \quad (3.8)$$

Заметим, что случай плазмы, находящейся в состоянии теплового равновесия, описывается как раз формулой (3.8). Кроме того, можно показать, что движение не слишком быстрого электрона с энергией $E \leq 10$ кэВ в атомном потенциале также квазиклассично. Соответствующее условие для томас–фермиевской модели атома имеет вид

$$32.6 E [\text{кэВ}] \leq Z^{4/3}. \quad (3.9)$$

В условиях справедливости квазиклассики в противоположность борновскому приближению имеет смысл понятие траектории частицы (см. классическую схему рассеяния электрона на рис. 1.1). Так, например, при рассмотрении тормозного излучения вводится понятие сублинии, т.е. излучения с траектории с фиксированным прицельным параметром ρ . Критерий квазиклассичности сублинии имеет вид

$$m\rho v_i / \hbar = \sqrt{l(l+1)} \approx l + 1/2 \gg 1, \quad (3.10)$$

т.е. выполняется при достаточно больших значениях квантового числа момента количества движения. Таким образом, большая величина параметра ℓ является условием квазиклассичности движения. Это относится не только к инфинитному движению, характерному для задач рассеяния, но и к финитному, например, для высоковозбужденных (ридберговских) состояний атомов.

3.3. Формулы Крамерса для вероятностей радиационных процессов и связанных с ними величин

В условиях справедливости квазиклассического приближения дальнейшее упрощение описания радиационных процессов возможно в так называемой *крамерсовской области* частот. Эта область соответствует сильно искривленным траекториям движения зарядов и для случая кулоновского поля

определяется неравенством

$$\omega > \omega_c = \frac{m v_i^3}{Z e^2}, \quad (3.11)$$

где ω_c — характерная частота вращения электрона в кулоновском поле. Излучение частот (3.11) происходит с траекторий, проходящих вблизи ядра, где потенциальная энергия $|U(\mathbf{r})|$ существенно превосходит начальную кинетическую энергию электрона E : $|U| \gg E$. Следовательно, приближение Крамерса противоположно приближению прямопролетных траекторий, когда $E \gg |U|$.

Замечательной особенностью крамерсовской области частот (3.11) является тот факт, что в ней спектры излучения при свободно-свободных (ТИ), свободно-связанных (фото-рекомбинация) и даже связанно-связанных (линейчатое излучение) переходах могут быть с хорошей точностью описаны одним универсальным выражением. Физическая причина такой «универсализации» лежит в ограниченности пространственной области траектории, ответственной за излучение, когда излучающий электрон «не знает», останется ли он в непрерывном спектре или перейдет в дискретный.

Для трех вышеупомянутых типов радиационных переходов частотное распределение излучения дается одной универсальной функцией (ниже в данном разделе используются атомные единицы: $\hbar = m = e = 1$ и положено $Z = 1$)

$$F(\omega) = K_{2/3}^2 (l^3 \omega/3) + K_{1/3}^2 (l^3 \omega/3), \quad (3.12)$$

где $K_\nu(x)$ — функции Макдональда, l — орбитальный момент излучающего электрона. В случае линейчатого излучения интерес представляет скорость переходов $nl \rightarrow n'l' = l \pm 1$ для достаточно больших значений главных квантовых чисел (условие квазиклассики). Тогда в аргумент функции (3.12) нужно подставить разность энергий дискретных уровней $\omega = (1/2)(n^{-2} - n'^{-2})$ и для вероятности радиационного перехода

имеет место формула

$$A_{nn'}^l = \frac{2l^4 (n^2 - n'^2)}{9 \pi^2 c^3 n^5 n'^5} F \left(\frac{1}{2n^2} - \frac{1}{2n'^2} \right). \quad (3.13)$$

Для сечения фоторекомбинации электрона с начальным импульсом p на уровень nl можно получить

$$\sigma_{nl} = \frac{8}{9} \frac{1}{c^3} \left(\frac{l}{n} \right)^5 \left(\frac{1}{p^2} + n^2 \right) F \left(\frac{1}{2n^2} + \frac{p^2}{2} \right), \quad (3.14)$$

здесь аргумент у функции F вытекает из закона сохранения энергии.

Для ТИ физический интерес представляет сечение, просуммированное по угловому моменту:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{16\pi}{3\sqrt{3}} \frac{1}{c^3} \frac{1}{p^2} \frac{1}{\omega}. \quad (3.15)$$

Выражение (3.15) представляет собой известную формулу Крамерса для спектрального сечения ТИ. Аналогичное суммирование по орбитальному моменту выражений (3.13) и (3.14) дает формулы Крамерса для дискретных переходов и фоторекомбинации:

$$A_{nn'} = \frac{16}{3\sqrt{3} \pi c^3 n^3 n' (n^2 - n'^2)}, \quad (3.16)$$

$$\sigma_n = \frac{32 \pi}{3\sqrt{3}} \frac{1}{c^3 p^4 n (n^2 + p^{-2})}. \quad (3.17)$$

Вероятность линейчатого излучения (3.16) может быть выражена через силу осциллятора $f_{nn'}$, играющую важную роль в физике радиационных процессов. Эта величина определяется в соответствии с равенством

$$f_{in} = 2\omega_{in} \left| \langle i | d_z | n \rangle \right|^2, \quad (3.18)$$

где d_z — декартова координата оператора электрического дипольного момента атома, ω_{in} — собственная частота перехода $i \rightarrow n$. С погрешностью менее 25% сила осциллятора для

переходов между высоковозбужденными (ридберговскими) состояниями дается формулой Крамерса:

$$f_{nn'} = \frac{32}{3\sqrt{3}\pi} \frac{1}{n^2} \left[\frac{nn'}{n'^2 - n^2} \right]^3. \quad (3.19)$$

Заметим, что сила осциллятора входит в выражение для динамической поляризуемости атома. Формула (3.19) используется для описания поляризуемости ридберговских состояний, усредненной по угловым квантовым числам.

В отличие от борновского подхода формулы Крамерса дают хорошее приближение к точным значениям соответствующих величин даже на границе своей области применимости. Они играют важную роль при описании радиационных явлений в высокотемпературной плазме, где наиболее представленные ионы близки по своей структуре к водородоподобным.

3.4. Метод эквивалентных фотонов Ферми

Метод эквивалентных фотонов был предложен Э. Ферми еще до создания квантовой механики для описания возбуждения и ионизации атомов заряженными частицами с использованием известных (например, из эксперимента) коэффициентов поглощения света, вызывающего заданный процесс. Ферми рассматривал взаимодействие заряженных частиц с атомами вещества как поглощение потока эквивалентных фотонов с интенсивностью $I(\omega)$, определяемой фурье-разложением электрического поля, создаваемого заряженной частицей в месте расположения атома. Отметим, что эквивалентность фотонов является точным результатом для релятивистских частиц (теорема Вейтзеккера–Вильямса), однако ниже используется, как и у самого Э. Ферми, приближенная версия этой теоремы, связанная с полями нерелятивистских частиц. В пределе низких частот эквивалентных фотонов, когда $\omega/\omega_c \ll 1$ (ω_c — кулоновская частота, определяемая равенством из формулы (3.11)) для плотности потока эк-

вивалентных фотонов на частоте ω имеет место выражение (в атомных единицах):

$$I(\omega) = \frac{c\omega}{2\pi^2 v_i^4} \left[K_0^2 \left(\frac{\omega \rho}{v_i} \right) + K_1^2 \left(\frac{\omega \rho}{v_i} \right) \right], \quad (3.20)$$

где K_0 и K_1 — функции Макдональда, ρ — прицельный параметр. Этой формулой пользовался Ферми для расчета возбуждения и ионизации атомов прямолинейно летящей заряженной частицей. Сечение соответствующего процесса получается умножением интенсивности (3.20) на спектральный коэффициент поглощения (с учетом закона сохранения энергии) и интегрированием по прицельному параметру.

Метод эквивалентных фотонов оказался весьма плодотворным при описании поляризационного ТИ (ПТИ) (см. конец главы 1) и поляризационной рекомбинации. Действительно, если столкновительное возбуждение и ионизация атома представляют собой поглощение эквивалентных фотонов, то ПТИ может быть интерпретировано как их рассеяние на электронах атома (иона) с преобразованием в реальный фотон. Разница между ПТИ и поляризационной рекомбинацией с этой точки зрения заключается в том, что в первом случае излучающий электрон остается в непрерывном спектре, а во втором случае он захватывается в состояние дискретного спектра мишени.

С учетом вышеупомянутой интерпретации спектральная интенсивность ПТИ $Q^{PB}(\omega)$ может быть выражена через сечение рассеяния света на атоме $\sigma_{scat}(\omega)$ следующим образом:

$$Q^{PB}(\omega) = \sigma_{scat}(\omega) I(\omega), \quad (3.21)$$

где $I(\omega)$ — плотность потока эквивалентным фотонам для заданного рассеяния налетающей частицы. В приближении прямопролетных траекторий выражение для $I(\omega)$ дается формулой (3.20). В противоположном (крамерсовском) случае плотность потока эквивалентных фотонов выражается через функцию (3.12). Если состояние мишени не изменяется, то

сечение рассеяния $\sigma_{scat}(\omega)$, входящее в равенство (3.21), может быть представлено через частотно-зависимую поляризуемость атома $\alpha(\omega)$:

$$\sigma_{scat}(\omega) = \frac{8\pi\omega^4}{3c^4} |\alpha(\omega)|^2. \quad (3.22)$$

Из (3.21) — (3.22) следует, что в рассматриваемом случае динамика атомных электронов полностью описывается поляризуемостью мишени. Методам расчета величины $\alpha(\omega)$ посвящена глава 5.

Заметим, что формула (3.21) описывает ПТИ без учета возможного проникновения налетающей частицы в электронный остов атома. Такое приближение в ряде случаев оправдано. Более строгое рассмотрение предполагает учет эффектов проникновения, который осуществляется с помощью обобщенной поляризуемости атома $\alpha(\omega, \mathbf{q})$, зависящей, помимо частоты ω , еще и от переданного мишени волнового вектора \mathbf{q} .

Если налетающая частица излучает фотон достаточной высокой частоты, так что при этом импульс отдачи превышает характерный импульс атомных электронов, то тормозное излучение идет с ионизацией мишени. В этом случае поляризационное ТИ может быть интерпретировано как комптоновское рассеяние эквивалентных фотонов, и для описания процесса возможно использование методов теории рассеяния рентгеновских лучей атомами (см. главу 4).

РАССЕЯНИЕ ФОТОНА НА ЭЛЕКТРОНЕ И АТОМЕ

4.1. Комптоновское рассеяние на свободном электроне

Рассеяние фотона с частотой ω и волновым вектором \mathbf{k} на свободном электроне сопровождается изменением частоты $\omega \rightarrow \omega'$ и волнового вектора $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$. Если ввести угол рассеяния фотона ϑ , то на основании закона сохранения энергии-импульса можно получить следующую связь между изменением частоты и углом рассеяния фотона:

$$\frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega} = \frac{\hbar}{mc^2} (1 - \cos \vartheta), \quad (4.1)$$

где m — масса электрона, c — скорость света. Множитель перед круглыми скобками в правой части равенства (4.1) может быть переписан в виде $\lambda_c/2\pi c$, где $\lambda_c = h/mc \cong 2.42 \cdot 10^{-10}$ см — комптоновская длина волны электрона. Из выражения (4.1) легко видеть, что при нулевом угле рассеяния $\vartheta = 0$ изменение частоты фотона равно нулю $\omega = \omega'$. Если же $\vartheta \neq 0$, то частота рассеянного фотона оказывается меньше его первоначальной частоты $\omega' < \omega$, поскольку часть энергии фотона передается рассеивающему электрону (энергия «отдачи»). С помощью стандартных правил квантовой электродинамики для сечения рассеяния фотона на свободном электроне в лабораторной системе отсчета (связанной с электроном) можно получить следующее выражение (формула Кляйна–Ницины–Тамма):

$$d\sigma = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^2 \left(\frac{\omega}{\omega'} + \frac{\omega'}{\omega} - \sin^2 \vartheta \right) d\Omega', \quad (4.2)$$

где $r_e = e^2/mc^2 \cong 2.82 \cdot 10^{-13}$ см — так называемый классический радиус электрона, $d\Omega'$ — элементарный телесный угол в направлении рассеянного фотона.

Если $\hbar\omega \ll mc^2$, то, как это следует из (4.1), изменение частоты мало по сравнению с самой частотой $|\Delta\omega| \ll \omega$, и в равенстве (4.2) можно положить $\omega \approx \omega'$. Тогда из сечения (4.2) получается известная нерелятивистская формула Томсона:

$$d\sigma^{Th} = \frac{1}{2} r_e^2 (1 + \cos^2 \vartheta) \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^2 d\Omega'. \quad (4.3)$$

Полное сечение рассеяния в общем случае может быть получено из (4.2):

$$\sigma = 2\pi r_e^2 \frac{1}{x} \left\{ \left(1 - \frac{4}{x} - \frac{8}{x^2} \right) \ln(1+x) + \frac{1}{2} + \frac{8}{x} - \frac{1}{2(1+x)^2} \right\}, \quad (4.4)$$

параметр x в лабораторной системе отсчета равен $x = 2\hbar\omega/mc^2$.

В нерелятивистском пределе $x \ll 1$ первые члены разложения правой части равенства (4.4) дают:

$$\sigma = \sigma^{Th} \left(1 - \frac{2\hbar\omega}{mc^2} \right), \quad \hbar\omega \ll mc^2, \quad (4.5)$$

здесь введено классическое томсоновское сечение рассеяния фотона на электроне $\sigma^{Th} = 8\pi r_e^2/3$.

В ультрарелятивистском случае $x \gg 1$ из (4.4) можно получить

$$\sigma = \pi r_e^2 \frac{mc^2}{\hbar\omega} \left(\ln \left(\frac{2\hbar\omega}{mc^2} \right) + \frac{1}{2} \right), \quad \hbar\omega \gg mc^2. \quad (4.6)$$

Отметим, что в ультрарелятивистском пределе дифференциальное сечение рассеяния имеет в лабораторной системе отсчета резкий максимум по направлению первоначального распространения фотона. В нерелятивистском же случае, как это видно из

формулы (4.3), распределение рассеянного излучения носит дипольный характер.

4.2. Рассеяние электромагнитного излучения на связанных электронах. Высоочастотное приближение

В случае рассеяния фотона на атомных электронах задача существенно усложняется необходимостью учета связи электронов с ядром атома. В нерелятивистском пределе $\hbar\omega \ll mc^2$ и дипольном приближении по падающему и рассеянному фотонам $ka, k'a \ll 1$ (a — характерный размер атома) выражение для сечения рассеяния имеет вид

$$d\sigma = \left| \sum_n \left\{ \frac{(\mathbf{d}_{2n} \mathbf{e}'^*)(\mathbf{d}_{n1} \mathbf{e})}{\omega_{n1} - \omega - i0} + \frac{(\mathbf{d}_{2n} \mathbf{e})(\mathbf{d}_{n1} \mathbf{e}'^*)}{\omega_{n1} + \omega - i0} \right\} \right|^2 \frac{\omega \omega'^3}{\hbar^2 c^4} d\Omega', \quad (4.7)$$

где $\hbar\omega_{n1} = E_n - E_1$ — энергии перехода атомных электронов, \mathbf{d} — оператор дипольного момента системы связанных электронов, \mathbf{e}, \mathbf{e}' — единичные векторы поляризации падающего и рассеянного фотонов. В (4.7) предположена возможность изменения атомного состояния в ходе рассеяния. Если $E_1 = E_2$, то имеет место *релеевское рассеяние*, когда частота падающего излучения не изменяется, в противоположном случае рассеяние называется *комбинационным*, причем, если $\omega' < \omega$, реализуется *стоксов* лучай, когда $\omega' > \omega$ — *антистоксов*.

Формула (4.7) может быть записана компактным образом, если ввести тензор рассеяния электромагнитного излучения $(c_{ik})_{21}$, определяемый выражением под знаком модуля в (4.7), деленным на постоянную Планка \hbar . Тогда вместо (4.7) имеем

$$d\sigma = \left| e_i'^* e_k (c_{ik})_{21} \right|^2 \frac{\omega \omega'^3}{c^4} d\Omega'. \quad (4.8)$$

Здесь, как обычно, по повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

В случае релеевского рассеяния величина $(c_{ik})_{11}$ совпадает с тензором динамической поляризуемости атома: $(c_{ik})_{11} = \alpha_{ik}(\omega)$. При рассеянии электромагнитного излучения рентгеновского диапазона $\lambda \leq 1 \text{ \AA}$ ($k = 2\pi/\lambda \geq 10 \text{ \AA}^{-1}$) условие дипольного приближения, вообще говоря, нарушается, и вместо формулы (4.7) нужно использовать выражение, учитывающее волновые векторы падающего и рассеянного фотонов. Недипольный тензор рассеяния, определяющий сечение рассеяния с помощью (4.8), имеет вид

$$c_{fi}^{ls}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{e^2}{m\omega'\omega} \left\{ \frac{m}{\hbar} \sum_n \left[\frac{j_{fn}'(\mathbf{k}) j_{ni}^s(\mathbf{k}')}{\omega_{fn} + \omega + i0} + \frac{j_{fn}^s(\mathbf{k}') j_{ni}'(\mathbf{k})}{\omega_{in} - \omega + i0} \right] - \delta^{ls} n_{fi}(\mathbf{q}) \right\}, \quad (4.9)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ — изменение волнового вектора фотона, δ^{ik} — символ Кроннекера,

$$j^i(\mathbf{k}) = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N \{ \hat{p}_j^i \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) + \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \hat{p}_j^i \}, \quad \hat{n}(\mathbf{q}) = \sum_{j=1}^N \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) —$$

фурье-образы оператора плотности тока атомных электронов и оператора электронной плотности, $|i\rangle, |f\rangle$ — начальное и конечное состояние атома.

Заметим, что в высокочастотном (high-frequency) пределе, который можно определить неравенством $\hbar\omega \gg I$ (*) (I — характерный потенциал ионизации атома), основной вклад в тензор рассеяния дает второе слагаемое в фигурных скобках формулы (4.9). Сумма в квадратных скобках имеет порядок величины $(I/\omega)^2$. При выполнении высокочастотного условия (*) тензор рассеяния $c_{fi}^{ls}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ оказывается скаляром, равным

$$c_{fi}^{hf}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{e^2}{m\omega'\omega} n_{fi}(\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}). \quad (4.10)$$

Подчеркнем, что условие высокочастотного предела $\hbar\omega \gg I$ выполняется для большинства атомных электронов в рентгеновском диапазоне энергий фотона, когда $\hbar\omega \geq 10$ кэВ. Исключения составляют электроны внутренних K -оболочек, а также L -оболочек тяжелых элементов с зарядовым числом $Z \geq 60$.

Подставляя выражение для тензора рассеяния в высокочастотном пределе (4.10) в формулу для сечения рассеяния (4.8) и усредняя по поляризациям фотонов, находим

$$d\sigma^{hf} = \frac{1}{2} r_e^2 (1 + \cos^2 \vartheta) \left(\frac{\omega'}{\omega} \right) |n_{fi}(\mathbf{q})|^2 d\Omega'. \quad (4.11)$$

Полученное выражение отличается от классической формулы Томсона (4.3) наличием дополнительного множителя, пропорционального квадрату модуля матричного элемента от фурье-образа оператора плотности атомных электронов, вычисленного на волновом векторе $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$.

Выражение (4.11) должно быть дополнено равенством (4.8), выражающим закон сохранения энергии при рассеянии, которое удобно записать через дельта-функцию $\delta(\omega - \omega' + E_i - E_f)$. Используя ее интегральное представление $\delta(x) = (1/2\pi) \int \exp(ixt) dt$ и определение гейзенберговского оператора $\hat{q}(t) = \exp(iHt) \hat{q} \exp(-iHt)$, можно получить следующее частотно-угловое сечение рассеяния фотона на атоме, находящемся в начальном состоянии $|i\rangle$, в высокочастотном приближении:

$$\frac{d\sigma_i}{d\Omega' d(\Delta\omega)} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)^{Th} \left(\frac{\omega}{\omega'} \right) S_i(\Delta\omega, \mathbf{q}), \quad (4.12)$$

где $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega'}\right)^{Th}$ дается формулой (4.3). В (4.12) введен динамический форм-фактор (ДФФ) атома $S_i(\Delta\omega, \mathbf{q})$, равный по определению:

$$S_i(\Delta\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\Delta\omega t} \langle i | \hat{n}(\mathbf{q}, t) \hat{n}(-\mathbf{q}) | i \rangle. \quad (4.13)$$

Как видно из (4.13), ДФФ представляет собой пространственно-временной фурье-образ от корреляционной функции плотность-плотность атомных электронов. Динамический форм-фактор удовлетворяет ряду правил сумм, два из которых в случае водородоподобного атома имеют особенно простой вид:

$$\int_{-\infty}^{\infty} S(\omega, \mathbf{k}) d\omega = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega, \mathbf{k}) \omega d\omega = \mathbf{k}^2 / 2m. \quad (4.14)$$

Итак, частотно-угловое распределение рассеянных на атоме фотонов в высокочастотном приближении $\hbar\omega \gg I$ определяется формулой (4.12). Если же $\hbar\omega < I$, то выражение (4.12) становится, вообще говоря, несправедливым. В частности, при приближении частоты рассеивающегося излучения к одной из собственных частот атома возникает так называемое резонансное рассеяние, сечение которого имеет ярко выраженный максимум.

В случае релеевского рассеяния $|i\rangle = |f\rangle$ на водородоподобном атоме в основном состоянии диагональный матричный элемент $n_n(\mathbf{q})$, входящий в выражение для сечения (4.11), легко вычисляется аналитически, и равенство (4.11) преобразуется к виду:

$$\frac{d\sigma_{ii}}{d\Omega'} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'}\right)^{Th} \frac{1}{[1 + a_H^2 \mathbf{q}^2 / 4]^2}, \quad (4.15)$$

где $a_H = \hbar^2 / Z m e^2$ — характерный радиус водородоподобного иона. Из приведенного выражения следует, что сечение релеевского рассеяния резко падает (как $(1/a_H q)^8$), если $q > a_H^{-1}$.

Таким образом, для больших (по сравнению с характерным атомным импульсом) импульсов отдачи рассеяние идет с изменением состояния атома. При этом, если атом ионизируется, тогда имеет место комптоновское рассеяние, если возбуждается в состоянии дискретного спектра, то рассеяние является комбинационным (рамановским). Отметим, что сечение комбинационного рассеяния, возрастая при малых q от нуля, достигает своего максимума при $q \approx 1/a$ и затем уменьшается. Расчет для основного состояния водородоподобного атома показывает, что величина этого сечения всегда меньше величины его релеевского аналога и в максимуме зависимости от переданного волнового вектора q достигает значения порядка 20% от томсоновского сечения.

В противоположном случае $q < a_H^{-1}$ рассеяние фотона с подавляющей вероятностью идет без изменения состояния атома. В этом можно убедиться с помощью формул (4.12) — (4.13). Действительно, при малых изменениях волнового вектора рассеивающегося фотона фурье-образ оператора электронной плотности равен числу атомных электронов $n(q < a_H^{-1}) \cong N$. Тогда из (4.13) следует, что ДФФ атома имеет вид $S_i = N^2 \delta(\omega - \omega')$, т.е. $\omega = \omega'$ и соответственно $E_i = E_f$. Отсюда также следует важный вывод о том, что при малых переданных импульсах рассеяние носит когерентный по вкладу атомных электронов характер, поэтому сечение процесса пропорционально числу электронов в квадрате. В случае больших переданных импульсов $q > 1/a$, напротив, рассеяние некогерентно, и его сечение пропорционально N в первой степени. Учитывая вышесказанное, можно предложить следующее приближенное выражение для ДФФ атома:

$$S(\Delta\omega, q) \approx \theta(1/a - q)N^2 \delta(\Delta\omega) + \theta(q - 1/a)N \delta\left(\Delta\omega + (\hbar q)^2/2m\right). \quad (4.16)$$

Первое слагаемое в правой части этого равенства описывает когерентные процессы, происходящие при малой отдаче. Второе слагаемое в правой части (4.16) относится к некогерентным явле-

ниям, когда избыток энергии-импульса, возникающий в ходе рассеяния, уносится ионизированным электроном.

4.3. Импульсное приближение в теории комптоновского рассеяния рентгеновских лучей на атомах

В предыдущем разделе указывалось, что (за вычетом вклада внутренних K -оболочек) для описания рассеяния рентгеновских лучей на атоме можно использовать высокочастотное приближение (4.12), в рамках которого динамические свойства атома, существенные для рассеяния фотонов, определяются его динамическим форм-фактором (4.13). Как правило, ДФФ атома не может быть вычислен в общем виде. Качественная формула для ДФФ (4.16) не учитывает деталей электронного строения атома и слишком груба для сравнения с экспериментальными данными. В то же время существует приближенный метод вычисления сечения рассеяния рентгеновских лучей на атоме, который уже на ранних стадиях использовался для анализа экспериментальных данных. Это так называемое импульсное приближение (ИП), которое предполагает, что атомные электроны в ходе рассеяния на них рентгеновских лучей ведут себя в большей мере как свободные, нежели чем связанные. Точное определение ИП будет дано ниже.

Импульсное приближение для описания комптоновского рассеяния рентгеновских лучей на атоме, как это было в свое время показано Эйзенбергером и Платцманом, может быть получено из первых принципов. Для этого нужно воспользоваться выражением для ДФФ (4.13) и явным видом пространственного фурье-образа от оператора электронной плотности

$$\hat{n}(\mathbf{q}) = \sum_{j=1}^N \exp(-i \mathbf{q} \mathbf{r}_j).$$

В выражении для гейзенберговского оператора $\hat{n}(\mathbf{q}, t) = \exp(iHt) \hat{n}(\mathbf{q}) \exp(-iHt)$ полный гамильтониан системы H представляет собой сумму оператора кинетической T и потенциальной V энергии $H = T + V$. (Напомним, что оператор потенциальной энергии коммутирует с оператором элек-

тронной плотности, а оператор кинетической энергии не коммутирует.) Далее выпишем известное разложение операторной экспоненты, входящей в определение ДФФ:

$$e^{iHt} = e^{iTt} e^{iVt} e^{-i[T,V]t^2/2} \dots, \quad (4.17)$$

где $[A, B]$ — коммутатор операторов A и B , многоточие обозначает экспоненты с многократными коммутаторами, содержащие более высокие степени параметра времени t . Равенство (4.17) фактически является разложением по степеням временного интервала t . Величина этого интервала ограничена сверху значением $1/\Delta\omega$, как это следует из формулы (4.13). Действительно, вклад в интеграл по времени в определении ДФФ для больших значений переменной t мал из-за сильных осцилляций экспоненты. Условие ИП дается равенством

$$e^{-i[T,V]t^2/2} = 1, \quad (4.18)$$

согласно которому некоммутативностью операторов T и V можно пренебречь на временах, ответственных за процесс. Физически это означает, что за время рассеяния фотона потенциал, в котором движется атомный электрон, практически не изменяется. При выполнении (4.18) вкладом в разложение (4.17) экспонент с многократными коммутаторами можно пренебречь, так что выражение для ДФФ в импульсном приближении имеет вид

$$S_i^{IA}(\Delta\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\Delta\omega t} \langle i | e^{iTt} \hat{n}(\mathbf{q}) e^{-iTt} \hat{n}(-\mathbf{q}) | i \rangle. \quad (4.19)$$

Из данного равенства следует, что потенциал V исчезает из определения ДФФ в импульсном приближении. Подчеркнем, однако, что это не означает полного пренебрежения связи атомных электронов с ядром. В импульсном приближении, как уже отмечалось, потенциал V предполагается постоянным, и поэтому он взаимно уничтожается в выражениях для энергии начального и конечного состояний атома. Иными словами, энергия начального и конечного состояния ионизируемого электрона в рамках ИП измеряется по отношению к постоянному мгновенному значению потенциала V . Выражение (4.19) можно переписать, сделав вставку из суммы по полному набору волновых функций свобод-

ного движения (плоских волн) между операторами $\hat{n}(\mathbf{q})$ и $e^{-i\tau T}$ и воспользовавшись тем, что плоская волна является собственной функцией оператора $e^{-i\tau T}$, тогда для ДФФ nl -й электронной подболочки атома имеем

$$S_{nl}^{iA}(\Delta\omega, \mathbf{q}) = \int \frac{d\mathbf{p}}{4\pi} \delta\left(\Delta\omega + \frac{(\mathbf{p}-\mathbf{q})^2}{2} - \varepsilon_{nl}\right) |R_{nl}(p)|^2, \quad (4.20)$$

ε_{nl} , — энергия связи подболочки, $R_{nl}(p)$ — радиальная волновая функция электронной подболочки в импульсном представлении, определяемая выражением

$$R_{nl}(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty R_{nl}(r) j_l(pr) r^2 dr, \quad (4.21)$$

здесь $j_l(pr)$ — сферическая функция Бесселя первого рода,

$R_{nl}(r)$ — нормированная радиальная волновая функция электронной подболочки. Если использовать связь между импульсом и энергией атомных электронов в квазисвободном приближении:

$$p^2/2 = \varepsilon_{nl}, \quad (4.22)$$

вместо (4.20) имеем

$$S_{nl}^{iA}(\Delta\omega, \mathbf{q}) = \int \frac{d\mathbf{p}}{4\pi} \delta\left(\Delta\omega + \frac{q^2}{2} - \mathbf{p}\mathbf{q}\right) |R_{nl}(p)|^2. \quad (4.23)$$

Как видно из этой формулы, сдвиг частоты при комптоновском рассеянии в рамках импульсного приближения связан с доплеровским сдвигом при рассеянии фотона на движущемся атомном электроне (слагаемое $\mathbf{p}\mathbf{q}$ под знаком дельта-функции в (4.23)). При этом спектр рассеянных фотонов определяется распределением атомных электронов по импульсам, даваемым функцией $|R_{nl}(p)|^2$.

Сечение комптоновского рассеяния рентгеновских лучей на атоме обычно выражают через комптоновский профиль (КП) электронной подболочки. КП определяется по формуле

$$J_{nl}(Q) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} R_{nl}(p)^2 p dp. \quad (4.24)$$

С учетом данного определения динамический форм-фактор электронной подболочки в рамках импульсного приближения (4.23) может быть выражен через КП следующим образом:

$$S_{nl}^{IA}(q) = \frac{m}{q_i} J_{nl} \left(Q = \frac{m|\Delta\omega - \hbar q^2/2}{|q|} \right). \quad (4.25)$$

Отметим, что КП удовлетворяет нормировочному условию:

$$2 \int_0^{\infty} J_{nl}(Q) dQ = 1. \quad (4.26)$$

Поскольку комптоновское рассеяние является некогерентным процессом, атомный КП равен сумме КП всех электронных подболочек.

Используя связь (4.12) и формулу (4.25), для сечения комптоновского рассеяния рентгеновских лучей на атоме находим

$$\frac{d\sigma^{IA}}{d\Omega' d(\Delta\omega)} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)^{Th} \left(\frac{\omega}{\omega'} \right) \frac{m}{q} J(Q), \quad (4.27)$$

$$Q = \frac{m|\Delta\omega| - \hbar q^2/2}{|q|}.$$

Таким образом, выражение (4.27) совместно с формулой (4.3) для $(d\sigma/d\Omega')^{Th}$ дает частотно-угловое распределение рентгеновского излучения, рассеянного атомом, в рамках высокочастотного и импульсного приближений. Видно, что частотное распределение для заданного угла рассеяния определяется комптоновским профилем атома (4.24), который в свою очередь зависит от волновых функций атомных электронов $R_{nl}(r)$. Соответствующая зависимость от частоты представляет собой колоколообразную кривую, ширина которой определяется шириной распределения атомной волновой функции по импульсам. Приведем выражение для КП основного состояния водородоподобного иона:

$$J_{1s}^H(Q) = \frac{8 p_H^5}{3\pi (p_H^2 + Q^2)^3}, \quad (4.28)$$

где $p_H = Z m e^2 / \hbar$ — характерный импульс водородоподобного иона. Подставляя (4.28) в (4.27), находим частотную функцию распределения рентгеновского излучения в рамках ИП для фиксированного угла рассеяния на водородоподобном ионе в 1s-состоянии:

$$\frac{d\sigma_{1s}^H}{d\Delta\omega} = \sigma_{1s}(q) \left[\frac{q^6 p_H^6}{q^2 p_H^2 + (m \Delta\omega - \hbar q^2/2)^2} \right]^3. \quad (4.29)$$

Из данной формулы следует, что центральная частота рассеянного излучения определяется равенством $m(\omega - \omega') = \hbar q^2/2$. Это равенство представляет собой закон сохранения энергии-импульса для процесса рассеяния излучения на свободном покоящемся электроне. Ширина частотного распределения (4.29) пропорциональна параметру $q p_H / m$, что соответствует доплеровскому уширению спектра излучения, рассеянного на электро-не, движущемся со скоростью $v_H = p_H / m = Z e^2 / \hbar$.

На рис. 4.1 представлено спектральное сечение комптоновского рассеяния (в относительных единицах) на водородоподобном ионе в 1s-состоянии, рассчитанное в высокочастотном приближении с использованием точных волновых функций (кривые 1, 3) и в рамках импульсного приближения (кривые 2, 4) по формулам (4.27) — (4.28). Рассмотрены два значения заряда ядра иона: $Z = 1$ (кривые 1, 2) и $Z = 2$ (кривые 3, 4). Энергия падающего фотона равна $\hbar\omega = 17400$ эВ (639.7 а.е.), (что соответствует линии K_{α_1} в атоме молибдена), угол рассеяния излучения $\vartheta = 133.75^\circ$. Как видно из данного рисунка, максимум спектрального сечения приходится на энергию рассеянного фотона $\hbar\omega = 605$ а.е. (16456 эВ), что соответствует энергии отдачи $E_R = \hbar|\Delta\omega| = 944$ эВ.

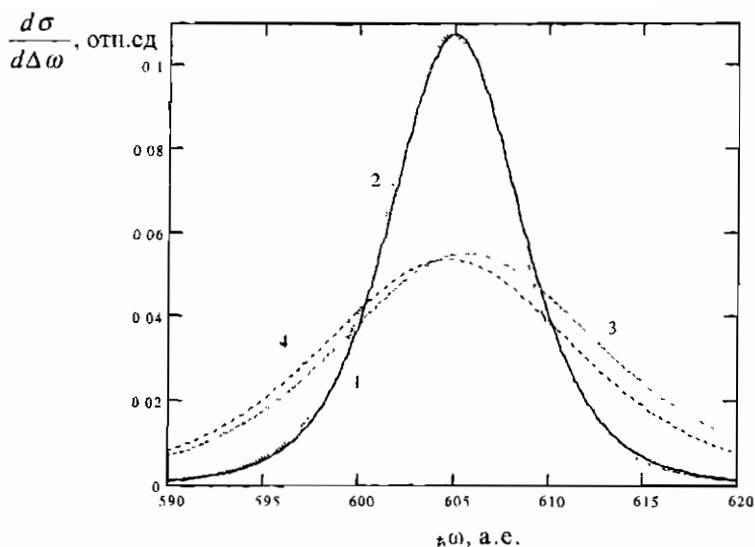


Рис. 4.1

Спектральное сечение комптоновского рассеяния рентгеновских лучей ($\hbar\omega = 17\,400$ эВ, угол рассеяния $\vartheta = 133.75^\circ$) на водородоподобном ионе в основном состоянии, рассчитанное в высокочастотном приближении с использованием точных волновых функций (кривые 1, 3) и в рамках импульсного приближения (кривые 2, 4) для различных зарядов ядра иона: кривые 1, 2 — $Z = 1$, кривые 3, 4 — $Z = 2$

Заметим, что энергия отдачи при рассеянии на свободном покоящемся электроны для заданных значений параметров равна 949 эВ, что находится в хорошем соответствии с вышеприведенным значением E_R в максимуме спектрального сечения. Подчеркнем, что в случае свободного электрона существует однозначное соответствие между углом рассеяния и частотой рассеянного фотона. Поэтому спектральное сечение представляет собой дельта-функцию частотной отстройки $\omega - \omega' - E_R/\hbar$. Связь электрона с ядром приводит к возникновению конечной спектральной ширины $\delta\omega$ частотного распределения рассеянных фотонов при заданном угле рассеяния ϑ . Естественно, чем сильнее связь с ядром, тем больше величина параметра $\delta\omega$. Это следует

также из рис. 4.1: для больших значений заряда ширина частотной зависимости больше. Кроме того, из данного рисунка вытекает, что точность ИП уменьшается с ростом энергии связи E_B ($E_B = Z^2/2$ а.е. в случае водородоподобного иона) при фиксированной энергии отдачи E_R . Таким образом, критерием применимости ИП может служить величина отношения $\xi = E_B/E_R$, с уменьшением параметра ξ точность ИП возрастает. Другим следствием результатов, представленных на рис. 4.1, является наличие асимметрии частотного распределения рассеянных фотонов, рассчитанного с помощью точных волновых функций (кривые 1, 3). В высокочастотном крыле линии интенсивность рассеянного излучения падает медленнее, чем в низкочастотном крыле, причем эта асимметрия растет с ростом энергии связи E_B . В то же время расчет в рамках ИП дает симметричный (в данном случае лоренцевский) контур. Заметим, что обсуждаемая асимметрия может быть до некоторой степени учтена и в рамках импульсного приближения, если в правой части равенства (4.17) учесть следующие члены разложения.

КЛАССИЧЕСКИЕ И КВАНТОВЫЕ ПОДХОДЫ К РАСЧЕТУ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ АТОМНЫХ СИСТЕМ

5.1. Определение дипольной поляризуемости

Динамическая (дипольная) поляризуемость $\alpha(\omega)$ представляет собой важную спектроскопическую характеристику атомных систем, описывающую отклик на внешнее электромагнитное возмущение в случае, если напряженность возмущающего поля много меньше атомной напряженности, а длина волны много больше размеров атома. С математической точки зрения поляризуемость представляет собой в общем случае тензор второго ранга α_{ij} , связывающий наведенный в электронном остове дипольный момент \mathbf{D} и напряженность внешнего электрического поля \mathbf{F} :

$$D_i(\omega) = \sum_j \alpha_{ij}(\omega) F_j(\omega). \quad (5.1)$$

Для сферически-симметричных состояний поляризуемость α_{ij} сводится к скаляру:

$$\alpha_{ij}(\omega) = \alpha(\omega) \delta_{ij}, \quad (5.2)$$

где δ_{ij} — символ Кронскера. Динамическая поляризуемость определяет диэлектрическую проницаемость ансамбля атомов, находящихся в одном и том же электронном состоянии в соответствии с равенством

$$\epsilon_{ij}(\omega) = \delta_{ij} + 4\pi N_a \alpha_{ij}(\omega), \quad (5.3)$$

где N_a — число атомов в заданном электронном состоянии в единице объема.

Заметим, что в основе ряда экспериментальных методик определения динамической поляризуемости $\alpha(\omega)$ лежит ее связь с индексом рефракции (показателем преломления) вещества $n(\omega)$:

$$\frac{n^2(\omega) - 1}{n^2(\omega) + 2} = \frac{4}{3} \pi N_a \alpha(\omega). \quad (5.4)$$

Динамическая поляризуемость определяет сдвиг энергии атомного уровня E_n во внешнем электрическом поле. Во втором порядке теории возмущений для нерезонансного внешнего поля F и сферически-симметричного электронного состояния соответствующая поправка к энергии имеет вид

$$\Delta E_n^{(2)} = -\frac{1}{2} \alpha_n(\omega) F^2. \quad (5.5)$$

Формула (5.5) описывает квадратичный эффект Штарка. В случае, когда частота внешнего поля совпадает с собственной частотой атома, сдвиг энергии оказывается линейным по напряженности электрического поля — линейный эффект Штарка.

Статическая поляризуемость $\alpha(\omega = 0)$ определяет сдвиг уровня в постоянном электрическом поле, и, кроме того, потенциал межатомного взаимодействия на больших расстояниях (потенциал Ван-дер-Ваальсовского взаимодействия). Потенциал взаимодействия нейтрального атома с медленной заряженной частицей на больших расстояниях также определяется его статической поляризуемостью:

$$V_{pot}(r) = -\frac{\alpha(0)}{2r^4}. \quad (5.6)$$

С использованием (5.6) можно получить следующее выражение для сечения упругого столкновения заряженной частицы с атомом в случае применимости классического приближения для описания движения налетающей частицы с энергией E :

$$\sigma_{scat}^{el}(E) = 2\pi \sqrt{\frac{\alpha(0)}{2E}}. \quad (5.7)$$

Отметим, что равенство (5.7) следует (с точностью до коэффициента, равного 2) из (5.6), если определить эффективный радиус рассеяния r_E с помощью уравнения

$$E = V_{pot}(r). \quad (5.8)$$

Динамическая поляризуемость $\alpha(\omega)$ определяет в приближении Борна–Бете спектральное сечение поляризационного тормозного излучения при рассеянии быстрого электрона на атоме в соответствии с выражением:

$$\frac{d\sigma^{PB}}{d\omega} = \frac{16\omega^3 |\alpha(\omega)|^2}{3c^3 v^2} \ln \left(\frac{v}{\omega R_a} \right), \quad (5.9)$$

где $v = \sqrt{2E}$, c — скорость света, R_a — характерный радиус атома. Формула (5.9) справедлива, если выполнены неравенства: $v > v_a$, $v > \omega R_a$, v_a — характерная скорость атомных электронов.

5.2. Общие выражения для дипольной поляризуемости

Наиболее общее квантово-механическое выражение для дипольной поляризуемости атома, находящегося в i -м сферически-симметричном состоянии, имеет вид (в атомных единицах $\hbar = m = e = 1$):

$$\alpha_i(\omega) = \sum_n \frac{f_m}{\omega_m^2 - \omega^2 - i0}. \quad (5.10)$$

Здесь $f_m = 2\omega_m |\langle i | d_z | n \rangle|^2$ — силы осцилляторов, ω_m — собственные частоты переходов атомных электронов в состояния дискретного и непрерывного спектра, d_z — декартова координата оператора дипольного момента системы.

Интересно сравнить (5.10) с формулой для поляризуемости классического осциллятора с собственной частотой ω_0 :

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i0}. \quad (5.11)$$

Из (5.10) и (5.11) вытекает, что поляризуемость атома представляет собой сумму поляризуемостей электронных переходов, в которой каждый переход представлен эффективной силой, равной силе осциллятора данного перехода. Этот факт является выражением спектроскопического принципа соответствия, который гласит, что квантовая система может быть представлена набором классических осцилляторов, частоты которых равны собственным частотам квантовой системы, а вклад каждого осциллятора определяется его силой.

Силы осцилляторов удовлетворяют правилу сумм:

$$\sum_n f_{in} = N, \quad (5.12)$$

где N — число электронов в атоме. С учетом (5.12) из формулы (5.8) следует высокочастотная асимптотика для $\alpha(\omega)$:

$$\alpha(\omega \gg I) \approx -\frac{N}{\omega^2}, \quad (5.13)$$

где I — потенциал ионизации атома. Из (5.3) и (5.13) получается плазменная формула для диэлектрической проницаемости среды:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2}, \quad (5.14)$$

где $\omega_{pe} = \sqrt{4\pi N_e}$ — электронная плазменная частота, $N_e = N_a N$ — число атомных электронов в единице объема.

Как видно из (5.10), поляризуемость атома является, вообще говоря, комплексной величиной, действительная часть которой описывает рассеяние, а мнимая часть — поглощение электромагнитного поля атомными электронами. Связь между мнимой частью поляризуемости и сечением фотопоглощения $\sigma_{ph}(\omega)$ дается следующей формулой (оптической теоремой):

$$\text{Im}(\alpha(\omega)) = \frac{c}{4\pi\omega} \sigma_{ph}(\omega). \quad (5.15)$$

Заметим, что фотопоглощения на частотах $\omega < I$ связано с возбуждением атомных электронов в дискретном спектре, если же

$\omega > I$, то реализуется фотоионизация атома, и сечение фотопоглощения совпадает с сечением фотоионизации. Итак, с помощью оптической теоремы (5.15) можно найти мнимую часть поляризуемости, если известно сечение фотопоглощения. В свою очередь, зная мнимую часть поляризуемости во всем частотном диапазоне $\omega > 0$, можно вычислить действительную часть с помощью соотношения Крамерса–Кронига:

$$\operatorname{Re}(\alpha(\omega)) = \frac{1}{\pi} \text{V.P.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Im}(\alpha(\omega'))}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (5.16)$$

Выражение для мнимой части поляризуемости имеет вид

$$\operatorname{Im}(\alpha(\omega)) = \frac{1}{\pi} \text{V.P.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Re}(\alpha(\omega'))}{\omega - \omega'} d\omega'. \quad (5.17)$$

В соотношениях Крамерса–Кронига (5.16) — (5.17) введен символ интеграла в смысле главного значения, определяемый равенством

$$\text{V.P.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x - a} dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{a-\varepsilon} \frac{f(x)}{x - a} dx + \int_{a+\varepsilon}^{+\infty} \frac{f(x)}{x - a} dx \right\}. \quad (5.18)$$

Заметим, что соотношения (5.16) — (5.17) следуют из (5.10), если воспользоваться формулой Сохоцкого:

$$\frac{1}{x - i \cdot 0} = \text{V.P.} \frac{1}{x} + i\pi \delta(x). \quad (5.19)$$

Равенство (5.19) по существу является символической записью известной теоремы Коши о вычетах. При практическом использовании в формуле (5.16) удобно перейти к интегрированию по положительным частотам и представить главное значение интеграла в виде интеграла с «выколотой» точкой. Тогда имеем:

$$\operatorname{Re}(\alpha(\omega)) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega' \operatorname{Im}(\alpha(\omega')) - \omega \operatorname{Im}(\alpha(\omega))}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'. \quad (5.20)$$

При выводе (5.20) было учтено, что мнимая часть поляризуемости является нечетной функцией частоты. С помощью оптической теоремы (5.15) из формулы (5.20) получаем окончательно:

$$\operatorname{Re}(\alpha(\omega)) = \frac{c}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\sigma_{ph}(\omega') - \sigma_{ph}(\omega)}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'. \quad (5.21)$$

Равенство (5.21) дает выражение действительной части поляризуемости через сечение фотопоглощения. В частности, для статической поляризуемости имеем:

$$\alpha(0) = -\frac{c}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\sigma_{ph}(\omega)}{\omega^2} d\omega. \quad (5.22)$$

Из (5.21) можно получить правило сумм для сечения фотопоглощения, если перейти к пределу $\omega \rightarrow \infty$ и воспользоваться выражением (5.13) для высокочастотной поляризуемости:

$$\frac{c}{2\pi^2} \int_0^\infty \sigma_{ph}(\omega) d\omega = N; \quad \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \omega \operatorname{Im}\{\alpha(\omega)\} d\omega = N. \quad (5.23)$$

Второе равенство в (5.23) следует из первого с учетом оптической теоремы (5.15).

Для комплексной динамической поляризуемости свободного электрона ($\omega_0 = 0$) из (5.11) с помощью формулы Сохоцкого (5.19) можно получить следующее выражение:

$$\alpha_{free}(\omega) = -\frac{1}{\omega^2} + i\pi \frac{\delta(\omega)}{\omega}. \quad (5.24)$$

Как отмечалось, вышеприведенные формулы для поляризуемости справедливы для сферически-симметричного состояния атома. В общем случае тензор α_{ij} для атома, находящегося в состоянии $|nlm\rangle$, где n , l , m — главное, орбитальное и магнитное квантовые числа, может быть представлен в виде

$$\alpha_{ij} = \begin{bmatrix} \alpha_{nl}^s - \frac{1}{2} P_2 \alpha_{nl}^a & \frac{i}{2} P_1 \alpha_{nl}^a & 0 \\ -\frac{i}{2} P_1 \alpha_{nl}^a & \alpha_{nl}^s - \frac{1}{2} P_2 \alpha_{nl}^a & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{nl}^s + P_2 \alpha_{nl}^a \end{bmatrix}. \quad (5.25)$$

Здесь введены $\alpha_{nl}^s, \alpha_{nl}^a, \alpha_{nl}^t$ соответственно скалярная, антисимметричная и тензорная компоненты поляризуемости. Функции магнитного и орбитального квантовых чисел $P_{1,2}(m)$ равны:

$$P_1(m) = \frac{m}{l}; \quad P_2(m) = \frac{3m^2 - l(l+1)}{l(2l-1)}. \quad (5.26)$$

С использованием (5.25) можно записать сдвиг и расщепление магнитных подуровней состояния $|nlm\rangle$ в переменном электрическом поле $\mathbf{F}(t) = F \operatorname{Re}\{\mathbf{e} \exp(-i\omega t)\}$ вдали от резонанса в виде

$$\Delta E_{nlm} = -\frac{1}{4} F^2 [\alpha_{nl}^s(\omega) + P_2(m)\alpha_{nl}^t(\omega)] \quad (5.27)$$

— для линейной поляризации электрического поля и

$$\Delta E_{nlm} = -\frac{1}{4} F^2 \left[\alpha_{nl}^s(\omega) \pm P_1(m)\alpha_{nl}^a(\omega) - \frac{1}{2} P_2(m)\alpha_{nl}^t(\omega) \right] \quad (5.28)$$

— для правой (+) и левой (-) циркулярных поляризаций единичного вектора \mathbf{e} .

Компоненты тензора поляризуемости $\alpha_{nl}^s, \alpha_{nl}^a, \alpha_{nl}^t$ равны:

$$\alpha_{nl}^s(\omega) = \frac{1}{3(2l+1)} [l\sigma_{l-1}(\omega) + (l+1)\sigma_{l+1}(\omega)], \quad (5.29)$$

$$\alpha_{nl}^a(\omega) = \frac{1}{2l+1} [\sigma_{l-1}^-(\omega) - \sigma_{l+1}^-], \quad (5.30)$$

$$\alpha_{nl}^t(\omega) = -\frac{1}{3(2l+1)} \left[\sigma_{l-1}(\omega) + \frac{2l-1}{2l+3} \sigma_{l+1}(\omega) \right], \quad (5.31)$$

где

$$\sigma_{l'}(\omega) = \sum_{n'} \frac{f_{nl}^{n'l'}}{\omega_{n'n}^2 - \omega^2 - i0} \quad (5.32)$$

и

$$\sigma_{l'}^-(\omega) = \omega \sum_{n'} \frac{f_{nl}^{n'l'}}{\omega_{n'n}^2 (\omega_{n'n}^2 - \omega^2 - i0)} \quad (5.33)$$

представляют собой соответствующие спектральные суммы.

Таким образом, формулы (5.25) — (5.33) обобщают понятие динамической (дипольной) поляризуемости атома на общий случай состояния $|nlm\rangle$.

Выше шла речь о дипольной поляризуемости атома, описывающей отклик связанных электронов на пространственно-однородное внешнее электрическое поле. В случае, если характерный размер пространственной однородности поля меньше размера атома, дипольная поляризуемость должна быть заменена на обобщенную поляризуемость атома $\alpha(\omega, q)$, зависящую от переданного в результате взаимодействия импульса \mathbf{q} . Наиболее общее выражение для обобщенной поляризуемости многоэлектронного атома, когда удобно использовать электрон-дырочный формализм и понятие энергии Ферми, имеет вид:

$$\alpha(\omega, q) = \frac{i}{(\mathbf{e}\mathbf{q})} \sum_{\substack{E > E_F \\ j < E_F}} \left[\frac{\langle j | \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) | E \rangle \langle E | (\mathbf{e}\mathbf{D}) | j \rangle}{(E + I_j) - \omega - i0} + \frac{\langle j | (\mathbf{e}\mathbf{D}) | E \rangle \langle E | \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) | j \rangle}{(E + I_j) + \omega + i0} \right] \quad (5.34)$$

здесь E, j обозначают электрон и дырку соответственно, E_F — энергия Ферми, \mathbf{D} — оператор дипольного момента. С использованием $\alpha(\omega, q)$ формула (5.1) модифицируется к виду

$$\mathbf{D}(\omega) = \int \alpha(\omega, q) \mathbf{F}(\omega, \mathbf{q}) \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}, \quad (5.35)$$

где $\mathbf{F}(\omega, \mathbf{q})$ — пространственно-временной фурье-образ электрического поля. Для пространственно-однородного поля $\mathbf{F}(\omega, \mathbf{q}) = \mathbf{F}(\omega) \delta(\mathbf{q})$ равенство (5.35) (в случае сферически-симметричного атомного состояния) переходит в (5.1) с учетом того, что $\alpha(\omega) = \alpha(\omega, \mathbf{q} = 0)$.

5.3. Водородоподобное приближение

Для основного состояния водородоподобного атома общее выражение (5.10) для дипольной поляризуемости может быть представлено в замкнутой аналитической форме:

$$\alpha_{1s}(\omega) = -\frac{1}{\omega^2} \{1 - T(E_{1s} + \omega) - T(E_{1s} - \omega)\},$$

$$T(E) = \frac{2^7 \eta^5}{(2-\eta)(1+\eta)^8} {}_2F_1 \left[2 - \eta, 4.3; \left(\frac{1-\eta}{1+\eta} \right)^2 \right], \quad (5.36)$$

$$\eta = \frac{Z}{\sqrt{-2E}},$$

где Z — заряд ядра. ${}_2F_1(a, b, c, z)$ — гипергеометрическая функция, $E_{1s} = -Z^2/2$ — энергия основного состояния водородоподобного иона (в атомных единицах). Напомним, что гипергеометрическая функция ${}_2F_1(z)$ сходится в области $|z| < 1$, что имеет место для положительных значений параметра η . В противоположном случае необходимо пользоваться формулами аналитического продолжения гипергеометрических функций. Для значений параметра $\eta = 2, 3, \dots$, $T(E_{1s} + \omega)$ имеет полюсы, что соответствует резонансу между частотой внешнего поля ω и одной из собственных частот атома. Для больших частот $\omega \gg E_{1s}$ справедливо разложение правой части равенства (5.36) (ср. с формулой (5.13)):

$$\alpha_{1s}(\omega) \approx -\frac{1}{\omega^2} - \frac{4}{3\omega^4} + \frac{4\sqrt{2}}{3} \frac{1+i}{\omega^{9/2}} + O(\omega^{-5}). \quad (5.37)$$

Обобщенная динамическая поляризуемость $\alpha(\omega, q)$ водородоподобного атома в основном и в возбужденных состояниях также может быть представлена в замкнутом аналитическом виде. Соответствующие выражения, однако, весьма громоздки, и мы их здесь не приводим.

5.4. Динамическая поляризуемость отрицательных ионов

Динамическая поляризуемость отрицательных ионов определяется внешним слабосвязанным электроном, радиус орбиты которого существенно превышает размеры атома-остатка. В этом случае можно использовать приближение потенциала нулевого радиуса, в котором волновая функция основного состояния

внешнего электрона имеет вид $|0\rangle = \frac{B}{r} \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} e^{-\gamma r}$, где параметр

γ связан с энергией связи ϵ отрицательного иона, а коэффициент B определяется сравнением с асимптотическим поведением точной волновой функции. В рамках этого приближения можно получить следующее аналитическое выражение для поляризуемости отрицательного иона в двух частотных диапазонах $\omega > \epsilon$:

$$\alpha(\omega) = B^2 \left[-\frac{8\epsilon^2}{3\omega^4} - \frac{1}{\omega^2} + \frac{4(\omega + \epsilon)^{3/2}}{3\omega^4} \right] + i B^2 \frac{4(\omega - \epsilon)^{3/2} \sqrt{\epsilon}}{3\omega^4} \quad (5.38)$$

и $\omega < \epsilon$:

$$\alpha(\omega) = \alpha^{(+)}(\omega) + \alpha^{(-)}(\omega),$$

$$\alpha^{(\pm)}(\omega) = \frac{B^2}{12\omega^4 \epsilon} \left[16(\epsilon \pm \omega)^{3/2} \epsilon^{3/2} + 2\epsilon^3 - 9\epsilon^2(\epsilon \pm \omega) - 9(\epsilon \pm \omega)^2 \epsilon + (\epsilon \pm \omega)^3 \right] \quad (5.39)$$

Из формулы (5.38) видно, что в высокочастотном диапазоне динамическая поляризуемость $\alpha(\omega)$, как это и должно быть, имеет мнимую часть, связанную в соответствии с оптической теоремой (5.15) с возможностью фотоотрыва внешнего электрона от отрицательного иона. В низкочастотном диапазоне (5.39) динамическая поляризуемость является действительной величиной, обращающейся в бесконечность при $\omega \rightarrow 0$. Последнее обстоятельство отражает тот факт, что внешний электрон в отрицательном ионе обладает только одним связанным состоянием. Поэтому в выражении для поляризуемости отсутствуют резонансы, обу-

словленные совпадением частоты внешнего поля с собственными частотами иона, что имеет место в нейтральном атоме или положительном ионе (см., например, формулу (5.36)).

5.5. Статическая поляризуемость атомов и ионов

Статическая поляризуемость α_0 водородоподобного иона в основном 1s-состоянии равна:

$$\alpha_0 = \frac{9}{2} \frac{1}{Z^4}, \quad (5.40)$$

т.е. быстро уменьшается с ростом заряда ядра. Величина статической поляризуемости резко возрастает с ростом главного квантового числа. В случае многозарядных ионов ($N \ll Z$, N — число электронов в ионном остове, Z — заряд ядра иона) для статической поляризуемости может быть получено выражение

$$\alpha_0 = \frac{63}{16} \frac{N^3}{Z^4}. \quad (5.41)$$

Зависимость статической поляризуемости многозарядного иона от заряда ядра та же, что и для водородоподобного иона (5.40). Она следует из квантового рассмотрения для ионов с заполненными оболочками. В этом случае, если $Z \gg N$, минимальная частота виртуального перехода пропорциональна квадрату заряда ядра. Тогда из общего квантово-механического выражения для поляризуемости (5.10) следует вышеуказанная зависимость от Z . Для ионов с незаполненными электронными оболочками основной вклад в статическую поляризуемость дает виртуальный переход без изменения главного квантового числа. В этом случае $\alpha_0 \propto Z^{-3}$.

Для ионов с заполненной внешней оболочкой неплохое соответствие с экспериментом дает простая эмпирическая формула для статической дипольной поляризуемости внешней оболочки с главным квантовым числом n :

$$\alpha_0 = N_n \frac{n^6}{Z_n^4}, \quad (5.42)$$

где N_n и Z_n — число электронов во внешней электронной оболочке и эффективный заряд ядра соответственно. Последняя величина может быть определена как $Z_n = n\sqrt{2I_n}$, где I_n — потенциал ионизации внешней оболочки. Особенно хороший результат формула (5.42) дает для неоноподобных ионов ($n = 2, N_n = 8$). Это можно увидеть из Таблицы 5.1.

Т а б л и ц а 5.1

ион	Ca ⁺¹⁰	Ti ⁺¹²	Fe ⁺¹⁶	Co ⁺¹⁷	Ni ⁺¹⁸
I_n , эВ	558.2	737.8	1168	1293	1419
Z_n	12.8	14.73	18.54	19.5	20.43
α_0^{exper}	1.74(-2)	1.04(-2)	4.44(-3)	3.69(-3)	3.08(-3)
α_0	1.89(-2)	1.09(-2)	4.33(-3)	3.53(-3)	2.94(-3)

Здесь величина статической поляризуемости приведена в атомных единицах. Число в круглых скобках обозначает степень 10, на которую нужно умножить предыдущее значение.

5.6. Модель локальной плазменной частоты для поляризуемости многоэлектронных атомов и ионов

Локальная плазменная модель была предложена в середине шестидесятых годов Брандтом и Лундквистом для описания фотопоглощения многоэлектронными атомами в спектральном диапазоне $\omega \sim Z$ а.е. В этом случае в отличие от диапазона больших ($\omega \sim Z^2$ а.е.) и малых ($\omega \sim 1$ а.е.) частот поглощение фотона согласно вышеупомянутым авторам в большей степени опреде-

ляется коллективными эффектами, а не одночастичным взаимодействием. На основании этих качественных соображений электронный остов атома аппроксимируется неоднородным распределением заряда, взаимодействие которого с электромагнитным полем определяется условием плазменного резонанса:

$$\omega = \omega_p(r) = \sqrt{4\pi n(r)}, \quad (5.43)$$

где $n(r)$ — локальная электронная плотность и $\omega_p(r)$ — соответствующая ей локальная плазменная частота. Можно показать, что условию (5.43) соответствует следующее выражение для дипольной динамической поляризуемости, удовлетворяющее соотношениям Крамерса–Кронига (5.16) — (5.17) и правилу сумм (5.23):

$$\alpha^{BL}(\omega) = \int_0^{R_0} \frac{\omega_p^2(r) r^2 dr}{\omega_p^2(r) - \omega^2 - i0} = \int \alpha^{BL}(r, \omega) d\tau \quad (5.44)$$

здесь введена величина $\alpha^{BL}(r, \omega)$, которую естественно назвать пространственной плотностью поляризуемости в приближении Брандта–Лундквиста, R_0 — размер атома (иона).

Выражение (5.44) имеет правильную высокочастотную асимптотику (5.13), а в низкочастотном пределе оно дает:

$$\alpha^{BL}(\omega \rightarrow 0) \rightarrow R_0^3/3. \quad (5.45)$$

Несмотря на кажущуюся простоту, формула (5.45) в ряде случаев хорошо описывает имеющиеся экспериментальные данные. Это в первую очередь относится к многоэлектронным атомам с замкнутыми оболочками, поскольку тогда основной вклад в поляризуемость дает непрерывный энергетический спектр атома, и приближение локальной плазменной частоты (5.44) наиболее адекватно. Указанное обстоятельство демонстрируется таблицей 5.2, в которой приведены значения статической поляризуемости атомов и ионов с замкнутыми электронными оболочками, рассчитанные в рамках различных моделей, а также экспериментальные значения. При расчетах статической поляризуемости в модели Брандта–Лундквиста использовался радиус атома (иона), вычисленный с учетом корреляционной поправки в модели Томаса–Ферми–Дирака.

Т а б л и ц а 5.2

Атом (ион)	KrI	XeI	KII	RbII	CsII	SrIII	BaIII
$\alpha_0^{\text{экс}}$	17	27	7.5	12	16.3	6.6	11.4
$\alpha_0^{\text{вар}}$	26.8	30.9	9.1	14.3	17.8	8.7	11.4
$\alpha_0^{\text{УШ}}$	21.1	25.5	6.6	11.9	15.3	7.5	9.7
$\alpha_0^{\text{ПЗ}}$	17.2	27.3	5.25	8.5	14.6		
$\alpha_0^{\text{БЛ}}$	24	27	8.6	11.6	13.5	7	8.4

$\alpha_0^{\text{вар}}$ — расчет вариационным методом [1], $\alpha_0^{\text{УШ}}$ — расчет Уланцева и Шевелько [11], $\alpha_0^{\text{ПЗ}}$ — расчет Штотта и Зарембы [12] в рамках формализма электронной плотности, $\alpha_0^{\text{БЛ}} = R_0^3/3$ — расчет в модели Брандта-Лундквиста

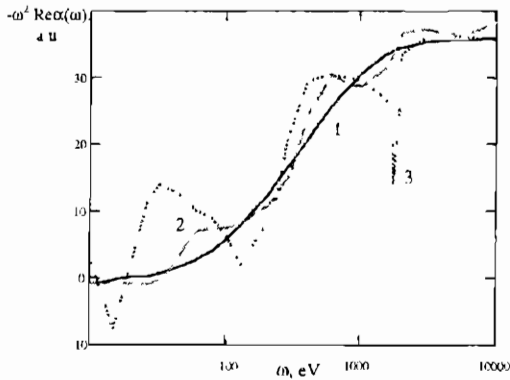
С использованием формулы (5.44) и статистической модели атома для динамической поляризуемости можно получить следующее выражение:

$$\alpha(\omega, Z) = r_{TF}^3 \beta\left(\frac{\omega}{Z}\right) = \frac{b^3 a_0^3}{Z} \beta\left(\frac{\omega}{Z}\right), \quad (5.46)$$

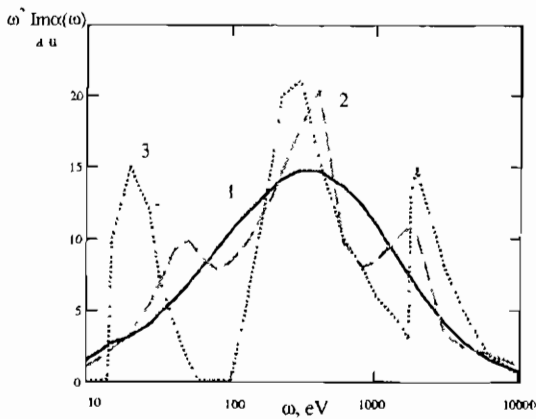
$$\beta(\nu) = \int_0^{x_0} \frac{4\pi f(x)x^2 dx}{4\pi f(x) - \nu^2 - i0},$$

где $r_{TF} = b a_0 / Z^{1/3}$ — радиус Томаса-Ферми, Z — заряд ядра атома, a_0 — боровский радиус, $b \cong 0.8853$, $\beta(\nu)$ — безразмерная поляризуемость как функция приведенной частоты $\nu = \omega/Z$, $x_0 = R_0/r_{TF}$ — приведенный радиус атома, $f(x)$ — универсальная функция, описывающая распределение электронной плотности $n(r)$ в атоме в соответствии с формулой $n(r) = Z^2 f(r/r_{TF})$.

Важно подчеркнуть, что безразмерная поляризуемость $\beta(\nu)$ не зависит от заряда ядра атома. Таким образом, представление динамической поляризуемости статистического атома (5.46) выявляет закон подобия (скейлинг) этой величины по параметру $\nu = \omega/Z$.



(a)



(б)

Рис. 5.1

Частотные зависимости реальной (а) и мнимой (б) частей поляризуемости атома криптона, вычисленные в различных приближениях: локальной плазменной частоты для электронной плотности Ленца-Йенсена (1), для слэтеровской электронной плотности (2), случайных фаз с обменом (3) [18]

Результаты расчета действительной и мнимой части дипольной динамической поляризуемости атома криптона в рамках метода локальной плазменной частоты по формуле (5.44) с ис-

пользованием электронной плотности по Слэтеру и Ленцу–Иенсену представлены на рис. 5.1. На этом же рисунке приведены результаты расчета соответствующих величин в приближении случайных фаз с обменом, выполненные в работе [18]. Видно, что динамическая поляризуемость атома криптона, рассчитанная в модели локальной плазменной частоты для электронной плотности Ленца–Иенсена, сглаженным образом передает кваantomеханические особенности частотного поведения динамической поляризуемости, наиболее ярко проявляющиеся вблизи потенциалов ионизации электронных подболочек. Применение слэтеровских волновых функций в рамках данной модели позволяет до некоторой степени уловить спектральные колебания поляризуемости вблизи потенциалов ионизации электронных подболочек. При этом, однако, нарушается универсальность описания, свойственная статистической модели атома.

Приведем высокочастотные асимптотики безразмерной поляризуемости, следующие из формулы (5.46) с учетом явного вида функции $f(x)$ для распределения электронной плотности Томаса–Ферми и Ленца–Иенсена. Для мнимой части $\beta(\nu)$ имеем:

$$\text{Im}\{\beta^{T-F}(\nu \rightarrow \infty)\} \rightarrow \frac{4.35}{\nu^4}, \quad (5.47a)$$

$$\text{Im}\{\beta^{L-J}(\nu \rightarrow \infty)\} \rightarrow \frac{4.615}{\nu^4}. \quad (5.47b)$$

Из формул (5.47) видно, что вышеуказанные статистические модели дают для мнимой части поляризуемости близкий результат. Высокочастотная асимптотика реальной части безразмерной поляризуемости $\beta(\nu)$ в обеих моделях электронной плотности атомного остова имеет вид

$$\text{Re}\{\beta(\nu \rightarrow \infty)\} \rightarrow -\frac{b^{-3}}{\nu^2}, \quad (5.48)$$

что находится в качественном соответствии с общей формулой (5.13). Из сравнения выражений (5.47) и (5.48), в частности, следует, что на больших частотах мнимая часть поляризуемости спадает существенно более быстро, чем ее действительная часть.

ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ ОПИСАНИЯ ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ

6.1. Общие соотношения

Для сечения фотопоглощения $\sigma(\omega)$ имеет место ряд общих соотношений, используемых, в частности, при построении различного рода приближенных моделей. Так, величину $\sigma(\omega)$ удобно выразить через спектральную функцию дипольных возбуждений $g(\omega)$ в соответствии с формулой ($\hbar = m = e = 1$):

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi^2}{c} g(\omega), \quad (6.1)$$

где c — скорость света. Удобство функции $g(\omega)$ заключается в том, что для нее выполняется правило сумм:

$$\int g(\omega) d\omega = N, \quad (6.2)$$

где N — полное число электронов в атоме. Кроме того, спектральная функция $g(\omega)$ удовлетворяет равенствам:

$$g(\omega) = \sum_n f_{in} \delta(\omega - \omega_n) = \frac{2}{\pi} \omega \operatorname{Im} \alpha(\omega), \quad (6.3)$$

где f_{in} — сила осциллятора перехода $i \rightarrow n$, ω_n — собственная частота этого перехода. В (6.3) первое равенство представляет собой определение спектральной функции, а второе следует из оптической теоремы (5.15).

Заметим, что, если речь идет о фотоионизации электронной подболочки nl с заданным главным и орбитальным квантовым числом, то выражения (6.1) — (6.3) следует относить к данной подболочке и снабдить соответствующими индексами: X_{nl} .

Вышеприведенные формулы (6.1) — (6.3) относятся не только к фотоионизации, но и к фотопоглощению, сопровождае-

тому электронными переходами в дискретном спектре. В случае собственно фотоэффекта суммирование в первом равенстве (6.3) заменяется интегрированием по состояниям непрерывного спектра, причем подынтегральное выражение представляет собой дифференциальную силу осциллятора для перехода в континуум $df/d\varepsilon$, где ε — энергия состояния континуума. Дифференциальная сила осциллятора выражается через матричный элемент от оператора дипольного момента перехода d_{ie} для переходов в континуум так же, как для переходов в дискретный спектр:

$$\frac{df}{d\varepsilon} = 2\varepsilon |d_{ie}|^2. \quad (6.4)$$

Имеет смысл ввести понятие плотности силы осциллятора и для переходов в дискретном спектре, если силу осциллятора такого перехода разделить на интервал энергии от данного уровня до ближайшего. Можно показать, что для введенной таким образом величины справедливо следующее предельное соотношение:

$$\lim_{n' \rightarrow \infty} \frac{2\pi^2}{c} \frac{f_{nl, n'l'}}{E_{n'+1l'} - E_{n'l'}} = \sigma_{nl, \ell'}(I_{nl}), \quad (6.5)$$

т.е. нормированная плотность силы осциллятора в пределе бесконечно больших главных квантовых чисел переходит в пороговое значение парциального (соответствующего данному значению орбитального квантового числа l') сечения фотоионизации электронной подболочки nl . Предельный переход (6.5) является демонстрацией гладкого сопряжения оптических характеристик дискретного и непрерывного спектра.

Наиболее общее выражение для сечения фотоионизации электронной подболочки в одноэлектронном приближении (т.е. в пренебрежении межэлектронными корреляциями) имеет вид

$$\sigma_{nl}(\omega) = \frac{4\pi^2 N_{nl}}{3\omega c (2l+1)} \left[|d_{nl, \ell+1}|^2 + |d_{nl, \ell-1}|^2 \right]. \quad (6.6)$$

Здесь введены матричные элементы оператора дипольного момента для переходов в состояния непрерывного спектра с орбитальными квантовыми числами, разрешенными правилами отбо-

ра. Эти матричные элементы следующим образом могут быть выражены через радиальные волновые функции исходного $P_{nl}(r)$ и конечного $P_{n'l'}$ состояний:

$$d_{nl, n'l'}^r = \omega \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^\infty P_{nl}(r) r P_{n'l'}(r) dr, \quad (6.7)$$

где введен 3j-символ $\begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$, возникающий в результате ин-

тегрирования по угловым переменным. Он описывает правила отбора для дипольного излучения, согласно которым $l' = l \pm 1$. Естественно, что в случае $l = 0$ имеется одно разрешенное значение квантового числа орбитального момента в конечном состоянии: $l' = 1$. Как правило, в сечение фотоионизации дает основной вклад переход с увеличением квантового числа орбитального момента $l \rightarrow l + 1$. Исключения из этого правила возникают, если по каким-либо специфическим причинам матричный элемент $d_{nl, n'l+1}$ мал или обращается в ноль. Однако в угловом распределении ионизированных электронов, которое мы здесь не рассматриваем, переход $l \rightarrow l - 1$ может играть важную роль.

6.2. Водородоподобное приближение

Как это было впервые показано Зоммерфельдом, полное (проинтегрированное по углу вылета электрона) сечение фотоионизации для основного 1s-состояния водородоподобного иона равно (в атомных единицах):

$$\sigma_{ph\ 1s}^{H-like}(\omega) = \frac{2^9 \pi^2}{3Z^2 c} \left(\frac{I_{1s}}{\omega} \right)^4 \frac{\exp(-4\zeta \operatorname{arccotg} \zeta)}{1 - \exp(-2\pi\zeta)}, \quad (6.8)$$

где ω — частота ионизирующего излучения, Z — заряд ядра, $I_{1s} = Z^2/2$ — потенциал ионизации 1s-состояния, $p = \sqrt{2(\omega - I_{1s})}$ — импульс ионизированного электрона, $\zeta = Z/p$ — борновский параметр.

Отметим, что фотоионизация представляет собой процесс первого порядка малости по константе электромагнитного взаимодействия ($e^2/\hbar c \cong 1/137$ — в обычных единицах), что выражается в наличии скорости света в первой степени в знаменателе формулы (6.8).

Вблизи порога фотоионизации, когда $p \rightarrow 0$, $\zeta \rightarrow \infty$, из (6.8) можно получить

$$\begin{aligned} \sigma_{1s}(\omega) &\approx \frac{2^9 \pi^2}{3 e^4 Z^2 c} \left(1 - \frac{8(\omega - I_{1s})}{3 I_{1s}} \right) \approx \\ &\approx \frac{0.23}{Z^2} \left(1 - \frac{8(\omega - I_{1s})}{3 I_{1s}} \right), \end{aligned} \quad (6.9)$$

где e — основание натурального логарифма. Из данной формулы следует, что сечение фотоионизации основного состояния водородоподобного иона падает на пороге обратно пропорционально квадрату заряда ядра. Такое поведение сечения имеет простую качественную интерпретацию: с ростом заряда ядра уменьшается радиус основного состояния водородоподобного иона $r_{1s} \propto Z^{-1}$, откуда (в предположении $\sigma_{1s} \propto r_{1s}^2$) и вытекает рассматриваемая пороговая зависимость сечения фотоионизации, которая также может быть представлена в виде: $\sigma_{1s}^{thres} \propto 1/I_{1s}$. Отсюда следует, что пороговое значение сечения фотоэффекта для ns-состояний (с другим главным квантовым числом n) может быть представлено в виде

$$\sigma_{ns}^{thres} = (I_{1s}/I_{ns}) \sigma_{1s}^{thres}. \quad (6.10)$$

Таким образом, пороговое значение сечения фотоионизации возрастает с ростом главного квантового числа. Любопытно, что данному соотношению с неплохой точностью удовлетворяют экспериментальные сечения даже в случае неводородоподобных атомов. Например, для атома аргона имеем $I_{1s} : I_{2s} : I_{3s} \approx 150 : 10 : 1$, в то время как отношение эксперимен-

тальных пороговых сечений для данных оболочек равно: 300 : 30 : 1.

В высокочастотном пределе $\omega \gg I_{1s}$ из (6.8) имеем

$$\sigma_{1s}(\omega) \approx \frac{2^8 \pi}{3} \frac{1}{Z^2 c} \left(\frac{I_{1s}}{\omega} \right)^{7/2} \left[1 - \pi \sqrt{\frac{I_{1s}}{\omega}} \right]. \quad (6.11)$$

Формула (6.11) дает известное асимптотическое убывание водородоподобного сечения фотоэффекта с ростом частоты $\omega^{-7/2}$ («закон минус семи вторых»). Этот закон может быть получен из выражения для мнимой части динамической поляризуемости водородоподобного иона (5.37) с помощью оптической теоремы (5.15). Имеет смысл подчеркнуть, что сечение фотоионизации (6.8) выходит на свое асимптотическое поведение (6.11) при весьма больших значениях частоты $\omega > 40 I_{1s}$, поскольку параметр разложения ($-2\pi\zeta$) экспоненты в (6.8) только на таких частотах становится заметно меньше единицы.

В случае фотоионизации nl -подоболочек (с $l \neq 0$) сечение фотоэффекта также монотонно убывает с ростом частоты, причем для $\omega \gg I_{nl}$ имеем

$$\sigma_{nl}(\omega) \propto 1/\omega^{l+7/2}, \quad (6.12)$$

то есть убывание сечения более быстрое.

Из (6.8) вытекают характеристические черты сечения фотоионизации водородоподобного иона, такие, как достижение максимума на пороге, монотонное убывание с ростом частоты. Эти характеристические черты при переходе к многоэлектронным атомам, вообще говоря, нарушаются. Тем не менее водородоподобная формула для сечения фотоионизации является исходным пунктом для построения приближенного способа описания процесса по порядку величины. Так, если принять высокочастотную зависимость (6.12), начиная от порога, и воспользо-

ваться правилом сумм $\frac{c}{2\pi^2} \int_{I_{nl}}^{\infty} \sigma_{nl}(\omega) d\omega = N_{nl}$, то можно полу-

чить следующее сечение фотоионизации в водородоподобном приближении:

$$\sigma_{nl}(\omega) = \frac{2\pi^2}{c} N_{nl} \left(\frac{5}{2} + l \right) \frac{I_{nl}^{5/2+l}}{\omega^{7/2+l}}. \quad (6.13)$$

Расчет сечения по (6.13) для одного 1s-электрона дает близи порога превышение в 3.2 раза над точным значением, а вдали от порога получается заниженное в 2.7 раза сечение. Следовательно, (6.13) определяет сечение процесса по порядку величины в водородоподобном приближении.

6.3. Модель локальной плазменной частоты

В предыдущем разделе сечение фотоионизации рассчитывалось в пренебрежении межэлектронным взаимодействием, т.е. предполагалось, что поглощение фотона происходит в результате взаимодействия электромагнитного поля с отдельными электронами, вклады которых аддитивно складываются, давая полное сечение. Существует весьма простой альтернативный подход к описанию атомного фотоэффекта, основанный на чисто классических соображениях. Это модель локальной плазменной частоты или приближение Брандта–Лундквиста [10]. В рамках данного подхода атом аппроксимируется неоднородным распределением электронной плотности $n(r)$, так что каждой пространственной точке соответствует своя локальная плазменная частота $\omega_p(r) = \sqrt{4\pi n(r)}$, а взаимодействие внешнего электромагнитного поля частоты ω с атомными электронами определяется условием плазменного резонанса (5.43). Таким образом, поглощение энергии электромагнитного поля атомными электронами происходит на тех расстояниях от ядра, где локальная плазменная частота совпадает с частотой ионизирующего излучения. Данная модель приводит к следующему простому выражению для спектральной функции:

$$g(\omega) = \int d^3r n(r) \delta(\omega - \omega_p(r)). \quad (6.14)$$

Легко видеть, что спектральная функция (6.14) удовлетворяет правилу сумм (6.2). Для сечения фотоионизации в рассматриваемом приближении согласно (6.1) имеем

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi^2}{c} \int d^3r n(r) \delta(\omega - \omega_p(r)). \quad (6.15)$$

Данное выражение может быть получено из формулы для динамической поляризуемости (5.44) с применением оптической теоремы (5.15) и формулы Сохоцкого (5.19). Наличие дельта-функции в равенстве (6.15) позволяет легко произвести интегрирование по пространственным переменным. В результате для сечения фотоионизации в приближении Брандта–Лундквиста находим

$$\sigma_{ph}^{B-L}(\omega) = \frac{4\pi^2 \omega}{c} r_\omega^2 \frac{n(r_\omega)}{|n'(r_\omega)|}, \quad (6.16)$$

здесь r_ω есть решение уравнения (5.43), эта величина соответствует расстоянию, на котором имеет место плазменный резонанс, т.е. равенство частоты внешнего электромагнитного поля ω локальной плазменной частоте $\omega_p(r)$, штрих обозначает дифференцирование по радиусу. Таким образом, в рамках рассматриваемой модели сечение фотоэффекта определяется только распределением электронной плотности $n(r)$. Для последней величины удобно использовать статистическую модель атома, в которой $n(r) = Z^2 f(x = r/r_{TF})$, где $f(x)$ — универсальная функция приведенного расстояния, Z — заряд ядра, $r_{TF} = b/Z^{1/3}$ — радиус Томаса–Ферми, $b \cong 0.8853$. Подставляя вышеуказанное выражение для электронной плотности в формулу (6.16), находим

$$\sigma_{ph}^{B-L}(\omega) = s \left(\nu = \frac{\omega}{Z} \right) = \frac{9\pi^4 \nu}{32c} x_\nu^2 \frac{f(x_\nu)}{|f'(x_\nu)|}, \quad (6.17)$$

здесь введена приведенная частота $\nu = \omega/Z$, x_ν — решение уравнения $\nu = \sqrt{4\pi f(x)}$, являющегося следствием равенства

(5.43). Как видно из (6.17), сечение фотоионизации в приближении Брандта–Лундквиста оказывается универсальной, т.е. не зависящей от заряда ядра, функцией приведенной частоты $s(\nu)$. Формула (6.17) выявляет соответствующий закон подобия (скейлинг) сечения по отношению к переменной ν (ср. с (5.46) — скейлингом для динамической поляризуемости атома). Универсальная функция $s(\nu)$ определяется типом статистической модели атома, т.е. зависимостью $f(x)$.

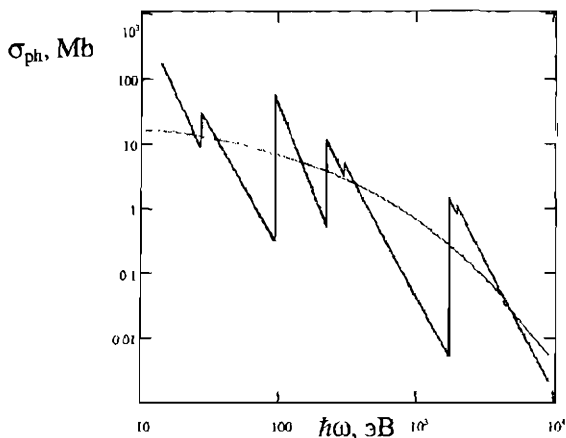


Рис. 6.1

Сечение фотоионизации атома криптона (в Mb): сплошная кривая — водородоподобное приближение (6.13); пунктир — локально-плазменная модель (6.17) с электронной плотностью по Томасу–Ферми

На рис. 6.1 представлены результаты вычисления сечения фотоионизации атома криптона, проведенные в рамках двух альтернативных подходов: квантовом водородоподобном приближении (6.13) — сплошная кривая и с помощью классической локально-плазменной модели (6.17) с электронной плотностью Томаса–Ферми — пунктир. Видно, что первая зависимость представляет собой зубчатую кривую со скачками на частотах, соответствующих потенциалам ионизации электронных подболочек,

причем величина скачка уменьшается с ростом потенциала ионизации подоболочки в соответствии с формулой (6.10). Сечение фотоионизации атома в локально-плазменной модели (для электронной плотности Томаса–Ферми) представляет собой гладкую монотонно убывающую кривую, сглаженным образом описывающую квантовые скачки водородоподобного приближения.

Основным достоинством рассматриваемого здесь приближения Брандта–Лундквиста является простота, наглядность и универсальность. Оно даст наилучшее описание процесса в спектральных интервалах вблизи порогов ионизации электронных подоболочек, как это видно и на рис. 6.1. В оригинальной работе Брандта и Лундквиста отмечалось, что локально-плазменная модель адекватна физике фотопоглощения электромагнитного поля атомом не во всем частотном диапазоне, а на частотах $\omega \approx Z R_y$ ($R_y = 13.6 \text{ eV}$), когда коллективные взаимодействия доминируют над одночастичными. Для таких частот расстояние до ядра, на котором выполняется условие плазменного резонанса (5.43) (в модели Томаса–Ферми), совпадает с радиусом Томаса–Ферми, т.е. равно расстоянию, где электронная плотность максимальна. Поэтому предположение о доминировании коллективных явлений в фотоэффекте на частотах $\omega \approx Z R_y$ представляется оправданным, по крайней мере, на качественном уровне.

Использование для нормированной функции электронной плотности $f(x = r/r_{TF})$ модели экспоненциальной экранировки:

$$f_{\text{exp}}(x) = \frac{128}{9\pi^3} e^{-2x} \quad (6.18)$$

позволяет получить простое аналитическое выражение для сечения фотоэффекта. Действительно, тогда трансцендентное уравнение (5.43) легко решается, и для сечения фотоионизации с помощью (6.17) имеем

$$\sigma_{ph}^{B-L(\text{exp})}(\omega = Z\nu) = \frac{9\pi^4}{64c} \nu \ln^2 \left(\frac{16\sqrt{2}}{3\pi\nu} \right), \quad (6.19)$$

$$\nu \leq \frac{16\sqrt{2}}{3\pi} \cong 2.4.$$

Характерной чертой сечения (6.19) является существование «частоты отсечки», что связано с ограниченностью радиальной электронной плотности вблизи ядра в модели (6.18), так что существует такая частота излучения, при которой условие плазменного резонанса не выполняется. Другой характерной чертой сечения фотоэффекта, вычисленного с функцией (6.18), является наличие ярко выраженного максимума при $\omega_{\text{max}}^{(\text{exp})} \cong 8.8 Z$ эВ.

6.4. Приближенные квантовые методы расчета сечений фотопоглощения

Наряду с рассмотренным в предыдущем разделе классическим методом учета межчастичных корреляций в фотопоглощении существуют приближенные квантовые методы, учитывающие многочастичные эффекты, в которых сечение фотоионизации рассчитывается с использованием несколько более упрощенных подходов по сравнению с последовательным квантово-механическим рассмотрением, таким, как приближение случайных фаз с обменом (ПСФО).

Один из таких методов основан на формализме функционала локальной электронной плотности. Упрощение расчета достигается за счет введения локального эффективного потенциала для определения одночастичных волновых функций основного состояния системы. С этой целью нелокальная обменно-корреляционная энергия рассчитывается в приближении локальной плотности согласно равенствам

$$V_{\infty}(r) = -\frac{0.611}{r_s(r)} - 0.0333 \ln \left(1 + \frac{11.4}{r_s(r)} \right), \quad (6.20)$$

$$\frac{4}{3} \pi r_s^3(r) = n^{-1}(r)$$

В результате решение соответствующих уравнений оказывается не более сложным, чем решение дифференциальных уравнений Хартри. Эффекты межэлектронного взаимодействия учитываются с помощью введения самосогласованного поля, представляющего собой сумму внешнего и индуцированного полей и являющегося решением соответствующего интегрального уравнения.

Результаты таких расчетов находятся в отличном соответствии с имеющимися экспериментальными данными. Кроме того, они свидетельствуют о важной роли многочастичных эффектов в фотоионизации атомов с замкнутыми электронными оболочками. Эти эффекты приводят (за исключением случая неона) к существенному сдвигу максимума сечения фотоионизации в область больших частот по сравнению с приближением независимых электронов, когда положение максимума практически совпадает с пороговой энергией фотона. Например, максимум сечения фотоионизации атома ксенона вблизи 4d порога сдвинут примерно на 2.5 Ry в сторону высоких частот. При этом отсутствует сильный резонанс, связанный (в рамках одночастичного рассмотрения) с переходом из 4d подоболочки в виртуальное f -состояние, расположенное в непрерывном спектре.

Интересно отметить, что рассматриваемый метод локальной электронной плотности предсказывает более низкое (на несколько электрон-вольт) значение порога фотоэффекта по сравнению с его наблюдаемой величиной. В то же время данный метод не описывает высоколежащие состояния дискретного спектра атома. Важно подчеркнуть, что при этом правило сумм для сечения фотопоглощения выполняется, поскольку «нефизический» вклад непрерывного спектра в сечение компенсируется неучтенным вкладом дискретного спектра, примыкающего к порогу фотоионизации. Данное обстоятельство в значительно более выраженном виде присутствует в вышеизложенных вариантах класси-

ческого описания атомного фотоэффекта. Как это видно из рис. 6.1, модель Томаса–Ферми для атомной электронной плотности дает сечение фотоионизации, сильно затянутое в область низких частот, хотя правило сумм для соответствующих сечений выполняется. В рамках статистических моделей дискретный энергетический спектр атома, естественно, вообще отсутствует, так что «нефизическая» область непрерывного спектра ниже порога фотоионизации в известной мере моделирует вклад неучтенных связанных состояний.

6.5. Гибридный метод Роста

В заключение данного раздела остановимся на простой модели атомного фотоэффекта, допускающей аналитическое представление сечения процесса, известной как гибридный метод Роста [17]. С формальной точки зрения данный подход базируется на приближенном операторном равенстве:

$$e^{-i(H_0+\Delta_1)t} e^{iH_0t} \approx e^{-i\Delta_1t}, \quad \Delta_1 = \frac{1}{r^2}, \quad (6.21)$$

откуда следует следующее выражение для сечения процесса:

$$\sigma_{ph}(\omega) \approx \frac{2\pi Z^2}{3c\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Psi | e^{-i\Delta_1 t'} | \Psi \rangle e^{i\omega t}. \quad (6.22)$$

Представление сечения (6.22) называется «гибридным» приближением, которое является квантово–механическим в силу общего операторного подхода и в то же время имеет классические черты, поскольку используется приближенная коммутация операторных экспонент (6.21).

Заметим, что формулу (6.22) можно переписать через электронную плотность, если сделать следующую замену:

$$|\Psi(r)|^2 \rightarrow 4\pi r^2 n(r). \quad (6.23)$$

Тогда после интегрирования по времени остающийся интеграл берется в силу наличия дельта-функции, и результат можно представить в виде

$$\sigma_{ph}(\omega) = \frac{8\pi^3 Z^2}{3c} \frac{1}{\omega^{7/2}} n\left(r = \frac{1}{\sqrt{\omega}}\right). \quad (6.24)$$

Из (6.24), в частности, следует водородоподобная высокочастотная асимптотика сечения фотоионизации, если $n(r \rightarrow 0) \rightarrow \text{const}$.

Таким образом, так же, как и в приближении Брандта–Луидквиста, сечение фотоэффекта в гибридном приближении Роста оказывается функционалом электронной плотности. Только в этом случае характерное расстояние излучательного процесса r_ω определяется не условием плазменного резонанса (5.43), а разностью атомных гамильтонианов H_1 с орбитальными квантовыми числами, отличающимися (в соответствии с дипольными правилами отбора) на единицу:

$$\omega = H_1(r) - H_0(r). \quad (6.25)$$

Уравнение (6.25) непосредственно вытекает из (6.21) с учетом закона сохранения энергии.

На основании (6.25) можно дать физическую интерпретацию приближения Роста. Из этого уравнения следует, что поглощение фотона происходит при фиксированной электронной координате, так же, как в приближении Борна–Оппенгеймера координаты ядер молекулы не изменяются в процессе электронного перехода. Отметим, что формула (6.21) является математическим выражением этого факта. Итак, гибридное приближение Роста можно рассматривать как обобщение адиабатического принципа на случай электронных переходов в атомах.

ВРАЩАТЕЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ КРАМЕРСОВСКОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ

7.1. Вращательное приближение в теории статического тормозного излучения и рекомбинации

Для характерных значений параметров электронов и ионов в плазме (тепловой скорости электронов v_{Te} и среднего заряда иона Z_i) величина борновского отношения $\eta = Z_i/v_{Te}$ больше или порядка единицы ($\hbar = e = m = 1$):

$$\eta = Z_i/v_{Te} \geq 1. \quad (7.1)$$

Условие (7.1) является известным критерием использования квазиклассического приближения для описания движения электрона в кулоновском поле в одномерном случае. Более общим критерием квазиклассичности является неравенство [7]:

$$p^{-2} \operatorname{div} \mathbf{p}(\mathbf{r}) \ll 1, \quad (7.2)$$

где $\mathbf{p}(\mathbf{r})$ — полный импульс электрона (а не только его радиальная составляющая). Условие (7.2) применимо для всех видов потенциалов, в которых движется электрон. Таким образом, при описании тормозного излучения и рекомбинации электронов в плазме с достаточно тяжелыми элементами $Z \geq 20$ можно использовать квазиклассическое приближение по движению излучающего электрона. В соответствии с классической теорией дипольного излучения для эффективного излучения электрона, рассеивающегося (с прицельным параметром ρ) на силовом центре, справедливо следующее выражение:

$$\frac{d\kappa}{d\omega} = \int_0^{\infty} \Delta E(\omega, \rho) d\rho, \quad (7.3)$$

где

$$\Delta E(\omega, \rho) = \frac{8\pi}{3c^3} |\dot{\mathbf{d}}(\omega, \rho)|^2 \quad (7.4)$$

— энергия, излучаемая электроном в единичный частотный интервал на частоте ω , $\dot{\mathbf{d}}(\omega, \rho)$ — временной фурье-образ второй производной по времени от дипольного момента, рассеивающегося электрона с заданным прицельным параметром, c — скорость света. Для полного эффективного излучения K имеем:

$$K = \int_0^\infty dK(\omega) = \int_0^\infty \Delta E(\rho) 2\pi \rho d\rho, \quad (7.5)$$

где $\Delta E(\rho)$ — проинтегрированная по всем частотам энергия электромагнитного поля, излучаемого электроном с заданным прицельным параметром. Для $\Delta E(\rho)$ при рассеянии НЧ в центральном поле справедливо следующее выражение:

$$\Delta E(\rho) = \frac{2}{3c^3} \int_{-\infty}^\infty [w(\rho, t)]^2 dt = \frac{4}{3c^3} \int_{r_0(\rho)}^\infty \left(\frac{\partial U}{\partial r} \right)^2 \frac{dr}{v_r(r, \rho, E)}, \quad (7.6)$$

где $w(\rho, t) = -\partial U / \partial r$ — ускорение электрона в центральном поле с потенциальной энергией $U(r)$, $v_r(r, \rho, E) = \sqrt{2[E - U(r) - (\rho/r)^2]}$ — радиальная компонента скорости электрона с начальной энергией E , $r_0(\rho)$ — классическая точка поворота, определяемая уравнением

$$\frac{U(r)}{E} + \frac{\rho^2}{r^2} = 1. \quad (7.7)$$

При переходе ко второму равенству в (7.6) была произведена замена переменной интегрирования $t \rightarrow r$. Подставляя (7.6) в (7.5) и меняя порядок интегрирования, находим для полного эффективного излучения по статическому каналу:

$$K^{\text{ст}}(E) = \frac{8\pi}{3c^3} \sqrt{2E} \int_{r_1}^\infty \left(\frac{\partial U}{\partial r} \right)^2 dr \int_{\rho_1}^{\rho_0(r)} \frac{\rho d\rho}{\sqrt{1 - U(r)/E - \rho^2/r^2}}, \quad (7.8)$$

где $\rho = \rho_0(r) = r \sqrt{1 - U(r)/E}$ — функция, обратная к $r_0(\rho)$.

Производя в (7.8) интегрирование по прицельному параметру, получаем окончательно:

$$\kappa^{st}(E) = \frac{8\pi}{3c^3 \sqrt{2E}} \int_0^\infty \left(\frac{\partial U}{\partial r} \right)^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E}} r^2 dr. \quad (7.9)$$

Интеграл в (7.9) при подстановке в него атомного потенциала, имеющего кулоновскую асимптотику $U(r \rightarrow 0) \rightarrow -Z/r$, расходится на нижнем пределе как $\int_0 r^{-5/2} dr$. Данная расходимость

отражает собой известную трудность классической электродинамики, для преодоления которой необходимо ввести из физических соображений «обрезание» соответствующего интеграла на нижнем пределе.

Выражение (7.9) является исходным для построения вращательного приближения (ВП) в теории статического ТИ и рекомбинации, справедливого в *кramerсовской области частот* [7]. Эта область определяется неравенством

$$\omega > \bar{\omega} \equiv \frac{\sqrt{2E}}{a}, \quad |U(a)| = E, \quad (7.10)$$

где введено характерное расстояние a , которое в случае кулоновского поля равно кулоновской длине рассеяния $a = a_C = Z/E$, тогда характерная частота $\bar{\omega}$ совпадает с кулоновской частотой ω_C : $\bar{\omega} = \omega_C = (\sqrt{2E})^3 / Z$.

Физически неравенству (7.10) соответствуют сильно искривленные траектории движения НЧ. Теория электромагнитных процессов в условиях справедливости (7.10) получила название *кramerсовской электродинамики* [7]. Излучение в высокочастотном (кramerсовском) диапазоне $\omega \gg \bar{\omega}$ происходит в локализованной области радиального движения рассеивающегося электрона вблизи классической точки поворота, там, где максимально его ускорение. Угловая скорость вращения в этой точке равна:

$$\omega_{rot}(r) = \frac{v(r)}{r} = \frac{\sqrt{2(E + |U(r)|)}}{r}. \quad (7.11)$$

Поскольку при заданном рассеянии заряженной частицы в спектре ее излучения представлены частоты, присутствующие в фурье-разложении ее траектории, а радиальная область испускания частот $\omega \gg \bar{\omega}$ локализована, то можно записать следующее равенство (вращательное приближение (ВП)):

$$\omega = \omega_{rot}(r), \quad \omega \gg \bar{\omega}. \quad (7.12)$$

С учетом (7.12) для спектрального эффективного излучения по статическому каналу во вращательном приближении имеем:

$$\left(\frac{dK}{d\omega} \right)_{st}^{rot} = \frac{8\pi A}{3c^3 \sqrt{2E_0}} \int_0^{\infty} (f_{st}(r))^2 \sqrt{1 + \frac{|U(r)|}{E}} \delta(\omega - \omega_{rot}(r)) r^2 dr, \quad (7.13)$$

где A — нормировочный множитель, зависящий от вида атомного потенциала, $f_{st}(r)$ — обычная «статическая» сила, действующая на налетающий электрон со стороны мишени, равная

$$f_{st}(r) = -dU/dr = Z_{ef}(r)/r^2, \quad (7.14)$$

где $Z_{ef}(r)$ — эффективный заряд атома на расстоянии r от ядра.

Более строгий анализ показывает, что для кулоновского и томас-фермиевского потенциалов $A = \sqrt{3}$. Из (7.13) вытекает, что в рамках ВП излучение определяется расстоянием до ядра $r_{ef}(\omega, E)$, которое является решением уравнения

$$2(E + |U(r)|) = \omega^2 r^2. \quad (7.15)$$

Сравнение результатов расчетов по формулам (7.13) — (7.14) с результатами численных квантово-механических вычислений, проведенных для атомных потенциалов, а также с экспериментальными данными показывает высокую точность вращательного приближения. Так, например, в случае кулоновского поля точность ВП даже для сравнительно низких частот $\omega = \omega_C/2$ составляет 5%.

Для томас–фермиевского потенциала $U = -Z \chi(r/r_{TF})/r$ ($\chi(x)$ — функция Томаса–Ферми) ВП дает универсальное описание спектра статического ТИ на многоэлектронном атоме в следующем виде:

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{st}^{rot} = \frac{8\sqrt{3}\pi Z^{2/3} b^{5/2} \nu}{3c^3 \sqrt{2}t} \left\{ \frac{x^4 \left[(\chi/x)' \right]^2 \sqrt{1 + \chi/(xt)}}{b^3 x\nu^2 + \left| (\chi/x)' \right|} \right\}_{x=x_{ef}(\nu, t)}, \quad (7.16)$$

где $b = 0.8853$, $\nu = \omega/Z$ — приведенная частота и $t = bE/Z^{4/3}$ — приведенная начальная энергия электрона, $x_{ef}(\nu, t)$ — нормированное на радиус Томаса–Ферми решение уравнения (7.15), выраженного через параметры ν , t . Точность универсальной (единой для всех зарядов ядра) зависимости (7.16) на границе применимости ВП $\omega = \bar{\omega}$ составляет 10–20%.

Вращательное приближение (7.11) — (7.12) может быть переписано через момент количества движения электрона M , являющийся интегралом движения:

$$\omega = \omega_{rot}(r) = \frac{M}{r^2} \quad (7.17)$$

В крамерсовском пределе $\omega \gg \bar{\omega}$ имеем $|U| \gg E$, откуда с учетом (7.17) следует, что ω_{rot} зависит только от M , но не от начальной энергии E . Важно подчеркнуть, что условие квазиклассичности спектра излучения в рамках применимости крамерсовской электродинамики (7.10) определяется не общепринятым условием $\omega < E$, а существенно более слабым неравенством:

$$\omega < E_{kin}(r_{ef}) \approx |U(r_{ef})| \gg E. \quad (7.18)$$

Таким образом, можно констатировать, что формула вращательного приближения (7.13) описывает (в условиях своей применимости) не только тормозное, но и фоторекомбинационное излучение по статическому каналу. Фоторекомбинация имеет место при рассеянии электронов на ионах для частот $\omega > E$.

Развитый выше подход позволяет выразить полное сечение фоторекомбинации квазиклассического электрона с начальной энергией E (просуммированное по всем возможным частотам излучения) через спектральное эффективное излучение в соответствии с равенством:

$$\sigma_r(E) = \int_E^{E+I(Z_i-1)} \frac{d\kappa}{d\omega} \frac{d\omega}{\omega}, \quad (7.19)$$

где $I(Z_i - 1)$ — потенциал ионизации иона (атома), возникающего после рекомбинации электрона на исходном ионе с зарядом Z_i .

В случае ТИ на нейтральном атоме нетрудно обобщить спектральное сечение во вращательном приближении (7.16), справедливое в спектральном интервале $\omega \geq \tilde{\omega}$, на низкочастотный диапазон $0 < \omega < \tilde{\omega}$. Для этого перепишем выражение (7.16) через гаунт-фактор $G(\omega, E)$ — множитель, равный отношению данного эффективного излучения $(d\kappa/d\omega)$ (или соответствующего сечения) и его кramerсовского аналога $(d\kappa/d\omega)^{Kr}$:

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega} \right)_{st}^{rot} = \left(\frac{d\kappa}{d\omega} \right)^{Kr} g^{rot}(v, t), \quad (7.20)$$

где

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega} \right)^{Kr} = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2}{E c^3}. \quad (7.22)$$

«Вращательный» фактор Гаунта $g^{rot}(v, t)$ является универсальной функцией (единой для всех зарядов ядра) и зависит только от приведенных переменных v и t . Выражение для $g^{rot}(v, t)$ следует из сравнения формулы (7.16) и равенств (7.20) — (7.22).

Для описания «невращательной» части спектра $0 < \omega < \tilde{\omega}$ статического тормозного излучения на нейтральном атоме достаточно произвести линейную интерполяцию между функцией $g_1(t) \equiv g^{rot}(3t, t)$ и значением классического фактора

Гаунта при нулевой частоте, определяющим функцию $g_0(t) = g(0, t)$ (транспортный предел). Таким образом, для эффективного статического излучения квазиклассического электрона на атоме Томаса–Ферми во всем частотном диапазоне имеем следующее выражение [7]:

$$\left(\frac{dK}{d\omega}\right)_{st} = \left(\frac{dK}{d\omega}\right)^{Kr} \left\{ g_1(t) + \frac{v}{3t} [g_1(t) - g_0(t)] \right\}. \quad (7.22)$$

Универсальные функции $g_0(t)$ и $g_1(t)$, входящие в формулу (7.22), протабулированы.

7.2. Обобщение вращательного приближения на случай поляризационного канала

Простейший вариант вращательного приближения в теории поляризационного тормозного излучения (ПТИ) состоит в замене в формуле (7.13) «статической» силы на «поляризационную». Поляризационная сила, зависящая от частоты, дается выражением

$$f_{pol}(r, \omega) = -\frac{N_{pol}(r, \omega)}{r^2}, \quad (7.23)$$

где $N_{pol}(r, \omega)$ — эффективный заряд электронного остова мишени, обуславливающий излучение на частоте ω по поляризационному каналу. В модели локальной электронной плотности (см. подробности в главе 5) он может быть представлен в виде

$$N_{pol}(r, \omega) = \omega^2 \left| \int_0^r \beta(r', \omega) 4\pi r'^2 dr' \right|. \quad (7.24)$$

Здесь $\beta(r, \omega)$ — пространственная плотность динамической поляризуемости мишени, для которой мы в дальнейшем будем использовать приближение Брандта–Лундквиста:

$$\beta(r, \omega) = \frac{n(r)}{4\pi n(r) - \omega^2 - i0}, \quad (7.25)$$

где $n(r)$ — локальная электронная плотность атомного остова. Равенство (7.25) следует из выражения (5.44) для динамической поляризуемости. Наличие текущего радиуса (расстояния до ядра) в верхнем пределе интегрирования формулы (7.24) описывает проникновение налетающего электрона в остов мишени и связанные с этим эффекты.

Подставляя «поляризационную» силу (7.23) в (7.13) вместо обычной «статической» силы, получаем для спектральных потерь энергии на излучение по поляризационному каналу в рамках ВП следующее выражение:

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{pol}^{rot} = \frac{8\pi A}{3c^3 \sqrt{2E_0}} \int_0^{\infty} (N_{pol}(r, \omega))^2 \sqrt{1 + \frac{|U(r)|}{E}} \delta(\omega - \omega_{rot}(r)) r^{-2} dr \quad (7.26)$$

Для количественной характеристики относительного вклада поляризационного канала в излучение определим спектральной R -фактор во вращательном приближении согласно формуле

$$R^{(rot)}(\omega, T) = \left\{ \frac{d\kappa_{pol}(\omega, E)}{d\kappa_a(\omega, E)} \right\}^{(rot)} = \left[\frac{N_{pol}(r, \omega)}{Z_{ef}(r)} \right]_{r=r_q(\omega, E)}^2 \quad (7.27)$$

Второе равенство в (7.27) следует из выражений (7.13), (7.26), проинтегрированных с учетом дельта-функции. Оно имеет прозрачный физический смысл: относительный вклад поляризационного канала в излучение на заданной частоте определяется квадратом отношения поляризационного заряда электронного остова мишени (7.24) к эффективному заряду мишени в целом $Z_{ef}(r)$.

Эффективный заряд мишени определяется равенством (7.24). Указанные заряды при вычислении R -фактора берутся на характерном для вращательного приближения радиусе излучения, который является решением уравнения (7.15).

7.3. Поляризационный заряд в рамках статистической модели атома и вращательного приближения

Как видно из выражений (7.26), (7.27), ключевой величиной, определяющей в рассматриваемом приближении излучение по поляризационному каналу, является поляризационный заряд

$N_{pol}(r, \omega)$, на свойствах которого мы остановимся в данном разделе. Сначала отметим общие соотношения для поляризованного заряда в приближении локальной электронной плотности, вытекающие из формул (7.24) — (7.25). Легко видеть, что N_{pol} удовлетворяет правильной высокочастотной асимптотике, (следующей также и из квантово-механического выражения для поляризуемости):

$$N_{pol}^{\infty}(r) = N_{pol}(r, \omega \rightarrow \infty) = N_e(r) = \int_0^r 4\pi n(r) r^2 dr, \quad (7.28)$$

где $N_e(r)$ — число атомных электронов в сфере радиуса r . Естественно, что для $r > R_0$ (R_0 — радиус атома) величина $N_e(r)$ равна полному числу электронов в остове мишени N .

В противоположном, низкочастотном пределе из (7.24) — (7.25) имеем

$$N_{pol}^{(0)}(r, \omega) = \omega^2 \left[\theta(r - R_0) \frac{R_0^3}{3} + \theta(R_0 - r) \frac{r^3}{3} \right]. \quad (7.29)$$

Подставляя в определение поляризованного заряда (7.24) — (7.25) выражение для электронной плотности остова вида $n(r) = Z^2 f(x = r/r_{TF})$, получаем в модели Томаса-Ферми

$$(f_{TF}(x) = \frac{1}{4\pi b^3} \left(\frac{\chi(x)}{x} \right)^{3/2}, \quad \chi(x) \text{ — функция Томаса-Ферми})$$

следующее представление для поляризованного заряда:

$$N_{pol}(r, \omega, Z) = Z g \left(\frac{r}{r_{TF}}, \frac{\omega}{Z} \right). \quad (7.30)$$

здесь введена универсальная функция $g(x, \nu)$:

$$g(x, \nu) = \nu^2 \int_0^x \frac{\chi^{3/2}(x') \sqrt{x'}}{b^{-3} (\chi(x')/x')^{3/2} - \nu^2 - i0} dx'. \quad (7.31)$$

Эта величина представляет собой нормированный на полное число атомных электронов поляризованный заряд как функцию

безразмерного расстояния $x = r/r_{TF}$ и приведенной частоты $\nu = \omega/Z$. Формулы (7.30) — (7.31) дают универсальное представление поляризационного заряда в модели Томаса–Ферми.

Нас в дальнейшем будет интересовать поляризационный заряд, рассчитанный в рамках вращательного приближения — $N_{pol}^{(rot)}(\omega, E)$, поскольку он учитывает эффекты проникновения налетающей частицы в остов мишени, существенные для квазиклассических электронов. Соответствующее выражение можно получить с помощью формулы (7.24) и равенства:

$$N_{pol}^{(rot)}(\omega, E) = N_{pol}(r_{ef}(\omega, E), \omega), \quad (7.32)$$

здесь $r_{ef}(\omega, E)$ представляет собой решение уравнения (7.15).

Отсюда для нормированного поляризационного заряда во вращательном приближении имеем

$$g^{(rot)}(\nu, t) = g(x_{ef}(\nu, t), \nu), \quad (7.33)$$

где $t = bE/Z^{4/3}$ — приведенная энергия; $x_{ef}(\nu, t)$ — решение уравнения (7.15), переписанного через параметры ν и t .

7.4. Спектральные потери энергии квазиклассических электронов при рассеянии на атоме Томаса–Ферми

С помощью формул (7.26), (7.30) можно получить в рамках ВП следующее выражение для эффективного излучения электрона на атоме Томаса–Ферми по поляризационному каналу:

$$\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_{pol}^{rot} = \frac{8\sqrt{3}\pi Z^{2/3} b^{5/2} \nu}{3c^3 \sqrt{2t}} \left[\frac{g(x, \nu)^2 \sqrt{1 + \chi/(xt)}}{b^3 x \nu^2 + |\chi/x|} \right]_{x=x_{ef}(\nu, t)}, \quad (7.34)$$

здесь функция $g(x, \nu)$ определена равенством (7.31).

Формула (7.34) вместе с (7.16) универсальным образом (едином для всех зарядов ядра) описывает спектральные потери энергии электронов при рассеянии на томас–фермиевском атоме в высокочастотном диапазоне $\omega \geq \tilde{\omega}$ с учетом двух возможных каналов излучения. Обобщение этой величины на «невращательный» ин-

тервал частот $0 < \omega < \omega$ для статического канала дается формулой (7.22). Анализ показывает, что для поляризационного канала нет необходимости в процедуре интерполяции $(dk/d\omega)$ в область малых частот, подобной (7.22). Чтобы удостовериться в этом, приведем выражение для спектральных потерь энергии по поляризационному каналу, полученное в приближении Борна–Бете:

$$\left(\frac{dk}{d\omega}\right)_{pol}^{B-B} = \frac{8}{3c^3} \frac{Z^{2/3}}{t} |g_{dip}(v)|^2 \ln\left(\frac{1}{v} \sqrt{\frac{2t}{b^3}}\right), \quad t > \frac{1}{8bZ^{2/3}}, \quad (7.35)$$

где $g_{dip}(v) = g(x \rightarrow \infty, v)$ — нормированный поляризационный заряд (7.31) в дипольном приближении. Из (7.35) следует, что в приближении Борна–Бете в противоположность ВП имеется ограничение на частоту сверху: $v < 1.7 \sqrt{t}$.

На рис. 7.1 представлены зависимости эффективного излучения электрона на атоме Томаса–Ферми от приведенной частоты по поляризационному и статическому каналам для двух значений начальной энергии НЧ, рассчитанные в рамках различных приближений. Кривые «1» и «3» описывают поляризационный канал, рассчитанный в рамках вращательного приближения и приближения Борна–Бете (7.35) соответственно. При расчете зависимости «2», относящейся к статическому каналу, использовалась формула (7.22).

Из рис. 7.1 следует, что вращательное приближение в диапазоне $v < t$ дает для поляризационного излучения результат, практически совпадающий с результатом использования приближения Борна–Бете. Заметим, что неравенство $v < t$ может быть переписано в виде: $\omega < bE/Z^{1/3}$. Следовательно, для больших Z оно соответствует условиям применимости низкочастотного приближения в теории ТИ. В этом случае рассеивающийся на нейтральном атоме электрон слабо возмущается излучательным процессом, и его движение при расчете ПТИ можно считать равномерным и прямолинейным даже для медленных электронов. Этим оправдывается адекватность использования приближения

Борна–Бете для поляризационного канала в низкочастотном диапазоне. Таким образом, в силу хорошего сопряжения кривых «1»

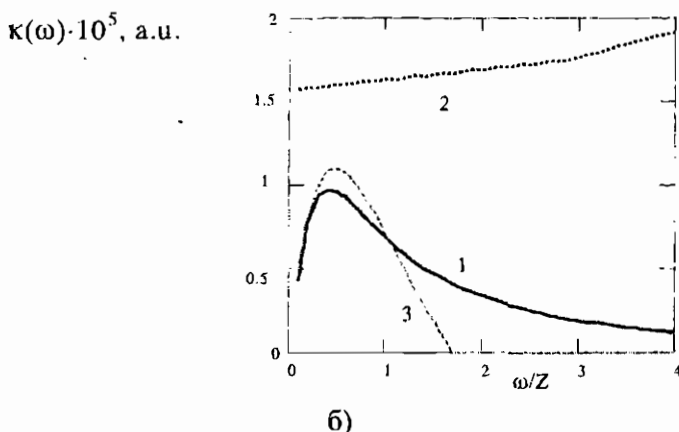
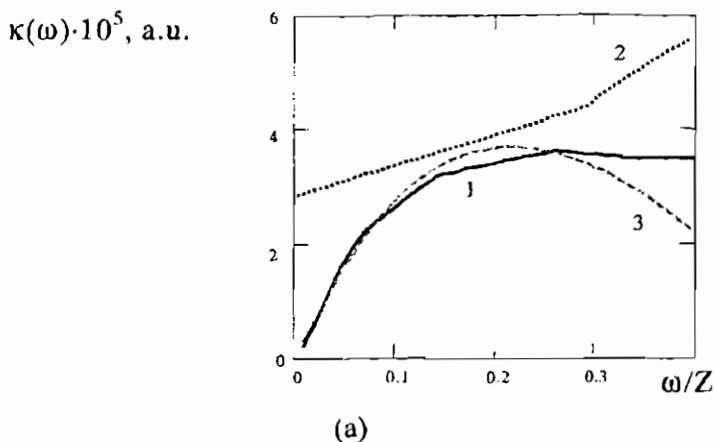
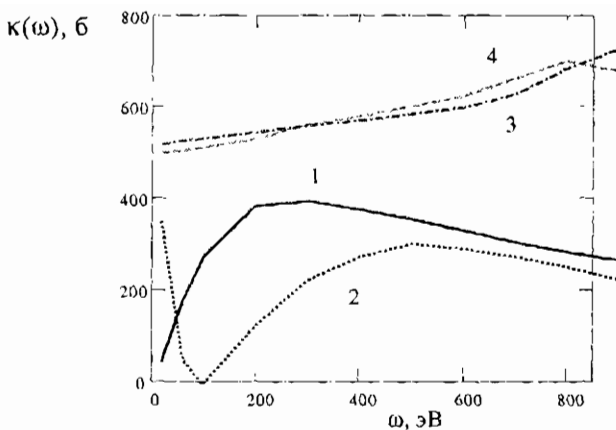


Рис. 7.1

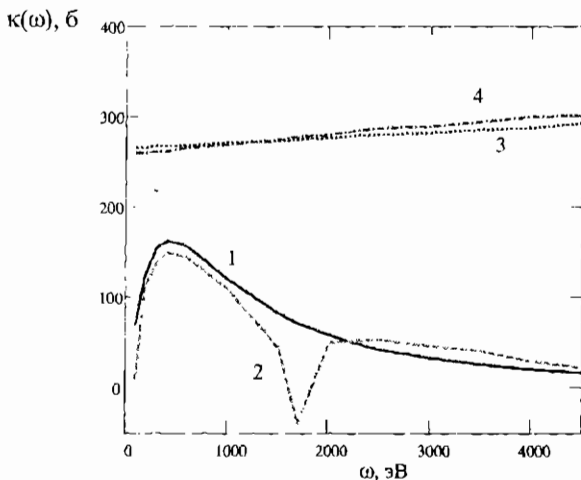
Зависимость спектрального эффективного излучения электрона на атоме Томаса–Ферми ($Z = 90$) от приведенной частоты $\nu = \omega/Z$ для различных значений приведенной энергии налетающего электрона (а) $t = 0.1$; (б) $t = 1$. 1 — по поляризационному каналу (во вращательном приближении), 2 — по статическому каналу; 3 — по поляризационному каналу (в приближении Борна–Бете)

и «3» вращательное приближение мы будем применять для расчета поляризационного излучения во всей рассматриваемой спектральной области. Уменьшение $(dk/d\omega)_{pol}^{rot}$ с ростом частоты, изображенное на рис. 7.1, является следствием эффектов проникновения НЧ в остов мишени, оно, однако, не столь резкое, как это следует из расчета в приближении Борна–Бете. Первоначальный рост $(dk/d\omega)_{pol}$ с частотой, хорошо известный из теории ПТИ, обусловлен фактором ν^2 , входящим в определение поляризационного заряда (7.31). Таким образом, спектральная зависимость интенсивности ПТИ обладает максимумом, центральная частота которого смещается в область высоких частот с ростом начальной энергии НЧ. Из рис. 7.1 также следует, что в рассматриваемом диапазоне изменения параметров вклад поляризационного канала порядка и меньше вклада статического, причем разница возрастает с ростом энергии НЧ.

На рис. 7.2 представлено спектральное эффективное излучение по статическому и поляризационному каналам электронов с энергией 1 кэВ и 5 кэВ, рассеивающихся на атоме криптона, рассчитанное в рамках ВП (кривые «1», «3») и последовательными квантово-механическими методами [18] (кривые «2», «4»). Расчет зависимостей для статического канала проводился нами с помощью формулы (7.22). Отметим, что расчет статического ТИ был осуществлен в рамках приближения искаженных плоских волн методом суммирования парциальных вкладов различных угловых моментов с использованием точного потенциала атома криптона. Видно, результаты обоих подходов для статического канала очень близки. Небольшое различие кривых «3» и «4» в высокочастотной области связано с определенным произволом



(а)



(б)

Рис. 7.2

Спектральная интенсивность тормозного излучения электрона с энергиями 1 кэВ (а) и 5 кэВ (б) на атоме криптона по различным каналам: 1 — поляризационный канал (расчет в рамках ВП); 2 — поляризационный канал с учетом вклада интерференции (расчет в ПСФО); 3 — вклад статического канала (по формуле (7.22)); 4 — вклад статического канала (расчет в приближении искаженных плоских волн)

выбора верхней частотной границы линейной интерполяции. Для поляризационного канала результат использования ВП, естественно, более сильно отличается от точного квантово-механического результата, полученного в приближении случайных фаз с обменом, которое учитывает не только индивидуальные квантово-механические особенности движения атомных электронов, но и межчастичные корреляционные эффекты. Это различие наиболее существенно вблизи потенциалов ионизации электронных подболочек, где реальная и мнимая части атомной поляризуемости обладают резонансными структурами. Для электронов с энергией 1 кэВ широкий провал в спектральной зависимости интенсивности ПТИ связан с ионизацией 3d подболочки атома криптона. В случае 5 кэВ-х электронов изображенный на рис. 7.2(б) провал на кривой «2» обусловлен ионизацией 2p подболочки. Его относительная ширина заметно меньше, поэтому в соответствии с результатами используемого подхода с последовательным квантово-механическим расчетом лучше. В целом рис. 7.2 демонстрирует разумную точность используемого метода для расчета ПТИ на многоэлектронном атоме.

Заключение

Использование вышеизложенных методов в теории взаимодействия фотонов и электронов с атомами позволяет не только существенно упростить расчет соответствующих сечений, но и сделать более прозрачной физическую картину процесса. Предлагаемое упрощенное описание, как правило, отражает основные черты рассматриваемых явлений, оставляя «за кадром» несущественные детали. Такое «усреднение» по непринципиальным особенностям в ряде случаев позволяет вскрыть не известные ранее приближенные законы подобия и получить универсальные выражения, единым образом описывающие значительный массив входных параметров задачи. При этом, естественно, не учитываются тонкие индивидуальные особенности, подобно тому, как статистическое распределение электронной плотности Томаса–Ферми не учитывает осцилляций, связанных с оболочечной структурой атома. Сказанное относится, например, к локально-плазменной модели дипольной поляризуемости атома и основанном на ней описании атомного фотоэффекта. В то же время некоторые из изложенных методов, например, вращательное приближение в теории статического тормозного излучения, весьма точно описывают имеющиеся экспериментальные данные и результаты последовательных расчетов в области своей применимости. Изложенные подходы допускают распространение и на другие столкновительные процессы. Так, приближенный скейлинг комптоновского профиля может быть использован для описания ударной ионизации нейтральных атомов. Результат такого подхода в ряде случаев дает лучшее соответствие с экспериментальными данными, чем другие известные простые методы.

Автор считает своим приятным долгом выразить благодарность декану факультета физической и квантовой электроники МФТИ Ю.И. Швецу за поддержку издания этой книги.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Гамбош П.* Статистическая теория атома и ее применения. — М: ИЛ, 1951. — 398 с.
2. *Ферми Э.* К теории столкновений атомов с электрически заряженными частицами // Научные труды. — М: Наука, 1971. Т. 1. С. 166 — 177.
3. *Ландау Л.Л., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. — М: Наука, 1974. — 752 с.
4. *Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Квантовая электродинамика. — М: Наука, 1980. — 704 с.
5. *Вайнштейн Л.А., Шевелько В.П.* Структура и характеристики ионов в горячей плазме. — М: Наука, 1986.
6. *Рапопорт Л.П., Зон Б.А., Манаков Н.Л.* Теория многофотонных процессов в атомах. — М: Атомиздат, 1978. — 184 с.
7. *Kogan V.I., Kukushkin A.B., Lisitsa V.S.* Kramers Electrodynamics and Electron-Atomic Radiative-Collisional Processes// Phys. Rep. — 1992. — V. 213. — P. 1.
8. *Eisenberger P., Platzman P.M.* Compton scattering of X rays from bound electrons// Phys. Rev. A. — 1970. — V. 2. — P. 415—423.
9. *Виноградов А.В., Толстихин О.И.* Плазменный подход к теории фотопоглощения и поляризуемости сложных атомов// ЖЭТФ. — 1989. — Т. 96. — С. 1204—1213.
10. *Brandt W., Lundqvist S.* Atomic Oscillations in the Statistical Approximation// Phys. Rev. — 1965. — V. 139. — P. A612 — A617.
11. *Уланцев А.Д., Шевелько В.П.* Статическая мультипольная поляризуемость атомов и ионов в модели Томаса–Ферми// Опт. и спектр. — 1988. — Т. 65. — С. 1003—1008.

12. *Stott M.J., Zaremba E.* Linear-response theory within the density-functional formalism: application to atomic polarizabilities// *Phys. Rev. A.* — 1980. — V. 21. — P. 12—23.
13. *Головинский П.А.* Динамическая поляризуемость отрицательных ионов// *Опт. и спектр.* — 1981. — Т. 50. — С. 216—221.
14. *Поляризацонное* тормозное излучение частиц и атомов Под ред. В.Н. Цытовича, И.М. Ойрингеля. — М: Наука, 1987. — 336 с.
15. *Астапенко В.А.* Поляризацонные и интерференцонные явления в тормозном излучении заряженных частиц на атомах. — *Химическая физика*// 2000. — Т. 19. — С. 17—77.
16. *Амусья М.Я.* Атомный фотоэффект. — М: Наука, 1987. — 272 с.
17. *Rost J. M.* Analytical total photo cross section for atoms// *J. Phys. B.* — 1995. — V. 28. — P. L601—L606.
18. *Король А.В., Лялин А.Г., Оболенский О.И., Соловьев А.В.* Исследование роли поляризацонного механизма излучения атомов в широком диапазоне частот фотонов// *ЖЭТФ.* — 1998. — Т. 114. — С. 458—473.
19. *Biggs F., Mendelsohn L.B., Mann J.B.* Hartree-Fock Compton profiles for the elements// *Atomic Data and Nuclear Data Tables.* — 1975. — V. 16. — P. 201—309.
20. *Bergstrom P.M. (JR) and Pratt R.H.* An overview of the theories used in Compton scattering calculations// *Radiat. Phys. Chem.* — 1997. — V. 50. — P. 3—29.
21. *Astapenko V.A., Bureyeva L.A., Lisitsa V.S.* Polarization radiation phenomena in plasmas with heavy ions// *Physica Scripta.* — 2000.— V. T86. — P. 62—67.
22. *Астапенко В.А., Буреева Л.А., Лисица В.С.* Классическая и квантовая теория поляризацонного тормозного излучения в модели локальной электронной плотности// *ЖЭТФ.*— 2000. — Т. 117. — С. 496—510.

23. *Астапенко В.А., Буреева Л.А., Лисица В.С.* Радиационные потери электронов при рассеянии на томас-фермиевском атоме// ЖЭТФ. — 2002. — Т. 121. — С. 12—21.
24. *Астапенко В.А., Буреева Л.А., Лисица В.С.* Поляризационный канал излучения и рекомбинации электронов в плазме с тяжелыми ионами// Физика плазмы. — 2002. — Т. 28. — Вып. 3.

Астапенко Валерий Александрович

**ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ В ТЕОРИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
ФОТОНОВ И ЭЛЕКТРОНОВ С АТОМАМИ**

Редактор *И.А. Волкова* Корректор *О.П. Котова*

Изд. лиц. ИД № 05403 от 16.07.2001 г. Подписано в печать 22.03.2002.

Формат $60 \times 84 \frac{1}{16}$. Бумага офсетная. Печать офсетная. Усл. печ. л. 6,5.

Уч.- изд. л. 6,3. Тираж 250 экз. Заказ № ф-240.

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Отдел автоматизированных издательских систем "ФИЗТЕХ-ПОЛИГРАФ"

141700, Моск. обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9

ISBN 5-7417-0185-X



9 785741 701850

интернет-магазин
OZON.RU



15129677