

Оглавление

Введение	9
Литература	12
Глава 1. Основные сведения из теории радиационных процессов в атомах и плазме	14
1.1. Спонтанные и вынужденные процессы	14
1.2. Типы электронных переходов	19
1.3. Излучательные характеристики атома	21
1.4. Эффективные поля в плазме	29
1.5. Вычисление коэффициентов излучения и поглощения в плазме	35
Литература	41
Глава 2. Приближенные методы и качественные модели	42
2.1. Статистическая модель атома	42
2.2. Борновское и квазиклассическое приближения	53
2.3. Метод эквивалентных фотонов	56

2.4. Формулы Крамерса для вероятностей радиационных процессов	62
2.5. Квазиэнергетическое приближение	64
2.6. Модель свободного электрона и двухуровневой системы	69
2.7. Вращательное приближение в теории тормозного излучения и рекомбинации	75
2.8. Локально-плазменная модель взаимодействия атома с электромагнитным полем	82
2.9. Гибридный метод Роста расчета сечения фотоионизации	90
Литература	93
Глава 3. Эффекты сильного поля и поляризации остова в процессах фотоионизации	95
3.1. Теория многих частиц в сильном поле	95
3.2. Поляризационный потенциал и наведенный дипольный момент	102
3.3. Фотоотрыв электронов от отрицательных ионов . . .	107
3.4. Многоэлектронные эффекты при фотоионизации атомов	118
Литература	126
Глава 4. Поляризационные свободно-свободные и свободно-связанные переходы	128
4.1. Спонтанное тормозное излучение на атомах и ионах с учетом поляризационного канала	128
4.2. Тормозной эффект на атомах и ионах в сильных световых полях	156
4.3. Тормозной эффект в плазме	168

4.4. Поляризационная рекомбинация на атомах и кластерах	180
Литература	193
Глава 5. Резонансные процессы и интерференционные эффекты	195
5.1. Резонансный вынужденный тормозной эффект	195
5.2. Резонансное усиление поля в атомах	200
5.3. Управляемый коллапс волновых функций	203
5.4. Интерференционные эффекты в тормозном излучении с учетом проникновения налетающей частицы в остов мишени	209
Литература	220
Глава 6. Наблюдение многоквантовых и поляризационных явлений	222
6.1. Эффект Оже в лазерном поле	222
6.2. Прямая двухэлектронная ионизация в сильном лазерном поле	230
6.3. Неупругое рассеяние электронов атомами в лазерном поле	233
6.4. Излучательные процессы в бихроматическом поле . .	237
Литература	255
Глава 7. Ультракороткие лазерные импульсы	257
7.1. Генерация ультракоротких импульсов	257
7.2. Вейвлеты	260
7.3. Дифракция ультракоротких импульсов	268
7.4. Безабберационная фокусировка импульса	278
Литература	282

Глава 8. Взаимодействие ультракоротких лазерных импульсов с веществом	284
8.1. Фотовозбуждение вещества ультракороткими импульсами	284
8.2. Фазовые эффекты при фотовозбуждении двухуровневой системы ультракоротким импульсом	294
8.3. Рассеяние ультракороткого импульса на атоме	310
8.4. Рассеяние ультракороткого импульса в плазме	321
8.5. Атомная антенна: рассеяние импульса сверхатомной интенсивности	327
Литература	340
 Глава 9. Процессы в лазерных полях релятивистской интенсивности	 343
9.1. Общие соотношения	343
9.2. Приближение мгновенного удара	350
9.3. Классическое движение электрона в лазерном поле	354
9.4. Нелинейное томсоновское рассеяние	361
9.5. Излучение гамма-квантов и рождение электрон-позитронных пар	369
9.6. Электростимулированные ядерные реакции	377
9.7. Рождение пар на встречных пучках электронов и фотонов	384
Литература	388
 Заключение	 391
 Предметный указатель	 394

Основные обозначения и определения

В книге используется атомная система единиц для нерелятивистских задач ($e = \hbar = m = 1$) и релятивистские единицы для релятивистских задач ($\hbar = c = 1$, $e^2 = 1/137$). В атомных единицах $c = 137$. Атомные единицы длины, времени и энергии равны \hbar^2/me^2 , \hbar^3/me^4 и me^2/\hbar^2 соответственно.

Постоянные в гауссовой системе единиц:

Скорость света	c	=	2.998	$\times 10^{10}$ см/с
Элементарный заряд	$ e $	=	4.803	$\times 10^{-10}$ СГСЭ
Масса электрона	m	=	9.11	$\times 10^{-28}$ г
Постоянная Планка	\hbar	=	1.055	$\times 10^{-27}$ эрг·с
Постоянная тонкой структуры, ($\alpha = e^2/\hbar c$)	α	=	1/137.04	
Боровский радиус, ($a_0 = \hbar^2/me^2$)	a_0	=	5.292	$\times 10^{-9}$ см
Классический радиус электрона, ($r_e = e^2/mc^2$)	r_e	=	2.818	$\times 10^{-13}$ см
Энергия покоя электрона	mc^2	=	0.511	$\times 10^6$ эВ
Атомная единица энергии	me^4/\hbar^2	=	4.360	$\times 10^{-11}$ эрг = = 27.21 эВ

Основные обозначения

ε_i	–	энергия начального состояния системы $ i\rangle$
ε_f	–	энергия конечного состояния системы $ f\rangle$
E	–	энергия налетающего электрона
F	–	напряженность лазерного поля
\mathbf{p}_0	–	начальный импульс электрона
\mathbf{p}	–	конечный импульс электрона
$\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_0$	–	переданный импульс
$F(\mathbf{p})$	–	формфактор мишени
ω	–	частота поля лазерного излучения
$\alpha(\omega)$	–	динамическая поляризуемость атома (иона)
Z	–	заряд ядра в единицах заряда электрона
N	–	число электронов в атоме (ионе)
do	–	элемент телесного угла
$d\sigma$	–	дифференциал сечения
$\omega_p = \sqrt{4\pi n}$	–	плазменная частота
$\delta(\alpha)$	–	дельта-функция
γ^μ	–	матрицы Дирака, χ^μ – 4-вектор
$\langle f \hat{V} i\rangle$	–	матричный элемент оператора \hat{V} перехода из начального состояния $ i\rangle$ в конечное состояние $ f\rangle$

Введение

Началом изучения взаимодействия квантов света с веществом можно, по всей видимости, считать работу Эйнштейна 1905 года по фотоэффекту [1]. В этой работе было сформулировано утверждение о пропорциональности выхода фотоэлектронов интенсивности поля и, соответственно, количеству фотонов. С появлением мощных источников когерентного света – лазеров, стало доступным изучение разнообразных процессов, в которых в одном элементарном акте происходит одновременно поглощение или испускание большого числа фотонов. Такие процессы нелинейным образом зависят от интенсивности света. Одним из наиболее ярких проявлений оптических нелинейных процессов было открытие многофотонной ионизации атомов. С тех пор изолированный атом в сильном световом поле является объектом постоянного теоретического и экспериментального изучения. Поведение атомов в сильном световом поле описывается в обширной литературе, из которой мы отметим монографию [2], в которой изложены основные закономерности многофотонных процессов в атомах.

Развитие физики взаимодействия лазерного излучения с веществом происходило таким образом, что наблюдаемые явления становились все более сложными и многообразными. В частности, было обнаружено образование двухзарядных, а затем многозарядных ионов, генерация высоких гармоник и надпороговое поглощение энергии поля электронами в процессе нелинейной ионизации. Широкое распространение получили исследования по многофотонному разрушению отрицательных ионов. Важной особенностью большинства упомянутых эффектов является то, что они протекают в сложных многоэлектронных системах. Это приводит к тому, что в процессах поглощения и излучения

фотонов электроны могут обмениваться энергией за счет кулоновского взаимодействия. Поэтому простое одноэлектронное приближение существенно нарушается. Ограниченность одноэлектронного приближения хорошо известна уже для случая слабого светового поля и однофотонных процессов. Изучению роли корреляционных эффектов в однофотонных процессах, т.е. влияния возмущения одних электронов другими в процессе их квантовых переходов, посвящено много работ. Мы отметим лишь фундаментальную монографию [3] по фотоэффекту и поляризационному тормозному излучению. Основой для описания однофотонных переходов с учетом корреляционных эффектов служит приближение случайных фаз или его уточненный вариант – приближение случайных фаз с обменом.

В последние годы экспериментальные возможности лазерных систем значительно увеличились. Появились мощные компактные лазеры, способные генерировать субпикосекундные лазерные импульсы с интенсивностью сфокусированного излучения более 10^{19} Вт/см^2 [4]. В таких полях при оптической длине волны лазерного излучения колебательная энергия электрона становится сравнимой с энергией рождения электрон-позитронной пары. В настоящее время лазерная физика вступила в область релятивистских интенсивностей где возможны разнообразные электрон-ядерные процессы, стимулированные лазерным полем, такие как рождение пар, деление ядер, генерация жестких гамма-квантов и другие ядерные процессы. Таким образом, мы видим настоятельную необходимость в теоретических методах описания многочастичных процессов и в области сверхинтенсивных лазерных полей.

Принцип изложения материала в книге основан на формулировке основных положений теории фотопроцессов в атомах и теории многих частиц, в том числе в умеренно сильных и релятивистских лазерных полях, с последующим применением их к конкретным процессам. При этом исходные общие соотношения дополняются приближениями, соответствующими особенностям конкретной задачи. Основой описания поведения многочастичных систем в сильном световом поле в нашей книге является использование представления «одетых» состояний частиц в поле, вторичного квантования полей и континуального интегрирования. Это позволяет единым образом описывать разнообразные процессы в сильном поле без явного ограничения теорией возмущений. Кроме того, это дает возможность в рамках одного подхода рас-

пространять теорию и на области сверхвысоких интенсивностей, где внешние оболочки атомов ионизируются и главным становится наиболее полный учет воздействия поля на свободные электроны.

Следует отметить, что в области умеренных интенсивностей лазерных полей развиваются и другие подходы, обладающие определенными преимуществами, например, на основе применения штурмовских разложений. Это позволяет использовать базис Хартри–Фока для построения полной системы промежуточных состояний. Развита в этом направлении теория позволила рассчитать поляризуемости сложных атомов. Ряд таких методов учета межчастичного взаимодействия не нашли отражения в настоящей книге. Так, эффективным подходом при изучении нелинейных эффектов в сложных атомах является метод комплексного вращения координат. Определенный интерес представляет метод разложения решения по гипersферическим функциям. Он наиболее приспособлен к описанию систем с четко выделенными двумя электронами, находящимися вне более жесткого остова. Не обладая универсальностью, он в то же время позволяет в значительной мере облегчить учет корреляций при расчете элементарных процессов в таких системах, как атом гелия, отрицательный ион атома водорода и атомы щелочноземельных элементов.

Если в описании корреляционных эффектов в атомных системах существует целый ряд подходов, дополняющих излагаемый в данной книге, то в задаче о столкновении электронов с атомами мы обобщили предшествующие работы, последовательно используя квазиэнергетическое представление как для описания налетающего на мишень электрона, так и для описания состояния самой мишени во внешнем поле. При этом результаты более ранних работ получаются из излагаемого нами формализма в качестве предельных случаев. Касаясь поляризационных эффектов в плазме, следует отметить, что в последние годы исследования поляризационных эффектов в тормозном эффекте в слабом поле, как в изолированных атомах, так и в плазме получили значительное развитие. Основные результаты этих исследований отражены в обзоре [5]. Излагаемый нами подход позволяет последовательно учесть нелинейные поляризационные эффекты и роль плазменного окружения положительного иона в процессах многофотонного поглощения и излучения при рассеянии электрона на ионе. Наконец, в области полей релятивистской интенсивности атомы сильно ионизируются, и

основным процессами, вызываемыми сильным внешним электромагнитным полем, становятся столкновения электронов с атомными ядрами.

Изучение нелинейных многочастичных процессов в атомных системах существенно для дальнейшего развития физики взаимодействия лазерного излучения с веществом. Однако и уже имеющиеся результаты убедительно показывают, что их правильная интерпретация во многих случаях требует учета эффектов многих частиц. В плазме, а также в области лазерных полей релятивистской интенсивности сама природа протекающих процессов, например, рождение электрон-позитронных пар, является многочастичной и требует адекватного описания. Все это диктует необходимость существенного изменения подхода к расчетам элементарных процессов взаимодействия излучения с веществом. Настоящую книгу следует рассматривать как современное дополнение к классическим руководствам по расчетам элементарных процессов в атомах и лазерной плазме [6–8], в котором затрагиваются многочастичные, когерентные и наноразмерные аспекты проблемы.

В книгу вошли результаты исследований, проведенных в Московском физико-техническом институте, Воронежском государственном университете, Воронежском архитектурно-строительном университете, по Федеральным целевым программам №ПЗ43, №14В37.21.1071 и грантам РФФИ №10-02-01095, №13-07-00270.

Литература

1. *Эйнштейн А.* Об одной эвристической точке зрения, касающейся возникновения и превращения света. / Собр. соч. Т. 3. – М: Наука, 1966. С. 92–107.
2. *Delone N.B., Krinov V.P.* Multiphoton Processes in Atoms. – Berlin–NY: Springer, 1994.
3. *Амусья М.Я., Иванов В.К., Черепков Е.А., Чернышова Л.В.* Процессы в многоэлектронных атомах. – СПб: Наука, 2006.

-
4. *Ахманов С.А., Выслоух В.А., Чиркин А.С.* Оптика фемтосекундных лазерных импульсов. – М: Наука, 1988.
 5. *Астапенко В.А., Буреева Л.А., Лисица В.С.* Поляризационные эффекты в атомных переходах // УФН. 2002. Т. 172. №2. С. 155–192.
 6. *Собельман И.И.* Введение в теорию атомных спектров. – М.: Наука, 1977.
 7. *Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А.* Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. – М.: Наука, 1979.
 8. *Вайнштейн Л.А., Шевелько В.П.* Структура и характеристики ионов в горячей плазме. – М.: Наука, 1986.

Глава 1

Основные сведения из теории радиационных процессов в атомах и плазме

1.1. Спонтанные и вынужденные процессы

Радиационные процессы с точки зрения роли в них электромагнитного поля можно подразделить на две группы: (а) спонтанные и (б) вынужденные. Спонтанные процессы, как это следует уже из их названия, происходят самопроизвольно, без какого-то ни было внешнего воздействия. Соответственно их вероятность не зависит от интенсивности электромагнитного поля, а определяется исключительно свойствами излучающей системы и мировыми константами (скоростью света c , зарядом электрона e и постоянной Планка \hbar). Простейшим примером спонтанного радиационного процесса является испускание фотона возбужденным атомом. В этом случае связанный электрон атома, находящийся в возбужденном состоянии $|2\rangle$ с энергией E_2 , самопроизвольно переходит в состояние $|1\rangle$ с энергией E_1 ($E_1 < E_2$) с

испусканием фотона, частота которого ω равна:

$$\omega = \omega_{21} = E_2 - E_1 . \quad (1.1.1)$$

Здесь и далее мы пользуемся атомной системой единиц, в которой $e = m = \hbar$. Заметим, что данное равенство выражает собой закон сохранения энергии. Вероятность (в единицу времени) рассматриваемого процесса W_{21} равна коэффициенту Эйнштейна для спонтанного излучения

$$W_{21}^{sp} = A_{21} = \frac{4\omega_{21}^3 \mathbf{d}_{21}^2}{3c^3} . \quad (1.1.2)$$

Здесь $\mathbf{d}_{21} = \langle 2 | \mathbf{d} | 1 \rangle$ – матричный элемент дипольного момента электронного перехода $2 \rightarrow 1$ (предполагается, что $d_{21} \neq 0$). Если рассматривается ансамбль атомов, то для получения полного числа спонтанных переходов нужно вероятность (1.1.2) умножить на число атомов, находящихся в возбужденном состоянии $|2\rangle$. Здесь мы не касаемся специального случая сверхизлучения Дике, когда атомы излучают когерентно [1].

Вынужденные радиационные процессы происходят в результате воздействия внешнего электромагнитного поля на систему заряженных частиц. В этом случае вероятность процесса зависит от интенсивности и спектра внешнего поля. Так, атом, находящийся в состоянии $|1\rangle$, может перейти в возбужденное состояние $|2\rangle$, поглотив при этом фотон внешнего электромагнитного поля частоты ω , определяемой равенством (1.1.1). Вероятность такого процесса W_{12}^{ind} выражается через коэффициент Эйнштейна B_{12} , который равен

$$B_{12} = \frac{4\pi^2 \mathbf{d}_{12}^2}{3} , \quad (1.1.3)$$

и спектральную плотность энергии электромагнитного поля $\rho(\omega)$, вычисленную на частоте перехода ω_{21} :

$$W_{12}^{ind} = B_{12} \rho(\omega_{21}) . \quad (1.1.4)$$

Величина $\rho(\omega)$ связана с пространственной плотностью энергии электромагнитного поля следующим образом:

$$\frac{\langle \mathbf{F}^2 + \mathbf{H}^2 \rangle}{8\pi} = \int_0^\infty \rho(\omega) d\omega . \quad (1.1.5)$$

Здесь \mathbf{F} и \mathbf{H} – напряженности электрического и магнитного полей, угловые скобки обозначают усреднение соответствующих величин по времени. Равенство (1.1.4) справедливо для электромагнитных полей с достаточно широким спектром, таких как поле теплового излучения. В случае электромагнитных полей с узким спектром, например лазерного излучения, формула (1.1.4) должна быть изменена таким образом, чтобы учесть спектральную форму линии электронного перехода. Для этого введем корреляционную функцию дипольных моментов атома

$$K_{21}(\tau) = \langle \mathbf{d}_{21}(\tau) \mathbf{d}_{12}(0) \rangle, \quad (1.1.6)$$

с помощью которой определяется контур линии:

$$I_{21}(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} K_{21}(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau. \quad (1.1.7)$$

Угловые скобки в формуле (1.1.6) обозначают усреднение по возмущающим воздействиям на атом. В случае однородного уширения электронного перехода корреляционная функция (1.1.6) представима в виде

$$K_{21}(\tau) = \exp(i\omega_{21}\tau - \tau/T_2). \quad (1.1.8)$$

Здесь T_2 – время фазовой (или поперечной) релаксации. Время T_2 описывает релаксацию дипольного момента перехода, вызванную сбоем относительной фазы волновых функции состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Отметим, что к сбою фазы волновой функции приводят столкновения с различными частицами или квазичастицами, а также воздействие внешних полей. Подстановка равенства (1.1.8) в (1.1.7) дает следующую форму линии:

$$I_{21}(\omega) = |\mathbf{d}_{21}|^2 g_L \omega = |\mathbf{d}_{21}|^2 \frac{1/(\pi T_2)}{(\omega - \omega_{21})^2 + (1/T_2)^2}, \quad (1.1.9)$$

где введена функция $g_L(\omega)$, которая в данном случае однородного уширения представляет собой лоренцевский контур. Из (1.1.9) следует, что спектральная ширина линии рассматриваемого перехода равна $\Delta\omega_{21} = 2/T_2$. Отметим, что в пределе бесконечно большого времени фазовой релаксации $T_2 \rightarrow \infty$ функция $g_L(\omega)$ стремится к дельта-функции Дирака $\delta(\omega)$. Существует, однако, ограничение сверху на

время T_2 , связанное с тем, что всегда возможен спонтанный излучательный распад верхнего уровня, так что $(T_2)_{\max} = A_{21}^{-1}$. В случае выполнения последнего равенства говорят, что контур линии имеет естественную ширину, определяемую временем такого распада.

Пусть на атом действует переменное электрическое поле вида

$$\mathbf{F}(t) = \mathbf{F}_0 \cos(\omega_0 t + \varphi(t)) \quad (1.1.10)$$

с характерным временем изменения фазы φ , равным τ_c , которое называется временем когерентности поля. Ширина спектра поля (1.1.10) обратно пропорциональна времени когерентности: $\Delta\omega \approx \tau_c^{-1}$. Если ширина линии перехода много меньше ширины спектра излучения $\Delta\omega_{21} \ll \Delta\omega$ или $T_2 \gg \tau_c$, то вероятность поглощения фотона описывается формулой (1.1.4). В обратном предельном случае узкого спектра поля, когда $\Delta\omega_{21} \gg \Delta\omega$, вместо (1.1.4) имеем соотношение

$$W_{12}^{ind} = B_{12} g(\omega_0) \frac{\mathbf{F}_0^2}{4\pi}. \quad (1.1.11)$$

В общем случае произвольного соотношения спектральной ширины линии перехода и ширины спектра излучения для вероятности поглощения фотона можно записать формулу

$$W_{12}^{ind} = B_{12} \int_0^\infty g(\omega) \rho(\omega) d\omega. \quad (1.1.12)$$

Отсюда, в частности, следуют предельные случаи (1.1.4) и (1.1.11).

Помимо поглощения энергии электромагнитного поля имеет место и другой вынужденный процесс, существование которого было предсказано Эйнштейном на основании термодинамических соображений, – индуцированное испускание фотона. Сущность этого явления заключается в том, что при воздействии на возбужденную электронную систему электромагнитного поля со спектром, охватывающим частоту (1.1.1), возможен электронный переход $2 \rightarrow 1$ в нижележащее по энергии состояние с испусканием фотона частоты (1.1.1). Замечательным свойством индуцированного фотона является его полная неразличимость с фотоном внешнего поля, вызвавшим этот процесс. Вероятность индуцированного испускания фотона под действием излучения

с широким спектром дается формулой

$$W_{21}^{ind} = B_{21} \rho(\omega_{21}) \quad (1.1.13)$$

аналогичной (1.1.4), причем коэффициент Эйнштейна B_{21} равен коэффициенту B_{12} . В общем случае имеет место выражение, которое после соответствующей замены индексов $1 \leftrightarrow 2$ совпадает с формулой (1.1.12). Отметим, что индуцированное испускание фотонов лежит в основе работы лазеров, что отражено в самом названии этого прибора: Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation.

Из определения коэффициентов Эйнштейна (1.1.2) и (1.1.3) следует, что их отношение

$$\frac{A}{B} = \frac{\omega^3}{\pi c^3} = \rho_{vac}(\omega) . \quad (1.1.14)$$

Здесь $\rho_{vac}(\omega)$ представляет собой спектральную плотность энергии электромагнитного поля, связанного с так называемыми вакуумными флуктуациями. Действительно, в соответствии с квантово-электродинамическими представлениями вакуум электромагнитного поля является специфическим состоянием поля, не сводящимся просто к «пустоте». В вакуумном состоянии среднее значение напряженности электромагнитного поля равно нулю, но квадратичная форма от напряженности, каковой является энергия поля, отлична от нуля. С помощью соотношения (1.1.14) можно интерпретировать спонтанное излучение фотона как вынужденное испускание, происходящее под действием вакуумных флуктуаций электромагнитного поля. Такая интерпретация соответствует физической картине радиационных процессов в рамках квантовой электродинамики, в которой динамическими переменными являются операторы полей, а не сами поля.

Излучение и поглощение фотона атомом представляют собой простейшие спонтанные и вынужденные процессы. Существуют и другие явления, происходящие как спонтанным, так и вынужденным образом: рассеяние фотона на атомном электроны, тормозное излучение электрона на атоме и т.д. Помимо вынужденных радиационных процессов, происходящих только под действием электромагнитного поля, существует и другой тип явлений, которые могут происходить и без внешнего поля, но присутствие поля их существенно модифицирует. Например, рассеяние электронов на атоме происходит и без действия

электромагнитного поля, но в его присутствии это рассеяние приобретает новые черты – возникает так называемое рассеяние в присутствии лазерного поля.

В заключение этого пункта отметим, что вакуум электромагнитного поля представляет собой идеализированное понятие, поскольку всегда присутствует, например, реликтовое излучение малой интенсивности, возникшее в момент образования Вселенной. Таким образом, радиационные процессы, практически всегда содержат вынужденную составляющую, которая становится доминирующей для достаточно интенсивных, например лазерных, полей.

1. 2. Типы электронных переходов

Рассмотренное в предыдущем разделе излучение и поглощение фотона атомом при переходе между состояниями дискретного энергетического спектра является примером связанно-связанного перехода. Существуют и другие типы электронных переходов при взаимодействии с фотонами, которые подразделяются в зависимости от того, к какой области энергетического спектра относятся начальное и конечное состояние электрона. Так, ионизация атома представляет собой пример связанно-свободного перехода, в результате которого атомный электрон из дискретного спектра переходит в непрерывный энергетический спектр, т.е. происходит ионизация атома. Обратный процесс, когда свободный электрон захватывается на дискретный уровень положительного иона, называется рекомбинацией. Это свободно-связанный электронный переход. Ионизация и рекомбинация могут происходить как при взаимодействии с фотонами, так и при взаимодействии с заряженными частицами. В случае вылета электрона из атома за счет межэлектронного взаимодействия в возбужденном атоме ионизация атома называется эффектом Оже, а рекомбинация с участием такого механизма – диэлектронной рекомбинацией. Захват свободного электрона в дискретное состояние нейтрального атома с излучением фотона называется фотоприлипанием. Фотоприлипание, естественно, представляет собой свободно-связанный переход. Наконец, электронные переходы между состояниями непрерывного спектра являются свободно-

свободными. Примером такого рода процесса является тормозное излучение, а также рассеяние электронов в поле силового центра.

Для полной вероятности (за все время процесса) излучения или поглощения n фотонов при рассеянии электрона на статическом потенциале в поле интенсивной электромагнитной волны (1.1.10) имеет место следующее выражение:

$$W_n \sim J_n^2 \left(\frac{\mathbf{d} \mathbf{F}_0}{\omega_0} \right). \quad (1.2.1)$$

Здесь $J_n(z)$ – функция Бесселя n -того порядка, \mathbf{F}_0 – амплитуда электрического поля лазерной волны, \mathbf{d} – электрический дипольный момент, соответствующий заданному рассеянию электрона. Формуле (1.2.1) можно дать простую физическую интерпретацию. Как известно, функция Бесселя достигает своего максимума при значении аргумента, близком к ее порядку. Данное утверждение для (1.2.1) может быть переписано в виде $\mathbf{d} \mathbf{F}_0 \cong n \omega_0$, т.е. работа сил поля над рассеивающимся электроном равна энергии излученных фотонов, как и должно быть в квазиклассическом пределе в соответствии с законом сохранения энергии.

В борновском приближении, реализующемся для достаточно быстрых электронов, излучающий дипольный момент в выражении (1.2.1) есть $\mathbf{d} = \Delta \mathbf{p} / \omega_0$, где $\Delta \mathbf{p}$ – изменение импульса электрона в ходе рассеяния. Формула (1.2.1) согласуется тогда с известным результатом, впервые полученным Бункиным и Федоровым для вероятности многофотонного тормозного излучения [2]. В случае справедливости квазиклассического приближения, когда движение электрона может быть описано, как и в классической механике, с помощью понятия траектории, для излучающего дипольного момента имеем $\mathbf{d} = \mathbf{v}_\omega$, где \mathbf{v}_ω – временной фурье-образ вектора скорости электрона. Тогда формула (1.2.1) переходит в результат Берсона [3] для вынужденного тормозного излучения квазиклассических электронов.

Для достаточно слабых электромагнитных полей, когда $F_0 < \omega_0/d$, в правой части равенства (1.2.1) можно оставить первый член разложения функции Бесселя по степеням аргумента. В этом случае для однофотонного процесса ($n = 1$) из (1.2.1) можно получить выражение, близкое по форме к (1.1.11), но описывающее полную вероятность излучения/поглощения фотона при свободно-свободном электронном

переходе. В случае сильного поля $F_0 \geq \hbar \omega_0/d$ вклад в вероятность излучательного процесса дают все члены разложения функции Бесселя в формуле (1.2.1). Физический смысл возникающих дополнительных слагаемых заключается в виртуальном поглощении и излучении фотонов электромагнитного поля.

Существуют смешанные типы электронных переходов, например, фотоионизация атома посредством возбуждения в автоионизационное состояние, впервые рассмотренная У. Фано и позднее А.С. Компанейцем. Автоионизационное состояние атома представляет собой связанное состояние электрона, расположенное в области непрерывного энергетического спектра атома. Оно в течение короткого времени (порядка 10^{-13} с) распадается за счет взаимодействия с атомным остатком, в результате чего образуются свободный электрон и положительный ион. При этом возможен и другой канал процесса – прямое возбуждение атомного электрона в непрерывный спектр. Поскольку оба канала имеют место в ходе одного элементарного процесса, то возникает их квантовая интерференция, приводящая к характерной асимметричной спектральной форме линии фотоионизации (резонанс Фано).

Специфические черты приобретает фотоионизация атома, находящегося в сильном постоянном электрическом поле, когда состояние дискретного спектра может распадаться за счет туннельной ионизации. В этом случае начальное электронное состояние не является, строго говоря, связанным, а представляет собой состояние смешанного типа.

Другой тип особенностей в электронных переходах возникает, если атом помещен в сильное монохроматическое электромагнитное поле. Тогда энергия атомных электронов не сохраняется, и для описания радиационных процессов необходимо использовать понятие квазиэнергии.

1. 3. Излучательные характеристики атома

В соответствии со стандартными правилами квантовой механики оператор взаимодействия электрона с электромагнитным полем, задаваемым вектор-потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, можно получить, заменив в

операторе кинетической энергии импульс электрона $\hat{\mathbf{p}}$ через обобщенный импульс: $\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}} + (1/c) \mathbf{A}$, где $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$ – оператор импульса электрона, заряд электрона – $e = -|e| = -1$. В результате гамильтониан взаимодействия электрона с электромагнитным полем имеет вид:

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2c} (\mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \mathbf{A}) + \frac{1}{c^2} \mathbf{A}^2. \quad (1.3.1)$$

Вообще говоря, в правой части равенства (1.3.1) должен также присутствовать член $-U$, связанный со скалярным потенциалом поля U , однако для свободного электромагнитного поля удобна калибровка $U = 0$.

При описании процессов первого порядка малости по электромагнитному полю последним слагаемым в (1.3.1) можно пренебречь. Тогда, учитывая градиентную инвариантность вектор-потенциала, формулу (1.3.1) можно упростить:

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{c} (\mathbf{A} \hat{\mathbf{p}}). \quad (1.3.2)$$

В дипольном приближении, когда электромагнитное поле однородно в пространстве взаимодействия и $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(t)$, гамильтониан взаимодействия (1.3.1) можно представить в другой форме, если воспользоваться преобразованием волновой функции электрона

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(\frac{i \mathbf{A}(t) \mathbf{r}}{c}\right) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t), \quad (1.3.3)$$

которое не изменяет физически наблюдаемые величины. Тогда вместо (1.3.1), учитывая, что $\mathbf{F}(t) = -(1/c) \dot{\mathbf{A}}(t)$, находим:

$$H_{int}^r = \mathbf{r} \mathbf{F}. \quad (1.3.4)$$

Гамильтониан взаимодействия (1.3.4) называется гамильтонианом взаимодействия в форме длины. Он эквивалентен гамильтониану (1.3.2) в случае использования точных волновых функций электрона. Если при описании радиационных процессов используется не полный базис волновых функций, то формы гамильтониана (1.3.1) и (1.3.4) могут привести к различным результатам. Анализ этого вопроса показывает, что при рассмотрении взаимодействия электромагнитного излучения

с модельными атомами, когда основную роль играют два или несколько энергетических уровней, предпочтительным является использование гамильтониана взаимодействия в форме (1.3.4). Для излучательных явлений на атоме, происходящих в высокочастотном электромагнитном поле $\omega \gg \omega_{mn}$ (ω_{mn} – характерные атомные частоты), более удобной оказывается форма гамильтониана (1.3.1). Кроме того, формой (1.3.1) удобно пользоваться при расчете электронных волновых функций свободного электрона, возмущенных электромагнитным полем. Эти волновые функции получаются из невозмущенных функций посредством соответствующего сдвига импульса. Так, например, при выводе выражения для вероятности излучательного процесса в электромагнитном поле при свободно-свободном переходе естественно пользоваться гамильтонианом возмущения (1.3.1), что и было сделано в оригинальной работе Бункина и Федорова [2].

В случае монохроматического электромагнитного излучения гамильтониан взаимодействия (1.3.2) можно переписать через частотную компоненту напряженности электрического поля с помощью равенства $\mathbf{A} = -(i c / \omega) \mathbf{F}$:

$$\hat{H}_{int} = -\frac{i}{\omega} (\mathbf{F} \hat{\mathbf{p}}) . \quad (1.3.5)$$

Полученное выражение называется оператором электрон-фотонного взаимодействия в форме импульса или скорости. Последнее определение вытекает из равенства $\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{v}}$.

Существует и третья форма гамильтониана взаимодействия, справедливая в резонансном случае, когда $\omega = E_2 - E_1$. Рассматриваемые электронные состояния могут принадлежать как к дискретному, так и к непрерывному энергетическому спектру. Эту форму можно получить, если воспользоваться равенствами (квадратные скобки обозначают коммутатор от находящихся в них операторов):

$$-\omega \langle 1 | \hat{\mathbf{p}} | 2 \rangle = \langle 1 | [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] | 2 \rangle = -i \langle 1 | \dot{\hat{\mathbf{p}}} | 2 \rangle , \quad (1.3.6)$$

следующими из операторного уравнения Гейзенберга для импульса $\dot{\hat{\mathbf{p}}} = i [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}]$ и того факта, что энергии $E_{1,2}$ рассматриваемых состояний являются собственными значениями полного гамильтониана

системы \hat{H} . Полный гамильтониан атома равен:

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_n^2}{2} - \frac{Z}{r_n} \right) + \sum_{k>n}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_k|}. \quad (1.3.7)$$

Здесь Z – заряд ядра атома, N – число атомных электронов. Если теперь вычислить временную производную от оператора импульса с помощью уравнения Гейзенберга, то можно получить:

$$\sum_n \dot{\hat{\mathbf{p}}}_n = Z \sum_n \frac{\mathbf{r}_n}{r_n^3}. \quad (1.3.8)$$

Таким образом, мы приходим к гамильтониану взаимодействия электромагнитного поля с атомом в форме ускорения:

$$\hat{H}_{int} = -\frac{i Z}{\omega^2} \frac{(\mathbf{F} \mathbf{r})}{r^3}. \quad (1.3.9)$$

Отметим, что операторы электрон-фотонного взаимодействия в форме длины (1.3.4), импульса (1.3.5) и ускорения (1.3.9) эквивалентны, если вычисления матричных элементов проводятся с точными волновыми функциями системы. В противном случае вышеприведенные формы дают, вообще говоря, различный результат. Предпочтительность какой-либо из форм гамильтониана взаимодействия для вычислений с приближенными волновыми функциями определяется типом используемого приближения. Например, если модельная волновая функция дает наилучшее приближение к точной функции на больших расстояниях от ядра, то предпочтительнее использовать оператор в форме длины. Интеграл, входящий в амплитуду процесса, определяется в этом случае большими расстояниями, где точность приближения максимальна.

С помощью введенных выше операторов электрон-фотонного взаимодействия можно записать вероятность радиационного процесса. В простейшем случае слабого внешнего поля эта вероятность (в единицу времени) равна

$$dW_{21} = 2\pi |M_{21}|^2 \delta(E_2 - E_1 \mp \omega) d\nu_2, \quad (1.3.10)$$

где $M_{12} = \langle 1 | \hat{H}_{int} | 2 \rangle$ – амплитуда процесса, дельта-функция выражает закон сохранения энергии, причем знак минус относится к поглощению фотона, а знак плюс – к испусканию, $d\nu_2$ – плотность конечных

состояний электрона, соответствующих энергии E_2 . В случае перехода между дискретными невырожденными уровнями энергии $d\nu_2 = 1$ и $dW_{21} = W_{21}$.

Выражение (1.3.10) описывает фотоионизацию атома, если начальное состояние атомного электрона связанное, а конечное свободное. Это имеет место в случае поглощения фотона достаточно высокой частоты, когда $\omega > I_1$ (I_1 – потенциал ионизации атома, находящегося в состоянии $|1\rangle$). Вместо вероятности в единицу времени для описания радиационного процесса часто используют сечение,

$$\sigma = \frac{w}{j}, \quad (1.3.11)$$

где j – плотность потока частиц, вызывающих рассматриваемое явление. Для радиационных процессов j представляет собой плотность потока фотонов

$$j = \frac{c F_0^2}{8 \pi \omega}. \quad (1.3.12)$$

Из формул (1.3.10)–(1.3.12) получаем для сечения фотоионизации выражение

$$\sigma_{ph}(\omega) = \frac{4 \pi^2 \omega}{c} \int \left| \tilde{M}_{21} \right|^2 \delta(E_2 - E_1 - \hbar \omega) d\nu_2, \quad (1.3.13)$$

где $\tilde{M} = 2M/F_0$ – амплитуда процесса, нормированная на амплитуду напряженности электрического поля. При записи (1.3.12)–(1.3.13) было учтено, что амплитуда поля для фиксированного знака частоты, входящая в определение H_{int} , в два раза меньше действительной амплитуды поля F_0 , фигурирующей в равенстве (1.1.10): $F_0 \cos(\omega t) = (F_0/2) \exp(i\omega t) + (F_0/2) \exp(-i\omega t)$. Подставляя в формулу (1.3.13) выражение для оператора возмущения в форме длины (1.3.4) и интегрируя по состояниям непрерывного спектра с учетом δ -функции, находим:

$$\sigma_{ph}(\omega) = \frac{4 \pi^2 \omega}{c} |\mathbf{e} \mathbf{d}_{12}|^2, \quad \omega > I_1, \quad (1.3.14)$$

где \mathbf{e} – единичный вектор поляризации электромагнитного поля. Матричный элемент дипольного момента электронного перехода \mathbf{d}_{12} в (1.3.14) вычислен между состоянием дискретного спектра атома $|1\rangle$ и состоянием непрерывного энергетического спектра образующегося иона $|2\rangle$, волновые функции которых имеют различную нормировку.

В случае связанно-связанных переходов электрона, помимо коэффициентов Эйнштейна A и B часто используется безразмерная характеристика электронного перехода, называемая силой осциллятора f_{12} . Сила осциллятора определяется равенством (для начального состояния):

$$f_{12} = \frac{2\omega_{21} |\mathbf{d}_{12}|^2}{3}. \quad (1.3.15)$$

Название этой величины возникло в классической теории взаимодействия электромагнитного поля с веществом. В этой теории излучающая или поглощающая излучение система рассматривалась как набор колеблющихся зарядов, называемых осцилляторами. Отметим, что и в квантовой теории существует так называемый спектроскопический принцип соответствия, согласно которому атом при своем взаимодействии с излучением может быть представлен в виде набора осцилляторов. Собственные частоты атомных осцилляторов совпадают с частотами электронных переходов в атоме, а вынуждающая сила, действующая на переход, пропорциональна соответствующей силе осциллятора. Таким образом, можно сказать, что сила осциллятора перехода является мерой соответствия реального квантового осциллятора своему классическому аналогу. Заметим, что в одноэлектронном случае величина f_{12} всегда меньше единицы. Понятие силы осциллятора можно обобщить также и на связанно-свободные переходы, если под конечным состоянием $|2\rangle$ понимать состояние непрерывного спектра. В этом случае говорят о плотности силы осцилляторов, имеющей размерность обратной энергии в соответствии с нормировкой волновых функций непрерывного спектра «по шкале энергий».

Удобство введения силы осциллятора (1.3.15) заключается в том, что она подчиняется ряду правил сумм, наиболее известное из которых для атома с N электронами имеет вид:

$$\sum_j f_{1j} = N. \quad (1.3.16)$$

В этой формуле помимо суммирования по дискретному спектру атомных состояний, подразумевается интегрирование по состояниям непрерывного спектра. Если в явном виде разделить указанное суммирова-

ние и интегрирование, то вместо (1.3.16) можно записать

$$\sum_n f_{1n} + \frac{c}{2\pi^2} \int_{I_1}^{\infty} \sigma_{ph}(\omega) d\omega = N, \quad (1.3.17)$$

где $|n\rangle$ – состояния дискретного спектра. Равенство (1.3.17) называется «золотым правилом сумм». Существуют и другие правила сумм, которые мы здесь не приводим.

Определение силы осциллятора (1.3.15) дано с помощью оператора электрон-фотонного взаимодействия в форме длины (1.3.4). Можно это определение дать также и через форму импульса (1.3.5) и ускорения (1.3.9). Эти определения, как уже отмечалось выше, эквивалентны в случае использования точных волновых функций. В реальных расчетах сил осцилляторов многоэлектронных систем точные волновые функции часто неизвестны. Сравнение имеющихся теоретических и экспериментальных данных по значениям сил осцилляторов для переходов в атомах благородных газов, щелочных и щелочно-земельных элементов показывает предпочтительность выбора потенциала электрон-фотонного взаимодействия в форме длины (1.3.4).

С помощью понятия силы осциллятора можно получить компактное представление для дипольной динамической поляризуемости атома $\alpha(\omega)$, величины, играющей важную роль в атомной физике и спектроскопии:

$$\alpha(\omega) = \sum_n \frac{f_{1n}}{\omega_{1n}^2 - \omega^2 - i \cdot 0}. \quad (1.3.18)$$

Суммирование здесь включает в себя интегрирование по непрерывному спектру. Бесконечно малая мнимая добавка в знаменателе выражения (1.3.18) определяет правило обхода полюса при интегрировании по состояниям непрерывного спектра.

В случае, если частота внешнего поля близка к одной из собственных частот атомного перехода, необходимо учитывать мнимую добавку к энергиям атомных состояний, описывающую ширину линии перехода. Выражение (1.3.18) справедливо для сферически-симметричного состояния атома $|1\rangle$, когда поляризуемость является скалярной величиной. В общем случае поляризуемость представляет собой тензор второго ранга α_{ij} , связывающий наведенный в электронном остове

дипольный момент \mathbf{D} и напряженность внешнего электрического поля \mathbf{F} :

$$D_i(\omega) = \sum_j \alpha_{ij}(\omega) F_j(\omega). \quad (1.3.19)$$

Интересно сравнить выражение (1.3.18) с формулой для поляризуемости классического осциллятора с собственной частотой ω_0 :

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i0}. \quad (1.3.20)$$

Из сравнения формул (1.3.18) и (1.3.20) вытекает, что поляризуемость атома представляет собой сумму поляризуемостей электронных переходов, в которой каждый переход представлен с весом, равным силе осциллятора данного перехода. Этот факт является одним из проявлений упоминавшегося выше спектроскопического принципа соответствия классической и квантовой теории.

С использованием правила сумм (1.3.16) можно получить выражение для высокочастотной поляризуемости атома, когда частота внешнего поля существенно превосходит потенциал ионизации атома:

$$\alpha(\omega \gg I) \approx -\frac{N}{\omega^2}. \quad (1.3.21)$$

При выводе (1.3.21) из (1.3.18) мы пренебрегли собственными частотами атома по сравнению с частотой внешнего поля ω . Отметим, что выражение (1.3.21) приводит к плазменной формуле для диэлектрической проницаемости среды, широко использующейся в различных приложениях:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2}. \quad (1.3.22)$$

Здесь $\omega_{pe} = \sqrt{4\pi N_e}$ – электронная плазменная частота, $N_e = n_a N$ – число атомных электронов в единице объема, n_a – концентрация атомов среды.

Как это следует из формулы (1.3.18), динамическая поляризуемость атома является комплексной величиной, действительная часть которой описывает рассеяние электромагнитного поля на атоме, а мнимая часть – поглощение. Между мнимой частью поляризуемости и сечением фотопоглощения $\sigma(\omega)$ существует соотношение

$$\text{Im}(\alpha(\omega)) = \frac{c}{4\pi\omega} \sigma(\omega), \quad (1.3.23)$$

называемое оптической теоремой. Заметим, что фотопоглощение на частотах, меньших потенциала ионизации атома $\omega < I$ связано с возбуждением атомных электронов в дискретном спектре (связанно-связанные переходы), если же $\omega > I$, то реализуется фотоионизация атома и сечение фотопоглощения совпадает с сечением фотоионизации (1.3.14).

Фотопоглощение при связанно-связанных переходах в пределе бесконечно узкого перехода ($T_2 \rightarrow \infty$) выражается через силы осцилляторов следующим образом:

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi^2}{c} \sum_n f_{1n} \delta(\omega - \omega_{n1}), \quad \omega < I. \quad (1.3.24)$$

Итак, с помощью оптической теоремы (1.3.23) можно найти мнимую часть поляризуемости системы, если известно соответствующее сечение фотопоглощения. Зная мнимую часть, можно восстановить действительную часть поляризуемости по соотношению Крамерса-Кронига:

$$\operatorname{Re}(\alpha(\omega)) = \frac{1}{\pi} \text{V.P.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Im}(\alpha(\omega'))}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (1.3.25)$$

Выражение для мнимой части поляризуемости через действительную часть имеет вид:

$$\operatorname{Im}(\alpha(\omega)) = \frac{1}{\pi} \text{V.P.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Re}(\alpha(\omega'))}{\omega - \omega'} d\omega'. \quad (1.3.26)$$

В формулах Крамерса-Кронига (1.3.25)–(1.3.26) введен символ интеграла в смысле главного значения, определяемого равенством

$$\text{V.P.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x-a} dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{a-\varepsilon} \frac{f(x)}{x-a} dx + \int_{a+\varepsilon}^{+\infty} \frac{f(x)}{x-a} dx \right\}. \quad (1.3.27)$$

1.4. Эффективные поля в плазме

При рассмотрении радиационных процессов на атомах в плазме необходимо принимать во внимание воздействие кулоновского поля заряженных частиц на связанные электроны атомов. Ниже это влияние

учитывается в простейшей модели покоящихся ионов, т.е. в статическом приближении.

Как известно, статические электрические поля в невырожденной плазме экранируются на расстоянии дебаевского радиуса

$$r_D = \sqrt{kT / (4\pi n)},$$

где T – температура, n – плотность частиц плазмы. В результате эффективный потенциал иона заряда e_i , находящегося в плазме, есть

$$U(r) = \frac{e_i}{r} e^{-r/r_D}. \quad (1.4.1)$$

Данное выражение справедливо для случая идеальной плазмы, когда средняя кинетическая энергия заряженных частиц существенно превышает их среднюю потенциальную энергию. Условие идеальности может быть записано в виде:

$$\frac{4\pi}{3} r_D^3 n \gg 1. \quad (1.4.2)$$

Неравенство (1.4.2) означает, что в условиях идеальной плазмы в сфере дебаевского радиуса находится большое число частиц, т.е. среднее межчастичное расстояние \bar{r} много меньше величины r_D . Но тогда, как это следует из (1.4.1), в первом приближении можно пренебречь дебаевской экранировкой и рассматривать поля ионов в плазме как кулоновские. В пренебрежении скоростью ионов электрическое поле, действующее на выделенный атом в плазме, представляет собой векторную сумму кулоновских полей ионов, окружающих атом:

$$\mathbf{F} = \sum_{k=1}^N \mathbf{F}_k = e_i \sum_{k=1}^N \frac{\mathbf{r}_k}{r_k^3}, \quad (1.4.3)$$

где N – полное число ионов в объеме плазмы V , и мы предполагаем для простоты все ионы одинаковыми.

При вычислении наблюдаемых величин, описывающих радиационные процессы, необходимо производить усреднение по ансамблю атомов, что эквивалентно усреднению по распределению ионного поля $W(\mathbf{F})$. Функция $W(\mathbf{F})$ дает вероятность данного значения напряженности ионного поля (1.4.3). С ее помощью можно вычислять количественные характеристики радиационных процессов на атомах в

плазме, зависящие от \mathbf{F} . Вычислим вероятность $W(\mathbf{F})$ в рамках простейшей модели, впервые рассмотренной Хольцмарком еще до создания квантовой механики. Основным физическим допущением этой модели является предположение о статическом характере ионного поля, действующего на атом, когда справедливо выражение (1.4.3). Искомая вероятность распределения поля ионов

$$W(\mathbf{F}) = \left\langle \delta \left(\mathbf{F} - e_i \sum_{k=1}^N \frac{\mathbf{r}_k}{r_k^3} \right) \right\rangle. \quad (1.4.4)$$

Здесь угловые скобки означают классическое усреднение по объему плазмы V . В пренебрежении межионными корреляциями выражение (1.4.4) можно привести к следующему виду:

$$W(\mathbf{F}) = \int \exp \left[i \rho \mathbf{F} - n (\lambda e_i \rho)^{3/2} \right] d\rho, \quad (1.4.5)$$

где введена константа $\lambda = 2\pi (4/15)^{2/3} \approx 2.603$, ρ – радиус-вектор, определяющий местоположение иона. При выводе формулы (1.4.5) из (1.4.4) было использовано интегральное представление дельта-функции. Как видно из (1.4.5), функция $W(\mathbf{F})$ зависит только от модуля напряженности поля.

Интегрирование в правой части равенства (1.4.5) дает

$$W(F) dF = H \left(\frac{F}{F_0} \right) \frac{dF}{F}. \quad (1.4.6)$$

Здесь введена функция

$$H(\beta) = \frac{2\beta}{\pi} \int_0^\infty \sin(\beta x) \exp(-x^{3/2}) x dx, \quad (1.4.7)$$

описывающая распределение Хольцмарка, а параметр F_0 , задающий масштаб распределения, равен

$$F_0 = \lambda e_i N^{2/3}. \quad (1.4.8)$$

Распределение Хольцмарка нормировано:

$$\int_0^\infty H(\beta) d\beta = 1.$$

График функции $H(\beta)$ приведен на рис. 1.1. Максимум зависимости $H(\beta)$ приходится на $\beta_{\max} = 1.607$. При $\beta \ll 1$ имеем: $H(\beta) \approx 4\beta^2/(3\pi)$, а при больших значениях аргумента: $H(\beta) \approx 1.496\beta^{-5/2}$. Отметим, что распределение Хольцмарка близко к гауссовому для $\beta \ll 1$.

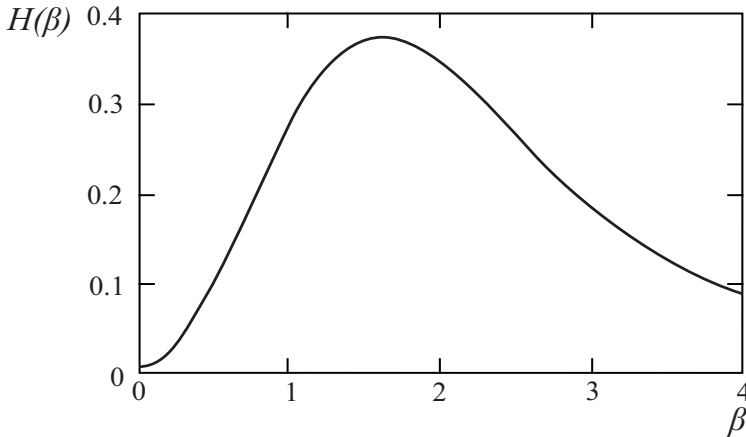


Рис. 1.1. Распределение Хольцмарка $H(\beta)$

В противоположном предельном случае $\beta \gg 1$ функция $H(\beta)$ совпадает с распределением полей одной частицы. Данное обстоятельство имеет простое объяснение. Слабое поле отвечает большим расстояниям до атома, и вклад в него дает значительное количество ионов, поэтому оно, как всякая сумма большого количества случайных величин, описывается распределением Гаусса. Сильное поле, напротив, создается ближайшим до атома ионом, т. е. соответствует бинарному распределению. Таким образом, функция Хольцмарка $H(\beta)$ сопрягает гауссово распределение слабых полей и бинарное распределение сильных полей. Весьма показательно, что масштаб распределения Хольцмарка F_0 (формула (1.4.8)) с точностью до одного процента совпадает со средним ионным полем

$$\bar{F} = e_i (4\pi n/3)^{2/3} \approx 2.61 e_i n^{2/3}.$$

Рассмотрим теперь в статическом приближении влияние плазменного поля на контур линии излучения (1.1.7) атома. Для простоты

будем иметь в виду атом водорода. Спектр излучения при электронном переходе $\alpha \rightarrow \beta$ дается выражением

$$I_{\alpha\beta}(\omega) = I_{\alpha\beta} \delta(\Delta\omega - C_{\alpha\beta} F), \quad (1.4.9)$$

где $\Delta\omega = \omega_{\alpha\beta} - \omega$ – частотная отстройка от центра линии, $C_{\alpha\beta}$ – штарковская постоянная. Формула (1.4.9) описывает штарковское расщепление уровней атома в постоянном электрическом поле F . Поскольку атомы в плазме распределены случайным образом, то на каждый атом действует свое поле, и для получения наблюдаемой формы линии правую часть равенства (1.4.9) нужно проинтегрировать с функцией распределения $W(F)$. В результате находим соотношение

$$I_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{I_{\alpha\beta}}{C_{\alpha\beta}} W\left(\frac{\Delta\omega}{C_{\alpha\beta}}\right). \quad (1.4.10)$$

Формула (1.4.10) дает статическое распределение интенсивности излучения в штарковской компоненте $\alpha \rightarrow \beta$ через функцию распределения плазменного поля $W(F)$. С помощью функции Хольцмарка (1.4.6), (1.4.7), просуммировав правую часть равенства (1.4.10) по всем штарковским компонентам верхнего (а) и нижнего (б) уровня, можно получить следующее выражение для статического контура линии:

$$I_{ab}(\omega) = \frac{1}{I_0} \sum_{\alpha,\beta} \frac{I_{\alpha\beta}}{C_{\alpha\beta} F_0} H\left(\frac{\Delta\omega}{C_{\alpha\beta} F_0}\right), \quad (1.4.11)$$

где $I_0 = \sum_{\alpha,\beta} I_{\alpha\beta}$ – полная интенсивность линии.

На крыле линии $\Delta\omega \gg C_{\alpha\beta} F_0$ формула (1.4.11) с учетом асимптотического поведения функции $H(\beta)$ дает:

$$I_{\alpha\beta}(\omega) \approx \frac{2\pi n C^{3/2}}{\Delta\omega^{5/2}}. \quad (1.4.12)$$

Здесь введена эффективная константа Штарка для линии в целом. Частотный масштаб хольцмарковского уширения водородной линии задается величиной $\Delta\omega_0 = \lambda C n^{2/3}$, причем константа может быть оценена с помощью формулы $C = (3/8)^{2/3} (n_a^2 - n_b^2)$ (n_a, n_b – главные квантовые числа уровней). Существенно, что бинарный результат (1.4.10) для статического контура линии пропорциона-

лен плотности возмущающих ионов n . Контур линии (1.4.11) удовлетворяет условию нормировки, следующему из нормировки функции Хольцмарка. Распределение Хольцмарка получено в рамках простейшей модели эффективного поля в плазме, которая не учитывает движения ионов, дебаевскую экранировку электрического поля, а также межчастичные корреляции. Учет взаимодействия ионов, описываемого множителем $\exp(-V_{int}(r_1 \dots r_N)/kT)$, где $V_{int}(r_1 \dots r_N)$ – потенциал межионного взаимодействия, а T – температура плазмы, уменьшает вклад в функцию распределения конфигураций с малым расстоянием между частицами, соответствующих большим значениям эффективного поля F .

Таким образом, истинная функция распределения $W(F)$ должна давать большую вероятность слабых полей и меньшую вероятность сильных по сравнению с функцией $H(\beta)$ (рис. 1.1). Критерием применимости использования распределения Хольцмарка является неравенство

$$\alpha^3 = \left(\frac{\bar{r}}{r_B}\right)^3 = N_D^{-1} = \frac{3\sqrt{n}}{4\pi} \left(\frac{4\pi}{kT}\right)^{3/2} \ll 1. \quad (1.4.13)$$

Здесь N_D – число ионов в сфере дебаевского радиуса, k – постоянная Больцмана.

Условие (1.4.13) совпадает с условием идеальности плазмы (1.4.2), и оно ограничивает применимость распределения Хольцмарка для низких температур. С другой стороны, высокие температуры плазмы соответствуют большим скоростям ионов, поэтому адекватность использования статического приближения, лежащего в основе модели Хольцмарка, вообще говоря, не очевидна. Адекватность этой модели может быть обоснована с помощью вычисления тепловых поправок к контуру линии и демонстрацией их малости по сравнению с нулевым, т. е. статическим, приближением. Анализ показывает, что критерий справедливости статического приближения зависит от соотношения между рассматриваемой частотной отстройкой $\Delta\omega$ и частотным масштабом хольмарковского распределения $\Delta\omega_0$. Физически этот критерий сводится к требованию малости времени потери когерентности излучающим атомом по сравнению с характерным временем изменения ионно-

го поля. Соответствующие неравенства имеют вид:

$$\Delta\omega \gg \begin{cases} v_{Ti}^2/C, & \Delta\omega \gg \Delta\omega_0 \\ \sqrt{C} n v_{Ti}, & \Delta\omega \ll \Delta\omega_0 \end{cases}, \quad (1.4.14)$$

где v_{Ti} – тепловая скорость ионов, C – эффективная константа Штарка спектральной линии в целом.

В заключении данного раздела отметим, что противоположное ударное приближение характерно для уширения контура линии быстрыми частицами, т. е. электронами. Для расчета этого уширения разработаны специальные методы, изложенные в многочисленных оригинальных работах и обзорах, из которых мы отметим [4-6].

1. 5. Вычисление коэффициентов излучения и поглощения в плазме

При вычислении количественных характеристик радиационных процессов в плазме приходится выполнять усреднение по ансамблю плазменных частиц, для чего необходимо знать их функции распределения. Распределение свободных электронов по энергиям E в термодинамически равновесной плазме определяется формулой Максвелла

$$F(E) = \frac{N_e}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{E}}{(kT)^{3/2}} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right). \quad (1.5.1)$$

В рассматриваемом случае населенности электронных состояний атомов и ионов в плазме определяются в соответствии с распределением Больцмана

$$\frac{N_n}{N_0} = \frac{g_n}{g_0} \exp\left(-\frac{E_n - E_0}{kT}\right). \quad (1.5.2)$$

Здесь g_0 и g_n – статистические веса основного $|0\rangle$ и возбужденного $|n\rangle$ состояний атома (иона), E_0 и E_n – энергии этих состояний.

Из (1.5.1) следует максвелловское распределение плазменных электронов по скоростям

$$F(v) = 4\pi N_e v^2 f(v) = 4\pi N_e v^2 \frac{1}{\sqrt{\pi} (2kT)^{3/2}} \exp\left(-\frac{v^2}{2kT}\right). \quad (1.5.3)$$

Вышеприведенные формулы следует дополнить распределением Саха по кратностям ионизации ионов:

$$\frac{N^{(z+1)}}{N^{(z)}} = \frac{g_{z+1}}{g_z} S \exp\left(-\frac{I_z}{kT}\right). \quad (1.5.4)$$

Здесь $N^{(z)}$ – концентрация иона кратности z (X_z), g_z – статистическая сумма для данного типа ионов, равная:

$$g_z = \sum_n g_n(z) \exp(-(E_n - E_0)/kT),$$

I_z – потенциал ионизации атома (иона) заданной кратности ионизации. Множитель S в формуле (1.5.4), соответствующий статическому весу свободного электрона, определяется выражением:

$$S = \frac{2}{N_e} \left(\frac{T}{2\pi}\right)^{3/2}. \quad (1.5.5)$$

В широком интервале электронных концентраций N_e порядка $10^{13} - 10^{17} \text{ см}^{-3}$, множитель S много больше единицы. С учетом этого факта можно показать, что ион с кратностью ионизации z фактически существует в плазме в температурном интервале $T \ll I_z$. Для больших температур наиболее представленным оказывается ион X_{z+1} и т.д.

В состоянии термодинамического равновесия взаимно-обратные процессы уравнивают друг друга, что выражает принцип детального равновесия. Данный принцип имеет следующее математическое выражение:

$$N_i N_e \langle v \sigma_{if} \rangle = N_f N_e \langle v \sigma_{fi} \rangle. \quad (1.5.6)$$

Здесь N_n – концентрация частиц, находящихся в n -том состоянии, угловые скобки обозначают усреднение по скорости плазменных электронов v . С учетом Больцмановского распределения (1.5.2) формулу (1.5.6) можно переписать в виде

$$g_i \langle v \sigma_{if} \rangle = g_f \langle v \sigma_{fi} \rangle \exp\left(-\frac{E_f - E_i}{kT}\right). \quad (1.5.7)$$

Состояние термодинамического равновесия имеет место для достаточно высоких концентраций частиц в плазме. Тогда населенности атомов

и ионов, а также кратности ионизации определяются многочастичными взаимодействиями. В случае разреженной плазмы реальное распределение связанных электронов по уровням существенно отличается от распределения Больцмана (1.5.2), кратность ионизации ионов не подчиняется формуле Саха (1.5.4), и принцип детального баланса в форме (1.5.6) не выполняется. В то же время распределение свободных электронов по энергиям можно считать максвелловским в широком диапазоне изменения параметров плазмы.

В случае плазмы низкой плотности, характерной, например, для солнечной короны с концентрацией электронов $N_e \approx 10^8 - 10^9 \text{ см}^{-3}$, распределение Больцмана и формула Саха «не работают», а уравнение баланса (1.5.6) следует переписать с учетом вклада радиационных процессов в виде

$$N_i N_e \langle v \sigma_{if} \rangle = N_f N_e \langle v \sigma_{fi} \rangle + N_f W_f. \quad (1.5.8)$$

Здесь W_f – полная вероятность излучательного распада уровня f . Для отношения населенностей уровней из (1.5.8) имеем

$$\frac{N_f}{N_i} = \frac{g_f}{g_i} \exp\left(-\frac{E_f - E_i}{kT}\right) \frac{1}{1 + \zeta}, \quad \zeta = \frac{W_f}{N_e \langle v \sigma_{fi} \rangle}. \quad (1.5.9)$$

Фактор ζ в равенстве (1.5.9) описывает отличие распределения населенностей от больцмановского. В корональном пределе ($N_e \rightarrow 0$) формула (1.5.9) дает:

$$\frac{N_f}{N_i} = \frac{N_e \langle v \sigma_{if} \rangle}{W_f}. \quad (1.5.10)$$

Отсюда следует, что в случае коронального равновесия населенности атомных уровней определяются конкуренцией двух процессов: ударного возбуждения и радиационного распада. Из (1.5.9) легко получить критерий реализации коронального равновесия $\zeta \gg 1$, или

$$N_e \ll \frac{W_f}{\langle v \sigma_{fi} \rangle} = N_e^*. \quad (1.5.11)$$

Здесь введена предельная концентрация электронов N_e^* , определяющая верхнюю границу по плотности плазмы в приближении коронального равновесия. Можно показать, что в условиях горячей плазмы при $z \geq 10$ значение предельной концентрации свободных электронов весьма велико: $N_e^* > 10^{23} \text{ см}^{-3}$. В случае $z \approx 1$ справедлива оценка:

$N_e^* \approx 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Таким образом, можно сделать вывод о том, что горячая плазма практически всегда находится в состоянии коронального равновесия.

Заметим, что в корональном пределе для температурной зависимости средней степени ионизации иона с заданным зарядовым числом ядра Z можно использовать следующее аппроксимационное выражение:

$$z(T, Z) = 26 \sqrt{\frac{0.0272 \cdot kT}{1 + 0.015 \cdot kT (26/Z)^2}}. \quad (1.5.12)$$

Здесь величина kT приведена в атомных единицах (1 а.е. энергии=27.2 эВ). Формула (1.5.12) с точностью 5–10% воспроизводит данные, полученные путем решения системы уравнений для коронального равновесия.

Рассмотрим теперь влияние распределения электронов по скоростям на вынужденные радиационные свободно-свободные переходы. Данный вопрос, помимо чисто физического интереса, имеет еще и большое прикладное значения. Пусть σ_e – сечение вынужденного излучения, а σ_a – сечение поглощения фотона с частотой ω в электромагнитном поле при рассеянии электрона на силовом центре. Тогда коэффициент поглощения электромагнитного излучения α можно записать в виде

$$\alpha = \frac{N_e N_c}{j} \langle v (\sigma_a - \sigma_e) \rangle, \quad (1.5.13)$$

где j – плотность потока фотонов, определяемая через амплитуду и частоту монохроматического поля (1.1.10) с помощью формулы (1.3.12), N_c – концентрация рассеивающих центров. Угловые скобки в правой части равенства (1.5.13) обозначают усреднение по скоростям электронов. Сечения $\sigma_{a,e}$ зависят как от абсолютного значения скорости электрона, так и от угла θ между вектором скорости и вектором электрического поля излучения, которое мы будем предполагать линейно поляризованным.

С помощью (1.5.13) можно проанализировать зависимость знака коэффициента α от функции распределения электронов по скоростям, который определяет характер электрон-фотонного взаимодействия (поглощение или излучение). Наиболее просто это можно сделать для случая изотропного распределения электронов по скоростям.

Тогда удобно ввести усредненные по углу θ сечения вынужденного излучения и поглощения $\sigma_{a,e}$, для которых справедлив «интегральный» принцип детального равновесия:

$$v^2 \tilde{\sigma}_a(v) = v'^2 \tilde{\sigma}_e(v'), \quad (1.5.14)$$

где $v' = \sqrt{v^2 + 2\omega}$ – значение модуля скорости электрона после поглощения фотона. Сечение вынужденного процесса можно выразить через сечение спонтанного излучения в полный телесный угол с помощью формулы

$$\sigma_e(v) = \frac{\pi^2 c^2 j}{\omega^2} \sigma_{sp}(v, \omega). \quad (1.5.15)$$

Подставляя (1.5.15) с учетом (1.5.14) в выражение (1.5.13), находим:

$$\alpha = -\frac{4\pi^3 c^2 N_c}{\omega^2} \int_0^\infty v v'^2 \sigma_{sp}(v', \omega) [f(v') - f(v)] dv. \quad (1.5.16)$$

Из полученного равенства и явного вида модуля скорости v' вытекает, что для получения усиления излучения, когда коэффициент поглощения отрицателен $\alpha < 0$, необходимо выполнение условия:

$$\frac{\partial f}{\partial v} > 0. \quad (1.5.17)$$

Неравенство (1.5.17) должно иметь место в некотором конечном интервале скоростей, тогда (1.5.17) является необходимым, но, вообще говоря, недостаточным условием отрицательности поглощения. Если в качестве $f(v)$ использовать максвелловскую функцию (1.5.3), то в указанном скоростном интервале температура должна быть отрицательной, т. е. иметь место инверсия населенностей электронов в непрерывном энергетическом спектре.

В случае изотропного распределения электронов по скоростям достижение отрицательного поглощения существенно облегчается. Рассмотрим простейший пример такого рода, когда функция распределения

$$f(\mathbf{v}) = N_e \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0). \quad (1.5.18)$$

Тогда (1.5.13) переписывается как

$$\alpha = \frac{N_e N_c v_0}{j} \sigma_{tot}(v_0, \theta), \quad (1.5.19)$$

где $\sigma_{tot}(v_0, \theta) = \sigma_a(v_0, \theta) - \sigma_e(v_0, \theta)$. Существенно, что моноэнергетический электронный пучок (1.5.18) инвертирован по отношению к состояниям с энергией, меньшей $E_0 = v_0^2/2$. Знак коэффициента поглощения определяется знаком полного сечения электрон-фотонного взаимодействия $\sigma_{tot}(v_0, \theta)$. Приведем результаты анализа сечения $\sigma_{tot}(v_0, \theta)$, как функции угла θ и модуля скорости v_0 . Рассмотрим простейший случай рассеяния быстрого электрона на кулоновском центре, в условиях справедливости борновского приближения. Критерий отрицательности поглощения тогда имеет вид:

$$\cos(\theta) > \sqrt{\ln\left(\frac{2}{\xi}\right) \left[3 \ln\left(\frac{2}{\xi}\right) - 2\right]^{-1}} \approx \frac{1}{\sqrt{3}}. \quad (1.5.20)$$

Для применимости (1.5.20) предполагается, что параметр $\xi = \omega/E_0$ много меньше единицы. Таким образом, в случае направленного движения электронов при их рассеянии на кулоновских центрах возможно достижение отрицательного поглощения (т. е. усиления) электромагнитного поля. Оценка величины соответствующего коэффициента показывает, что он, будучи весьма мал для оптических частот, может иметь заметную величину в далеком инфракрасном и СВЧ диапазоне.

В заключение данной главы приведем еще один пример распределения электронов по скоростям, который имеет место при воздействии достаточно короткого и мощного лазерного импульса на холодную плазму [7]. В этом случае кинетическая энергия свободных электронов в основном определяется их колебаниями в поле электромагнитной волны, а тепловой энергией можно пренебречь. Тогда для зависимости скорости электронов от времени имеем:

$$v(t) = -\frac{F_0}{\omega} \sin(\omega t) = v_0 \sin(\omega t). \quad (1.5.21)$$

С помощью (1.5.21) можно найти функцию распределения электронов по скоростям. Действительно, вероятность нахождения электрона во временном интервале dt за четверть периода колебания составляет $4 dt/T$. В дальнейшем значения модуля скорости будут повторяться. Поэтому функция распределения электронов по времени dW/dt есть постоянная $4/T$, откуда для функции распределения электронов по

скоростям находим:

$$f(v) = \frac{dW}{dt} \frac{dt}{dv} = \frac{2}{\pi \sqrt{v_0^2 - v^2}}. \quad (1.5.22)$$

Функция (1.5.22) удовлетворяет нормировке

$$\int_0^{v_0} f(v) dv = 1.$$

Она позволяет рассчитывать взаимодействие электронов с атомами и ионами в полной аналогии с методикой, применяемой для плазмы с заменой температурного распределения Максвелла на распределение электронов по скоростям в гармоническом поле лазерного излучения.

Литература

1. Андреев А.В., Емельянов В.И., Ильинский Ю.А. Коллективное спонтанное излучение (сверхизлучение Дике) // УФН. 1980. Т. 131. С. 653–694.
2. Бункин Ф.В., Федоров М.В. Тормозной эффект в сильном поле излучения // ЖЭТФ. 1965. Т. 49. С. 1215–1221.
3. Берсон И.Я. Квазиклассическое приближение для вынужденного тормозного излучения // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. С. 1727–1736.
4. Астапенко В.А. Резонансные процессы в электромагнитном поле. – М.: Изд. МФТИ, 2007.
5. Астапенко В.А., Лисица В.С. Столкновительные процессы в низкотемпературной плазме. – М.: Изд. МФТИ, Москва, 2007.
6. Астапенко В.А., Лисица В.С. Радиационные процессы в низкотемпературной плазме. – М.: Изд. МФТИ, Москва, 2008.
7. Головинский П.А. Приближение мгновенно-го удара в задачах о возбуждении атомов при столкновении с электронами в поле лазерного излучения // Письма в ЖТФ. 1992. Т. 18. С. 82–85.

Глава 2

Приближенные методы и качественные модели

2. 1. Статистическая модель атома

Одним из ключевых при расчете структуры и различных процессов в сложных атомах является приближение Хартри—Фока. Приближение Хартри—Фока становится довольно трудоемким для расчета атомных структур с ростом числа атомных электронов. В то же время, именно для описания многоэлектронных атомов 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 приведем здесь 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, позволяющая описать многие свойства сложных атомов и ионов на единой основе. К таким свойствам относятся потенциалы взаимодействия атомов с заряжен-

ными частицами, сечения фотоионизации атомов, их статические и динамические поляризуемости, и другие параметры.

В последние годы интерес к плазменным моделям возрос в связи с интенсивными исследованиями новых каналов излучения при столкновениях атомов с заряженными (а в ряде случаев и нейтральными) частицами. Эти каналы обусловлены динамической поляризацией атомного (или ионного) остова, приводящей к его излучению при столкновениях, так называемому поляризационному излучению. Именно в таких процессах проявляются плазменные свойства атомов. Следует отметить, что плазменные модели атома являются в своей основе классическими, что связано с тем обстоятельством, что большинство плазменных электронов в сложном атоме занимает, подчиняясь принципу Паули, состояния с большими значениями орбитального момента. В этом смысле свойства атомного электронного сгустка могут рассматриваться на основе тех же подходов, которые применимы к флуктуациям в плазме, в частности, к расчету динамических свойств электронной «шубы», экранирующей кулоновское поле вокруг иона в плазме.

Распределение Томаса—Ферми для многоэлектронного атома можно получить, следуя работам А.В. Виноградова с сотрудниками [1, 2], из решения самосогласованных уравнений Власова, традиционно использующихся в физике плазмы. Соответствующая система уравнений имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{p} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \nabla U \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0, \quad (2.1.1)$$

$$\Delta U = 4\pi [Z \delta(\mathbf{r}) - n(\mathbf{r})], \quad (2.1.2)$$

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p}. \quad (2.1.3)$$

Здесь $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ – 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 (2.1.1) может быть представлено в виде

$$f_0(r, p) = \frac{2}{(2\pi)^3} \theta(E_F - E), \quad E = p^2/2 + \varphi(r). \quad (2.1.4)$$

При записи (2.1.4) было учтено наличие энергии Ферми для вырожденного электронного газа атомных электронов, подчиняющихся принципу Паули. Подстановка (2.1.4) в формулы (2.1.1) – (2.1.3) дает распределение Томаса–Ферми

$$n_0(r) = \frac{p_F^3}{3\pi^2}, \quad p_F(r) = \sqrt{2(E_F - \varphi(r))}, \quad (2.1.5)$$

$$E_F - \varphi(r) = \frac{Z}{r} \chi\left(\frac{r}{r_{TF}}\right), \quad r_{TF} = \frac{b}{\sqrt[3]{Z}}, \quad b = \sqrt[3]{\frac{9\pi^2}{128}} \cong 0.8853. \quad (2.1.6)$$

Здесь $\chi(x)$ – 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 (2.1.5), (2.1.6) имеем распределение электронной плотности атома Томаса–Ферми:

$$n_{TF}(r) = Z^2 f_{TF}(x = r/r_{TF}), \quad (2.1.7)$$

где введена функция безразмерного расстояния до ядра

$$f_{TF}(x) = \frac{1}{4\pi b^3} \left(\frac{\chi(x)}{x}\right)^{3/2}. \quad (2.1.8)$$

Представление электронной плотности в форме (2.1.7) является общим для всех статистических моделей. От вида модели зависит конкретный вид функции $f(x)$. В оригинальном подходе, предложенном Томасом и Ферми, функция $\chi(x)$, определяющая атомный потенциал в рамках статистического подхода, является решением дифференциального уравнения Томаса–Ферми. Это уравнение также может быть получено в результате решения вариационной задачи на минимум энергии многоэлектронного атома, выраженной через функцию распределения электронов. Ленц и Иенсен для решения вариационной задачи предложили использовать метод Ритца, в котором искомая функция представляется в виде суперпозиции подходящим образом выбранных функций f_i с коэффициентами, определяемыми из условия минимума функционала энергии. Достоинство этого подхода связано с тем, что функции f_i можно выбрать так, чтобы их поведение на больших расстояниях было бы близко к точной зависимости,

следующей из решения квантовомеханической задачи. Тогда для $f(x)$ в первом приближении получается следующее выражение:

$$f_{LJ}(x) \cong 3.7 e^{-\sqrt{9.7x}} \frac{(1 + 0.26 \sqrt{9.7x})^3}{(9.7x)^{3/2}}. \quad (2.1.9)$$

Отметим, что для $x \leq 1$ (2.1.8) и (2.1.9) дают практически совпадающий результат, но при больших x функция Ленца—Иенсена приводит к более реалистичному уменьшению электронной плотности атома с расстоянием, чем функция Томаса—Ферми. Последнее обстоятельство связано с вышеупомянутым выбором функций разложения f_i .

Наиболее простая статистическая модель соответствует экспоненциальному уменьшению электронной плотности на радиусе Томаса—Ферми. В этом случае

$$f_{\text{exp}}(x) = \pi^{-1} b^{-3} \exp(-2x). \quad (2.1.10)$$

Такая модель атомного остова (2.1.7), (2.1.1) используется при рассмотрении взаимодействия электромагнитного поля с атомами в составе твердых тел.

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

$$P_\gamma(r) = \sqrt{\frac{(2\beta)^{2\mu+1}}{\Gamma(2\mu+1)}} r^\mu e^{-\beta r}, \quad (2.1.11)$$

где $\gamma = (nl)$ – набор квантовых чисел, характеризующих электронное состояние, β, μ – слэтеровские параметры. Волновые функции (2.1.12) нормированы, имеют правильную асимптотику на больших расстояниях. Основное достоинство функций (2.1.12) заключается в их простоте и удобстве при численных и аналитических расчетах.

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

$$\beta_\gamma = \frac{Z - S_\gamma}{\mu_\gamma}. \quad (2.1.12)$$

Таблица 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

Здесь 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 1.

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

$$\mu = \text{ближайшее полуцелое к } Z / \sqrt{2|E|}, \quad \beta = \mu^2 |E| / Z, \quad (2.1.13)$$

где E – энергия электронного состояния в атомных единицах.

С помощью функций (2.1.12) может быть получено радиальное распределение электронной плотности атома в слэтеровском приближении в виде

$$\rho(r) = \sum_{\gamma} N_{\gamma} P_{\gamma}^2(r). \quad (2.1.14)$$

Соответствующий этой электронной плотности атомный (слэтеровский) потенциал

$$U_S(r) = -\frac{\zeta_S(r)}{r}. \quad (2.1.15)$$

Здесь $\zeta_S(r)$ – эффективный заряд остова:

$$\zeta_S(r) = Z - \int_0^r \rho(r') dr' - r \int_r^\infty \frac{\rho(r')}{r'} dr'. \quad (2.1.16)$$

Можно убедиться, что потенциал (2.1.15), (2.1.16) удовлетворяет электростатическому уравнению Пуассона с граничными условиями

$$\zeta_S(0) = Z, \quad \zeta_S(\infty) = Z_i, \quad (2.1.17)$$

где Z_i – заряд иона, равный нулю для нейтрального атома. Подставляя в (2.1.16) формулы (2.1.12), (2.1.14) и производя интегрирование, находим:

$$\zeta_S(r) = Z - \sum_{\gamma} N_{\gamma} \left[1 - e^{-2\beta r} \sum_{k=0}^{2\mu-1} \frac{2\mu-k}{2\mu} \frac{(2\beta r)^k}{k!} \right]_{\gamma}. \quad (2.1.18)$$

Итак, выражения (2.1.15), (2.1.18) дают атомный потенциал в приближении Слэтера.

На рис. 2.1 приведена радиальная электронная плотность атома криптона, вычисленная в рамках различных приближений. Видно, что статистическая модель Ленца—Иенсена (2.1.7), (2.1.9) сглаженным образом передает квантово-механическую зависимость, полученную в приближении Хартри—Фока, не учитывая особенностей, связанных с оболочечной структурой атома. Модель Слэтера до некоторой степени улавливает радиальные колебания электронной плотности особенно в области малых расстояний до ядра.

Функция Томаса—Ферми $\chi(x)$, определяющая потенциал и электронную плотность атома в модели Томаса—Ферми, как отмечалось, 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:

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

$$z(x) = \left(\frac{x}{\sqrt[3]{144}} \right)^{\lambda_2}, \quad z_0(q) = \left(\frac{x_0(q)}{\sqrt[3]{144}} \right)^{\lambda_2}, \quad (2.1.19)$$

$q = Z_i/Z$ – 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, напри-

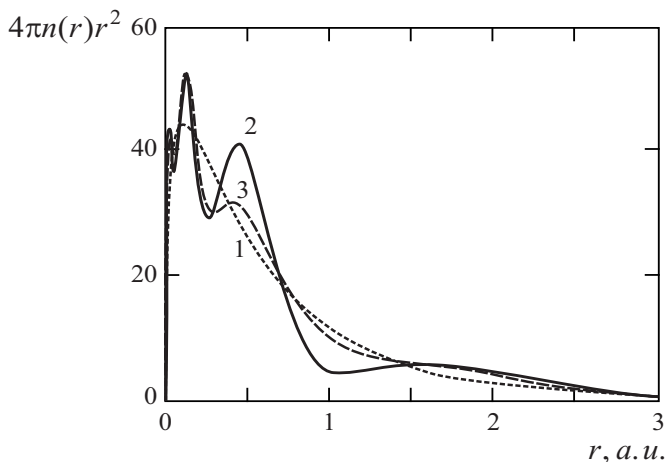


Рис. 2.1. Радиальная плотность электронного остова атома криптона, вычисленная в рамках различных моделей: 1 – Ленца–Иенсена, 2 – Хартри–Фока, 3 – Слэтера

мер, следующее выражение:

$$\chi_0(x) = \frac{1}{(1+z(x))^{\lambda_1/2}}. \quad (2.1.20)$$

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 (2.1.19), (2.1.20). Для достаточно больших степеней ионизации хороший результат дает аппроксимация приведенного радиуса иона, полученная в модели Томаса–Ферми–Дирака:

$$x_0(q) = 2.96 \left(\frac{1-q}{q} \right)^{2/3}, \quad 0.2 < q \leq 1. \quad (2.1.21)$$

Модель Томаса–Ферми–Дирака обобщает приближение Томаса–Ферми с учетом 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 формально равен бесконечности. В приближении Томаса–Ферми–Дирака

справедливо соотношение:

$$x_0 (q = 0) \approx 4 \cdot Z^{0.4}. \quad (2.1.22)$$

Как видно из этого выражения, приведенный радиус атома заметно возрастает с ростом заряда ядра. В то же время размерный радиус атома ($R_0 = x_0 r_{TF}$) от заряда ядра практически не зависит. Действительно, с учетом (2.1.6) имеем: $R_0 \propto Z^{1/15}$.

Приближение Томаса—Ферми (2.1.19) удобно использовать при расчете сечений элементарных процессов в плазме, усредненных по состоянию ионизационного равновесия. Для более ясного понимания связи оболочечной модели атома с распределением Томаса—Ферми полезно рассмотреть его вывод, основанный на квазиклассическом приближении для волновых функций электронов в самосогласованном поле [3]. Оригинальный подход, предложенный еще Ферми, основывается на модели квазигомогенного электронного газа, в котором электроны двигаются в общем, самосогласованном поле, создаваемом ядром и другими электронами и которое удовлетворяет уравнению Пуассона для потенциала V :

$$\Delta V = -4\pi\rho, \quad (2.1.23)$$

где ρ — плотность электронов в данной точке. При этом распределение электронов в пространстве подчиняется статистике Ферми. Хотя этот путь быстро приводит к конечному результату, он с самого начала игнорирует оболочечную структуру атома.

Уравнение (2.1.23) является приближенным и описывает истинный потенциал, усредненный по движению электронов. Стационарное уравнение Шредингера с такой усредненной потенциальной энергией имеет вид

$$\Delta\psi + 2(E - V)\psi = 0. \quad (2.1.24)$$

Если пренебречь особенностями, возникающими в незаполненных оболочках атомов, то потенциальную энергию можно считать сферически-симметричной. Решение в сферически-симметричном потенциале можно найти, отделяя угловую зависимость в виде

$$\psi_{nlm} = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm}, \quad (2.1.25)$$

где Y_{lm} – сферические функции. Плотность электронов в заполненных оболочках равна

$$\rho = 2 \sum_{nlm} |\psi_{nlm}|^2 = 2 \sum_{nlm} \frac{u_{nl}^2}{r^2} |Y_{lm}|^2, \quad (2.1.26)$$

где коэффициент 2 учитывает заполнение состояний с противоположно направленными спинами электронов. Суммирование по m с учетом соотношения для сферических функций

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \quad (2.1.27)$$

приводит к выражению

$$\rho(r) = 2 \sum_{nl} \frac{u_{nl}^2}{r^2} \cdot \frac{2l+1}{4\pi}. \quad (2.1.28)$$

Учтем далее, что в квазиклассическом приближении радиальные волновые функции $u_{nl}(r)$ можно непосредственно выразить через потенциальную энергию [4]:

$$u_{nl}(r) = \frac{a_{nl}}{\sqrt{p_{nl}}} \cos \left(\int_{r_1}^r p_{nl}(r') dr' - \frac{\pi}{4} \right), \quad (2.1.29)$$

где

$$\frac{p_{nl}^2}{2} = E_{nl} - V(r) - \frac{(l+1/2)^2}{2r^2}, \quad (2.1.30)$$

а нормировочная константа a_{nl} определяется из условия нормировки

$$\int u_{nl}^2(r) dr = 1. \quad (2.1.31)$$

Заменив квадрат косинуса его средним значением $1/2$, перепишем условие нормировки (2.1.31) в виде

$$\frac{a_{nl}^2}{2} \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{p_{nl}(r)} = \frac{a_{nl}^2}{2} \cdot \frac{T}{2} \approx 1, \quad (2.1.32)$$

где T – период классического движения, r_1 и r_2 – точки поворота.

Уровни энергии находятся из правила квантования Бора

$$\int_{r_1}^{r_2} p_{nl}(r) dr = (n + 1/2)\pi. \quad (2.1.33)$$

Если продифференцировать выражение (2.1.33) по n , то получим

$$\pi = \frac{dE_{nl}}{dn} \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{p_{nl}(r)} = \frac{dE_{nl}}{dn} \cdot \frac{T}{2}. \quad (2.1.34)$$

Из уравнений (2.1.32) и (2.1.34) следует нормировка

$$a_{nl}^2 \approx \frac{2}{\pi} \frac{dE_{nl}}{dn}. \quad (2.1.35)$$

Отметим, что при $l = 0$ вместо $n + 1/2$ в соотношении (2.1.33) нужно написать n , поскольку в этом случае левая точка поворота $r_1 = 0$ является особой точкой и в ее окрестности потенциал нельзя заменить прямой линией. Теперь с учетом (2.1.28) и (2.1.29) получим

$$\rho(r) = \frac{1}{2\pi} \sum_{nl} \frac{a_{nl}^2}{p_{nl} r^2} (2l + 1) \cos^2 \left(\int_{r_1}^r p_{nl}(r') dr' - \frac{\pi}{4} \right). \quad (2.1.36)$$

Заменяя снова значение квадрата косинуса на его среднее значение $1/2$, получим для сглаженной электронной плотности

$$\rho(r) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{nl} \frac{\partial E_{nl}}{\partial n} \cdot \frac{2l + 1}{r^2} \cdot \frac{1}{p_{nl}(r)}. \quad (2.1.37)$$

Здесь мы учли также нормировку (2.1.35). Перейдем от суммирования по n к интегралу по энергии. Тогда

$$\begin{aligned} \sum \frac{dE_{nl}}{dn} \cdot \frac{1}{p_{nl}(r)} &\approx \int \frac{dE_{nl}}{dn} \cdot \frac{dn}{p_{nl}(r)} = \int \frac{dE_{nl}}{p_{nl}(r)} = \int \frac{dE}{\sqrt{2(E - V_l(r))}} = \\ &= \sqrt{2(E - V_l(r))} \Big|_{E_{\min}}^0, \end{aligned} \quad (2.1.38)$$

где $E_{\min} = V_l$. Поэтому выражение (2.1.37) теперь можно записать в виде

$$\rho(r) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_l \frac{2l + 1}{r^2} \sqrt{-2V_l}. \quad (2.1.39)$$

Поскольку $V_l = V + \frac{1}{2\pi^2}(l + \frac{1}{2})^2$, то $2 \cdot dV_l/dl = (2l + 1)/r^2$ и

$$\rho(r) = \frac{1}{\pi} \int \frac{dV_l}{dl} \sqrt{-V_l} = \frac{1}{\pi^2} \int \sqrt{-2V_l} dV_l = -\frac{2}{3 \cdot 2\pi^2} (-2V_l)^{3/2} \Big|_{V_{\min}}^{V_{\max}}. \quad (2.1.40)$$

V_{\min} соответствует $l = 0$ и $V_{\min} = V$, а $V_{\max}(r) \approx 0$ в области, где существуют связанные состояния. При больших значениях l точка r находится в классически недоступной области за исключением некоторых d и f состояний, которые мы обсудим позднее в связи с проблемой коллапса волновых функций электрона в атоме. В итоге

$$\rho(r) = \frac{1}{3\pi^2} (-2V)^{3/2}, \quad (2.1.41)$$

что позволяет, обозначая потенциал $-V \equiv \varphi$, записать уравнение Пуассона (2.1.23) в виде

$$\Delta\varphi = C\varphi^{3/2}, \quad (2.1.42)$$

где $C = 8\sqrt{2}/3\pi$. Это и есть уравнение Томаса—Ферми.

При $r \rightarrow 0$ $\varphi \rightarrow Z/r$ — потенциал ядра. Замена $\varphi(r) = Z\chi(r)/r$ приводит с использованием сферических координат уравнение (2.1.42) к виду

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{x}}\chi^{3/2}, \quad (2.1.43)$$

где $x = \alpha Z^{1/3} r$, с дополнительными граничными условиями

$$\chi(\infty) = 0, \quad \chi(0) = 1. \quad (2.1.44)$$

Первое из граничных условий означает убывание потенциала на бесконечности. Второе условие соответствует переходу в потенциал атомного ядра на малых расстояниях. Уравнение (2.1.43) легко решается численно. Существуют и различные приближенные аналитические выражения для решения уравнения (2.1.43), описанные выше. Еще одним и часто используемым является приближение Титца:

$$\chi(x) = [a/(a+x)]^2, \quad (2.1.45)$$

где $a = 1.7566$. Это решение найдено вариационным методом.

2. 2. Борновское и квазиклассическое приближения

Для описания столкновения электронов с атомами и ионами часто используется борновское приближение, которое соответствует использованию волновых функций непрерывного спектра в виде плоских волн при расчете количественных характеристик процесса с участием делокализованных частиц. Это означает, что 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

$$\frac{\Delta E}{E} \ll 1. \quad (2.2.1)$$

Здесь E и ΔE – начальная энергия и изменение энергии электрона. Если же процесс рассеяния электрона происходит в дальнодействующем, например, кулоновском поле, то вместо (2.2.1) имеем неравенство:

$$Z/v_i \ll 1, \quad (2.2.2)$$

где Z – заряд кулоновского центра, v_i – начальная скорость электрона. Таким образом, из (2.2.1) и (2.2.2) следует, что борновское приближение справедливо либо вдали от порога рассматриваемого процесса при рассеянии в короткодействующем потенциале, либо для достаточно быстрых заряженных частиц в случае кулоновского поля. Тогда действие рассеивающего потенциала на электрон можно рассматривать как возмущение. Борновское приближение соответствует применению теории возмущений при расчете сечений рассеяния частиц, когда в нулевом порядке используются волновые функции свободного движения.

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

$$f = -\frac{1}{2\pi} \int U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (2.2.3)$$

где \mathbf{q} – изменение волнового вектора частицы при рассеянии. Зная амплитуду процесса f , можно вычислить сечение по стандартной формуле [4].

Аналогично получается сечение столкновительного возбуждения атома в дискретном спектре $|\gamma\rangle \rightarrow |\gamma'\rangle$ в борновском приближении в виде

$$\sigma_{\gamma\gamma'} = \frac{8\pi}{v_i^2} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} |\langle\gamma'| e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} |\gamma\rangle|^2 \frac{dq}{q^3}, \quad (2.2.4)$$

где q_{\min} и q_{\max} – минимальное и максимальное значения модуля переданного импульса, разрешенные законами сохранения.

При рассеянии электронов на атомах и ионах с зарядом ядра $Z \geq 30$ борновское приближение справедливо практически только для релятивистских энергий, поскольку левая часть неравенства (2.2.2) должна быть меньше 0.3. В противном случае данный подход, например для тормозного излучения, существенно завышает сечение процесса, особенно в области малых частот. Как отмечалось выше, борновское приближение соответствует описанию волновой функции в виде плоской волны, когда распределение вероятности в обычном трехмерном пространстве есть величина постоянная. Это значит, что описание идет в пространстве импульсных состояний, для которых отсутствует понятие траектории движения частицы. Борновское приближение является существенно квантово-механическим методом в теории столкновительно-излучательных процессов.

В противоположном случае малых скоростей налетающих частиц в ряде задач может быть использовано 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. Так же и квазиклассическое приближение в квантовой механике применимо для потенциалов, слабо изменяющихся на длине волны де Бройля λ рассматриваемой частицы. Это условие для случая одномерного движения может быть представлено в

виде неравенства

$$\left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1, \quad \lambda(x) = \frac{1}{\sqrt{2(E - U(x))}}. \quad (2.2.5)$$

При выполнении условия (2.2.5) волновая функция квазиклассической системы представима в виде

$$\psi = e^{i\sigma}, \quad \sigma = \sigma_0 + \frac{1}{i}\sigma_1 + \left(\frac{1}{i}\right)^2 \sigma_2 + \dots, \quad (2.2.6)$$

где второе равенство представляет собой разложение действия в степенной ряд. После подстановки (2.2.6) в уравнение Шредингера в первом приближении можно получить:

$$\sigma_0 = \pm \int p(x) dx, \quad p(x) = \sqrt{2(E - U(x))}, \quad (2.2.7)$$

откуда следует, что главный член разложения (2.2.6) представляет собой не что иное, как не зависящую от времени часть классического действия.

Квазиклассические волновые функции характеризуются большой величиной их 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 (2.2.2) [4]:

$$Z/v_i > 1. \quad (2.2.8)$$

Заметим, что случай плазмы, находящейся в состоянии теплового равновесия, соответствует формуле (2.2.8). 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

$$32.6 E [\text{кэВ}] \leq Z^{4/3}. \quad (2.2.9)$$

Для квазиклассики, в противоположность борновскому приближению, имеет смысл понятие траектории частицы. Так, например, при рассмотрении тормозного излучения вводится понятие сублинии, т. е. излучение идет с траектории, характеризующейся фиксированным прицельным параметром ρ . Критерий квазиклассичности сублинии имеет

вид:

$$\rho v_i \approx \sqrt{l(l+1)} \approx l + 1/2 \gg 1, \quad (2.2.10)$$

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

2.3. Метод эквивалентных фотонов

В процессах радиационных столкновений мы имеем дело в общем случае с исключительно сложной задачей, поскольку кроме излучения или поглощения фотонов может меняться траектория сталкивающихся частиц и их внутреннее состояние, если сталкивающиеся частицы имеют сложную структуру. В связи с этим большой интерес представляют практически важные случаи, когда в задаче возможны физически оправданные упрощения. Таким примером может служить столкновение с бесструктурной быстро движущейся заряженной частицей, изменение энергии которой в процессе столкновения относительно мало по сравнению с ее начальной кинетической энергией. Тем самым классическая траектория движения такой быстрой заряженной частицы может считаться заданной, а ее взаимодействие с мишенью можно описать классическим электромагнитным полем. В качестве бесструктурной частицы могут выступать быстрые многозарядные ионы, атомные ядра и быстрые электроны.

Если заряженная частица движется с релятивистской скоростью, то компонента ее электрического поля F_{\perp} , перпендикулярная скорости в $1/(1 - v^2/c^2)$ раз больше параллельной компоненты F_{\parallel} , т. е. поле быстрой заряженной частицы является почти поперечным, как и поле световой волны. Это наблюдение позволило Ферми (1924 г.) рассмотреть электромагнитное взаимодействие мишени с быстрой заряженной частицей как взаимодействие с потоком эквивалентных фотонов [5]. В то же время оказывается, что метод эквивалентных фотонов можно с успехом использовать и в нерелятивистской области

скоростей, если применимо дипольное приближение для взаимодействия мишени с заряженной частицей [6]. В методе эквивалентных фотонов резонансные процессы описываются как процессы поглощения эквивалентных фотонов на частоте рассматриваемого перехода. В нерезонансных процессах энергия эквивалентных фотонов не поглощается непосредственно, а участвует в виртуальных переходах частиц. Примером такого процесса служит поляризационное тормозное излучение, которое можно рассматривать как нерезонансное рассеяние эквивалентных фотонов электронами мишени, и тогда оно в нерезонансной области частот определяется нерезонансной поляризуемостью мишени.

Для применимости дипольного приближения необходимо, чтобы эффективное расстояние r_{eff} , на котором происходит неупругое столкновение налетающей частицы с мишенью, было значительно больше характерных размеров электронных оболочек мишени. Если мишенью является многозарядный ион, то для него размеры электронного облака имеют порядок $1/Z$, где Z – заряд иона. Для оценки эффективного расстояния столкновения воспользуемся принципом неопределенности Гейзенберга для времени

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim 1, \quad (2.3.1)$$

где ΔE – переданная при столкновении энергия, Δt – время соударения. Время соударения можно оценить через скорость соударения как

$$\Delta t \approx r_{eff}/v. \quad (2.3.2)$$

В свою очередь в области столкновения атома с однократно заряженной частицей кинетическая энергия сопоставима с потенциальной и

$$v^2 \approx Z/r_{eff}. \quad (2.3.3)$$

С учетом соотношений (2.3.1), (2.3.2) и (2.3.3) получаем оценку

$$r_{eff} \sim (Z/\Delta E^2)^{1/3}. \quad (2.3.4)$$

В дипольном приближении взаимодействие между электронами иона и налетающей заряженной частицей с зарядом q можно записать в виде

$$V = q\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2/r_2^3, \quad (2.3.5)$$

где \mathbf{r}_1 – радиус-вектор электрона в поле, \mathbf{r}_2 – радиус вектор нелетающей частицы.

В многозарядном ионе характерная энергия возбуждения $\Delta E \approx Z$. Отсюда

$$r_{eff} \sim Z^{-1/3} \gg Z^{-1} \quad (2.3.6)$$

при больших Z , и дипольное приближение применимо. Фактически, взаимодействие между связанными электронами и нелетающей заряженной частицей заменяется процессами излучения и поглощения эквивалентных фотонов электронами, а соответствующие вероятности переходов определяются обычными дипольными матричными элементами.

Электрическое поле, создаваемое нелетающей нерелятивистской заряженной частицей в точке расположения иона $r = 0$, определяется выражением

$$\mathbf{F}(0, 1) = -q\mathbf{r}_2(t)/r_2^3(t), \quad (2.3.7)$$

где функция $\mathbf{r}_2(t)$ описывает классическую траекторию нелетающей частицы. Используя уравнение движения заряженной частицы можно вычислить спектральное распределение эквивалентных фотонов.

Если рассмотреть столкновение электрона с многозарядным ионом, то его классическое уравнение движения есть

$$\ddot{\mathbf{r}} = Z\mathbf{r}_2/r_2^3, \quad (2.3.8)$$

и уравнение (2.3.7) тогда удобно преобразовать к виду

$$\mathbf{F}(0, t) = \ddot{\mathbf{r}}_2(t)/Z. \quad (2.3.9)$$

Спектральное распределение потока эквивалентных фотонов, создаваемое полем нелетающего электрона можно выразить через фурье-преобразование поля (2.3.9)

$$I(\omega) = c[|F_x(\omega)|^2 + |F_y(\omega)|^2]/4\pi^2 = c\omega^4 Z^{-2}(x_\omega^2 + y_\omega^2)/4\pi^2, \quad (2.3.10)$$

где x и y – координаты нелетающего электрона в плоскости движения. Фурье-преобразование координат электрона, движущегося в кулоновском поле хорошо известно [7]:

$$x_\omega = \frac{\pi a}{\omega} H_{i\nu}^{(1)}(i\nu\varepsilon), \quad (2.3.11)$$

$$y_{\omega} = -\frac{\pi a \sqrt{\varepsilon^2 - 1}}{\omega \varepsilon} H_{i\nu}^{(1)}(i\nu \varepsilon),$$

где $a = Z/2E$, E – энергия налетающего электрона, $\varepsilon = \sqrt{1 + 2E v^2 \rho^2 / Z^2}$ – эксцентриситет, ρ – прицельный параметр, т.е. расстояние между центром рассеяния и линией движения электрона, удаленного от мишени на бесконечность до столкновения, $H_{i\nu}^{(1)}$ – функция Ганкеля 1-го рода ранга $i\nu$, $\nu = \omega/v^3$, (v – относительная скорость частиц на бесконечности). Тогда

$$I(\omega) = c\omega^2 v^{-4} \{ |H_{i\nu}^{(1)'}|^2 - [(\varepsilon^2 - 1)/\varepsilon^2] |H_{i\nu}^{(1)'}(i\nu \varepsilon)|^2 \} / 4. \quad (2.3.12)$$

Нами приведено соотношение для спектральной плотности эквивалентных фотонов при некотором заданном прицельном параметре ρ . Поскольку в реальных электронных потоках параметр ρ принимает любые значения с равной вероятностью, то для расчета наблюдаемых величин производится интегрирование по прицельному параметру.

Наиболее просто в методе эквивалентных фотонов можно рассчитать возбуждение многозарядного иона при столкновении с электроном. В таком подходе возбуждение многозарядного иона можно трактовать просто как поглощение эквивалентного фотона на резонансной частоте $\omega_0 = \Delta E_i$. Соотношение между сечением столкновения σ_{exc} и сечением поглощения эквивалентных фотонов можно получить, подсчитав количество событий, связанных с возбуждением иона электронами с пространственной концентрацией n_e и скоростью v за временной интервал dt : $dN_{exc} = n_e V_e \sigma_{exc} dt$, а затем, сравнив с количеством переходов, вызванных поглощением эквивалентных фотонов от всех электронов, пересекающих площадь расположения мишени за тот же временной интервал. Это число электронов есть $dN = (2\pi\rho d\rho) n v dt$ для узкого кольца толщиной $d\rho$.

С учетом этого

$$dN_{abs} = \int dN \int d\omega \left(\frac{c F_{\omega}^2}{4\pi^4 \omega} \right) \sigma_{abs}(\omega), \quad (2.3.13)$$

где выражение в фигурных скобках соответствует спектральному распределению потока эквивалентных фотонов, создаваемое одним электроном при заданном значении параметра столкновения ρ . Отсюда

$$\sigma_{exe} = \int 2\pi\rho d\rho \int d\omega \left(\frac{c F_{\omega}^2}{4\pi^4 \omega} \right) \sigma_{abs}(\omega). \quad (2.3.14)$$

Воспользовавшись квазиклассическим соотношением для момента количества движения

$$M = \rho v l + 1/2, \quad (2.3.15)$$

где l – орбитальное квантовое число, можно перейти от интегрирования по прицельному расстоянию ρ к интегрированию по dl :

$$\sigma_{exe} = \int \sigma_{exe}^l dl, \quad (2.3.16)$$

$$\sigma_{exe}^l = \frac{2\pi(l+1/2)}{v^2} \int \sigma_{abs}(\omega) \left(\frac{cF^2\omega}{4\pi^4\omega} \right) d\omega. \quad (2.3.17)$$

Зависимость потока эквивалентных фотонов от частоты значительно более плавная, чем зависимость от частоты сечения поглощения $\sigma_{abs}(\omega)$. Поэтому величину потока эквивалентных фотонов можно взять постоянной на частоте перехода $\omega = \omega_0$ и вынести в виде постоянного множителя за знак интеграла. Интегрирование сечения по частоте дает известное выражение [8]:

$$\int \sigma_{abs}(\omega) d\omega = \pi^2 (c/\omega)^2 g_f \times 4\omega_0^2 |d_{if}|^2 / 3c^3. \quad (2.3.18)$$

Подставляя спектральное распределение (2.3.12) в формулу (2.3.13)) с учетом уравнения (2.3.18) получим

$$\sigma_{exe}^l = \frac{8\pi^3\omega_0^2}{3v^6} |d_{if}|^2 g_f (l+1/2) \{ |H_{iv}^{(1)'}(iv\varepsilon)|^2 - (\varepsilon^2 - 1)\varepsilon^{-2} |H_{iv}^{(1)'}(iv\varepsilon)|^2 \}. \quad (2.3.19)$$

При больших значениях параметра $\nu = \omega/v^3 \gg 1$ можно упростить выражение (2.3.19) и просуммировать парциальные сечения в формуле (2.3.16). В результате получается выражение:

$$\sigma_{exe} = (8\pi^2/\sqrt{3}) |d_{if}|^2 g_i^{-1} v^{-2} g(Z\omega_0/(2E)^{3/2}), \quad (2.3.20)$$

где функция $g(\nu)$ – есть известный в теории тормозного излучения при кулоновском рассеянии частиц так называемый фактор Гаунта (Gaunt-factor). Функция $g(\nu)$ имеет простую аппроксимацию:

$$g(\nu) \approx (\sqrt{6}/\pi) \ln[(2/\gamma\nu)^{1/\sqrt{2}} + e^{\pi/\sqrt{6}}]. \quad (2.3.21)$$

Здесь $\gamma = 1,78\dots$ – константа Эйлера. Формула имеет точность 2.5%. Она дает результаты, хорошо согласующиеся с численными квантово-механическими расчетами и экспериментальными данными. Об этом

свидетельствует сравнение сечения возбуждения, рассчитанного по формуле (2.3.20), с результатами расчета методом сильной связи каналов. Наблюдаемое хорошее согласие позволяет рекомендовать формулу (2.3.20) как эффективное расчетное средство для дипольно-разрешенных переходов.

Метод эквивалентных фотонов оказался весьма плодотворным при описании поляризационного тормозного излучения и поляризационной рекомбинации. Они представляют собой дополнительные каналы излучения при рассеянии заряженных частиц на мишенях с электронным остовом, обусловленные его динамической поляризацией полем налетающей частицы. Столкновительное возбуждение и ионизация атома рассматривались Ферми как поглощение эквивалентных фотонов собственного поля налетающей частицы. Аналогично, поляризационное тормозное излучение и поляризационная рекомбинация могут быть интерпретированы как рассеяние эквивалентных фотонов на электронах атома (иона) с преобразованием в реальный фотон. Разница между поляризационным тормозным излучением 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 такой интерпретации спектральная интенсивность поляризационного тормозного излучения $Q^{PB}(\omega)$ может быть выражена через сечение рассеяния света на атоме $\sigma_{scat}(\omega)$ следующим образом:

$$Q^{PB}(\omega) = \sigma_{scat}(\omega) I(\omega), \quad (2.3.22)$$

где $I(\omega)$ – плотность потока эквивалентным фотонам для заданного рассеяния налетающей частицы. В приближении прямопролетных траекторий выражение для $I(\omega)$ дается формулой (2.3.12). Если состояние мишени не изменяется, то сечение рассеяния $\sigma_{scat}(\omega)$, входящее в равенство (2.3.2), может быть представлено через динамическую поляризуемость атома $\alpha(\omega)$:

$$\sigma_{scat}(\omega) = \frac{8\pi\omega^4}{3c^4} |\alpha(\omega)|^2. \quad (2.3.23)$$

Из (2.3.22), (2.3.23) следует, что в рассматриваемом случае динамика атомных электронов полностью описывается поляризуемостью мишени.

Заметим, что формула (2.3.22) описывает поляризационное тормозное излучение 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 тормозное излучение может быть интерпретировано как комптоновское рассеяние эквивалентных фотонов, и для описания процесса возможно использование методов теории рассеяния рентгеновских лучей атомами. В заключение данного пункта отметим, что диэлектронная рекомбинация, представляющая собой захват электрона ионом посредством реального возбуждения электронного остова иона, может быть интерпретирована как резонансная флуоресценция эквивалентных фотонов.

2.4. Формулы Крамерса для вероятностей радиационных процессов

В условиях справедливости квазиклассического приближения дальнейшее упрощение описания радиационных процессов возможно в так называемой крамерсовской области частот. Эта область соответствует сильно искривленным траекториям движения электронов и для случая кулоновского поля определяется неравенством [6]

$$\omega > \omega_C = v_i^3/Z, \quad (2.4.1)$$

где ω_C – характерная частота орбитального движения электрона в кулоновском поле. Излучение частот (2.4.1) 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 (2.4.1) является тот факт, что в ней спектры излучения при свободно-свободных (тормозное излучение), свободно-связанных (фоторекомбинация) 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 всех трех вышеупомянутых типов радиационных переходов частотное распределение излучения дается одной универсальной функцией (ниже в данном разделе положено $Z = 1$) [6]:

$$F(\omega) = K_{2/3}^2(l^3 \omega/3) + K_{1/3}^2(l^3 \omega/3), \quad (2.4.2)$$

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 (2.4.2) нужно подставить разность энергий дискретных уровней $\omega = (1/2)(n^{-2} - n'^{-2})$, и для вероятности радиационного перехода имеет место формула

$$A_{nn'}^l = \frac{2l^4(n^2 - n'^2)}{9\pi^2 c^3 n^5 n'^5} F\left(\frac{1}{2n^2} - \frac{1}{2n'^2}\right). \quad (2.4.3)$$

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

$$\sigma_{nl} = \frac{8}{9} \frac{1}{c^3} \left(\frac{l}{n}\right)^5 \left(\frac{1}{p^2} + n^2\right) F\left(\frac{1}{2n^2} + \frac{p^2}{2}\right). \quad (2.4.4)$$

Здесь вид аргумента у функции F вытекает из закона сохранения энергии.

Для тормозного излучения физический интерес представляет сечение, просуммированное по угловому моменту:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{16\pi}{3\sqrt{3}} \frac{1}{c^3 p^2} \frac{1}{\omega}. \quad (2.4.5)$$

Выражение (2.4.5) представляет собой известную формулу Крамерса для спектрального сечения тормозного излучения. Аналогичное суммирование по орбитальному моменту выражений (2.4.3) и (2.4.4) дает формулы Крамерса для дискретных переходов и фоторекомбинации:

$$A_{nn'} = \frac{16}{3\sqrt{3}\pi c^3 n^3 n' (n^2 - n'^2)} , \quad (2.4.6)$$

$$\sigma_n = \frac{32\pi}{3\sqrt{3}} \frac{1}{c^3 p^4 n (n^2 + p^{-2})} . \quad (2.4.7)$$

Вероятность линейчатого излучения (2.4.6) может быть выражена через силу осциллятора $f_{nn'}$, играющую важную роль в физике радиационных процессов. Эта величина для начального s -состояния определяется в соответствии с равенством

$$f_{in} = 2\omega_{in} |\langle i | d_z | n \rangle|^2 , \quad (2.4.8)$$

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:

$$f_{nn'} = \frac{32}{3\sqrt{3}\pi} \frac{1}{n^2} \left[\frac{nn'}{n'^2 - n^2} \right]^3 . \quad (2.4.9)$$

Заметим, что сила осциллятора входит в выражение для динамической поляризуемости атома. Формула (2.4.9) 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.

2.5. Квазиэнергетическое приближение

При рассмотрении взаимодействия квантовых систем с лазерным полем мы часто имеем дело с достаточно интенсивным излучением,

когда взаимодействие можно описывать классическими потенциалами. Это допустимо, когда интенсивностью спонтанного излучения можно пренебречь на фоне интенсивности индуцированного излучения. Тем самым задача описания взаимодействия квантовой системы с полем электромагнитного излучения становится наполовину классической. Это является весьма существенным упрощением исходной задачи.

Другой важной особенностью поля лазерного излучения во многих случаях является его монохроматичность. Конечно, это в полной мере может относиться только к достаточно длинным импульсам, в то время как для ультракоротких импульсов с протяженностью в несколько длин волн спектр излучения очень широк. Однако, если рассматривать длинные импульсы, то гармоническая зависимость поля от времени значительно упрощает описание взаимодействия такого поля с атомными системами. Произвольную квантовую систему, взаимодействующую с внешним периодическим во времени полем, можно описать с помощью гамильтониана H , состоящего из гамильтониана свободной системы H_0 и оператора взаимодействия системы с внешним полем $V(t)$:

$$H = H_0 + V(t) . \quad (2.5.1)$$

Оператор взаимодействия с внешним полем периодичен во времени с периодом T . Из периодичности по времени оператора $V(t)$ следует и периодичность всего гамильтониана

$$H(t + T) = H(t) . \quad (2.5.2)$$

Такая симметрия относительно смещения во времени позволяет среди всех решений уравнения Шредингера

$$\tilde{H}\psi = 0, \tilde{H} = H - i\frac{\partial}{\partial t} \quad (2.5.3)$$

выделить подмножество волновых функций

$$\psi_\mu(\xi, t) = \exp(-i\varepsilon_\mu t) u_\mu(\xi, t) , \quad (2.5.4)$$

где $u_\mu(\xi, t)$ являются периодическими по времени функциями так, что

$$u_\mu(\xi, t + T) = u_\mu(\xi, t) . \quad (2.5.5)$$

Возможность замены (2.5.4), при которой сохраняется полный набор решений уравнения (2.5.3), определяется теоремой Флоке

(Floquet) [9]. Подстановка (2.5.4) в (2.5.3) приводит к уравнению на собственные функции

$$Hu_\mu = \varepsilon_\mu u_\mu, \quad (2.5.6)$$

в котором собственное значение ε_μ носит название квазиэнергии.

Функции образуют, полный набор в гильбертовом пространстве L^2 квадратично интегрируемых функций в некоторый момент времени t . Функции, относящиеся к разным квазиэнергиям, взаимно ортогональны. Действительно, рассмотрим разность двух скалярных произведений

$$\Delta = \int u_\mu^* \tilde{H} u_v d\xi - \int u_v^* \tilde{H} u_\mu. \quad (2.5.7)$$

В силу эрмитовости оператора H

$$\Delta = \langle v | \tilde{H} | \mu \rangle^* - \langle v | \tilde{H} | \mu \rangle = 0. \quad (2.5.8)$$

С другой стороны

$$\Delta = \langle \mu | v \rangle (\varepsilon_v - \varepsilon_\mu). \quad (2.5.9)$$

Отсюда следует, что при $\varepsilon_\mu \neq \varepsilon_v$

$$\int u_\mu^* u_v d\xi = \langle \mu | v \rangle = 0. \quad (2.5.10)$$

В гильбертовом пространстве квазиэнергетические функции u_μ можно ортонормировать на единицу, и тогда

$$\langle \mu | v \rangle = \delta_{\mu v}, \quad (2.5.11)$$

т. е. квазиэнергетические волновые функции образуют в каждый момент времени полный ортонормированный базис, который полностью учитывает действие внешнего периодического во времени поля.

Сама квазиэнергетическая волновая функция $\psi_\mu(\xi, t)$ является также периодической,

$$\psi_\mu(\xi, t + T) = \psi_\mu(\xi, t), \quad (2.5.12)$$

и как любая периодическая функция может быть разложена в ряд Фурье по времени t :

$$\psi_\mu(\xi, t) = \exp(-i\varepsilon_\mu^t) \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\mu(\xi) e^{-in\omega t}, \quad (2.5.13)$$

где функции $C_n^\mu(\xi) \exp(-i\varepsilon_\mu t)$ называются квазиэнергетическими гармониками. Если квазиэнергетическое состояние ψ_μ умножить на периодическую функцию $\exp(-in\omega t)$, то полученное состояние вновь будет обладать свойством периодичности (2. 5.12) и удовлетворять уравнению (2. 5.6) с квазиэнергией $\varepsilon_\mu + n\omega$. Физически состояния с квазиэнергиями, отличающимися на величину, кратную ω , неотличимы. Для однозначного определения ε_μ будем считать, что при адиабатическом выключении поля ε_μ стремиться к некоторому стационарному собственному значению гамильтониана H_0 квантовой системы без поля. При этом $C_n^\mu(\xi)$ стремится к волновой функции соответствующего стационарного состояния, а все остальные гармоники обращаются в нуль. Замкнутые аналитические выражения для квазиэнергии и квазиэнергетических состояний удается получить только для некоторых задач. К ним относятся движение свободного электрона в электромагнитном поле, двухуровневая система в квазирезонансном поле, гармонический осциллятор под действием периодического внешнего поля и некоторые другие.

Для системы с конечным числом уровней поиск квазиэнергий и квазиэнергетических состояний сводится к матричной алгебре. Разложим функции $C_n^\mu(\xi)$, входящие в выражение (2. 5.13), по невозмущенному полному базису волновых функций $\varphi_k(\xi)$, удовлетворяющих стационарному уравнению Шредингера

$$H_0\varphi_k(\xi) = \varepsilon_k^0\varphi_k(\xi). \quad (2. 5.14)$$

Тогда

$$C_n^\mu(\xi) = \sum_n b_n^{\mu k} \varphi_k(\xi), \quad (2. 5.15)$$

а волновую функцию $\psi_\mu(\xi, t)$ можно представить в виде

$$\psi_\mu(\xi, t) = \exp(-i\varepsilon_\mu t) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_k b_n^{\mu k} \varphi_k(\xi) \exp(-in\omega t). \quad (2. 5.16)$$

Подставляя функцию (2. 5.16) в нестационарное уравнение Шредингера (2. 5.3) и проектируя его на стационарные невозмущенные состояния φ_k , после отделения гармоник получим систему линейных уравнений

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_k \{ \langle k' | H^{(m-n)} | k \rangle - (\varepsilon_\mu + m\omega) \delta_{mn} \delta_{k'k} \} b_n^{\mu k} = 0, \quad (2. 5.17)$$

где введено обозначение

$$H(q) = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} H(t) \exp(iq\omega t) dt. \quad (2.5.18)$$

Система уравнений (2.5.18) представляет собой бесконечную систему линейных уравнений. Сумма по индексу n формально содержит бесконечное число слагаемых. Однако если $V \sim \cos \omega t$, т. е. возмущение происходит с определенной частотой, то отличными от нуля будут только матричные элементы $\langle k' | H^q | k \rangle$ с $q = 0, \pm 1$, причем $\langle k' | H | k \rangle = \varepsilon_k^0 \delta_{k'k}$. Из-за зацепления различных n в уравнениях (2.5.17) нужно решать систему уравнений с бесконечным набором $-\infty < n < \infty$. Для модели, содержащей конечное число уравнений, система (3.5.17) может быть решена. Это соответствует ограничению определенным количеством возможных поглощенных и излученных фотонов n . Вообще переход от исходного нестационарного уравнения Шредингера (2.5.8) к системе (2.5.17) придает исходной проблеме вид стационарной задачи многоканальной реакции. Для анализа задачи в такой постановке можно использовать методы многоканальной теории рассеяния [10] и стационарной теории возмущений [4].

Реальные физические задачи кроме дискретного спектра невозмущенной задачи содержат также непрерывный спектр. Это приводит к переходам не только между дискретными состояниями, но и между дискретным и непрерывным спектром, а также в непрерывном спектре. В результате такого перемешивания спектр квазиэнергий становится непрерывным. Однако, если ионизация системы не слишком велика, то ее можно описать, переходя к комплексным квазиэнергиям. В этом случае мнимая часть квазиэнергии соответствует вероятности распада связанного квазиэнергетического состояния. Наиболее наглядно это можно представить себе в многоканальной стационарной формулировке задачи, которая позволяет увидеть аналогию между квазиэнергетическими состояниями и квазиэнергетическими квазистационарными состояниями. Более подробное изложение различных свойств квазиэнергетических состояний и применение этого метода можно найти в [11].

2.6. Модель свободного электрона и двухуровневой системы

Для конкретного описания взаимодействия поля лазерного излучения с атомными системами и электронами требуется придать явный вид оператору взаимодействия $V(t)$ электромагнитного поля с электроном.

В классической теории поля функция Гамильтона электрона в электромагнитном поле имеет вид

$$H = \frac{1}{2} \left(\mathbf{p} + \frac{1}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \varphi, \quad (2.6.1)$$

где φ – скалярная потенциальная энергия, \mathbf{A} – векторный потенциал поля, \mathbf{p} – импульс частицы. При сохранении классического описания поля большой интенсивности переход к квантовому описанию осуществляется заменами функций операторами

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla, \quad H \rightarrow i\frac{\partial}{\partial t}. \quad (2.6.2)$$

Таким образом, уравнение Шрёдингера для заряженной частицы, движущейся во внешнем электромагнитном поле принимает вид

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{1}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi + V\psi. \quad (2.6.3)$$

Здесь и в дальнейшем мы не учитываем взаимодействие с внешним полем спинового момента электрона. Раскрывая квадрат $\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{A}/c$, получим

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + \frac{1}{2c} (\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) + \frac{1}{2c^2} \mathbf{A}^2 + V. \quad (2.6.4)$$

Коммутатор

$$[\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{A}] = -i \operatorname{div} \mathbf{A}. \quad (2.6.5)$$

Он равен нулю, если $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$, что, в частности, имеет место для плоской монохроматической волны. В этом случае

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + \frac{1}{c} \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} + \frac{1}{2c^2} \mathbf{A}^2 + V. \quad (2.6.6)$$

Дальнейших упрощений можно достичь, если рассматривать длинноволновое приближение, в котором длина волны λ электромагнитного излучения намного превышает характерные размеры области взаимодействия. Для плоской линейно-поляризованной монохроматической волны вектор-потенциал \mathbf{A} имеет вид

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{eA}_0 \cos(\mathbf{kr} - \omega t + \delta) = \mathbf{eA} \operatorname{Re} \exp[i(\mathbf{kr} - \omega t + \delta)]. \quad (2.6.7)$$

В длинноволновом или, как его чаще называют, дипольном приближении пренебрегают эффектами «запаздывания», т. е. заменяют экспоненциальную зависимость пространственного множителя

$$e^{i\mathbf{kr}} = 1 + i\mathbf{kr} + \dots \quad (2.6.8)$$

первым членом разложения в ряд, т. е. единицей. В дипольном приближении выражение для вектор-потенциала лазерного импульса не зависит от координат и принимает вид

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{eA}_0(t) \cos(\omega t + \delta) \quad (2.6.9)$$

для линейной поляризации, где $A_0(t)$ – огибающая лазерного импульса.

В результате, в так называемой «калибровки скорости» гамильтониан взаимодействия в дипольном приближении есть

$$\hat{V}(t) = -\frac{i}{c} \mathbf{A}(t) \nabla + \frac{1}{2c^2} \mathbf{A}^2(t). \quad (2.6.10)$$

В дипольном приближении используется также преобразованное выражение гамильтониана и волновой функции

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{c} \mathbf{A}(t) \mathbf{r}\right) \varphi(\mathbf{r}, t). \quad (2.6.11)$$

Такое преобразование не изменяет физически наблюдаемые величины вероятности. Матричные элементы между различными состояниями ψ также не изменяются, поскольку фазовый множитель в (2.6.11) одинаков для всех состояний и, следовательно, сокращается.

Подставляя (2.6.11) в уравнение (2.6.3), вычислим

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{c} \mathbf{A}(t) \mathbf{r}\right) \left[i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\mathbf{r}}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right] \psi, \quad (2.6.12)$$

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{c} \mathbf{A}(t) \mathbf{r}\right) \left[\nabla + \frac{i}{c} \mathbf{A}(t)\right] \psi, \quad (2.6.13)$$

и

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{c} \mathbf{A}(t) \mathbf{r}\right) \left[\nabla^2 + \frac{2i}{c} \mathbf{A}(t) \nabla - \frac{i}{c^2} A^2(t)\right] \psi. \quad (2.6.14)$$

С учетом связи напряженности электрического поля \mathbf{F} и вектора потенциала \mathbf{A} , т. е.

$$\mathbf{F} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (2.6.15)$$

получим

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + \mathbf{r} \mathbf{F}(t) + V(t) \right) \varphi. \quad (2.6.16)$$

Конечно, при получении уравнения (2.6.16) важным было отсутствие зависимости векторного потенциала \mathbf{A} от координат, т. е. дипольное приближение. Тем самым, гамильтониан взаимодействия электрона с полем в «форме длины» есть

$$\hat{V}(t) = \mathbf{r} \mathbf{F}(t). \quad (2.6.17)$$

Рассмотрим теперь движение электрона в поле электромагнитной волны со взаимодействием, выбранным в «калибровке скорости». Поскольку теперь $\varphi = 0$, то уравнение Шредингера имеет вид

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2} \left[-i \nabla + \frac{1}{c} \mathbf{A}(t) \right]^2 \psi. \quad (2.6.18)$$

Если искать решение уравнения (2.6.18) частного вида

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = e^{i \mathbf{p} \mathbf{r}} u_{\mathbf{p}}(t), \quad (2.6.19)$$

то получим обыкновенное дифференциальное уравнение для функции $u_{\mathbf{p}}(t)$:

$$i \dot{u}_{\mathbf{p}}(t) = \frac{1}{2} [\mathbf{p} - \frac{1}{c} \mathbf{A}(t)]^2 u_{\mathbf{p}}(t). \quad (2.6.20)$$

Отсюда, интегрируя уравнение (2.6.20) получим

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \exp\left\{i \mathbf{p} \mathbf{r} - \frac{i}{2} \int_0^t \left(\mathbf{p} - \frac{1}{c} \mathbf{A}(\tau)\right)^2 d\tau\right\}. \quad (2.6.21)$$

Для линейно поляризованного монохроматического поля положим $A_0 = \text{const}$. Тогда после подстановки в уравнение (2.6.20) будем иметь

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \psi_{\mathbf{p}}^0(\mathbf{r}, t) \exp \left(\frac{\mathbf{p} \mathbf{F}_0}{\omega^2} \sin \omega t - i \frac{F_0^2}{4\omega^2} \left(t + \frac{\sin 2\omega t}{2\omega} \right) \right), \quad (2.6.22)$$

где $\psi_{\mathbf{p}}^0(\mathbf{r}, t) = \exp\{i\mathbf{p}\mathbf{r} - p^2 t/2\}$ – стационарное решение уравнения Шредингера для свободной частицы без поля. Выражение (2.6.22) описывает квазиэнергетическое состояние, в котором в соответствии с определением квазиэнергии она равна

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2} + \frac{E^2}{4\omega^2}. \quad (2.6.23)$$

Решение уравнения для квазиэнергетического состояния электрона в переменном поле при выборе взаимодействия в «форме длины» получается из (2.6.22) путем подстановки (2.6.11) и

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \exp \left(i\mathbf{P}(t)\mathbf{r} - \frac{i}{2} \int_0^t \mathbf{P}^2(\tau) d\tau \right), \quad (2.6.24)$$

где $\mathbf{P}(t) = \mathbf{p} + \mathbf{A}(t)/c$.

Решения (2.6.21) и (2.6.24) для разных форм оператора взаимодействия электрона с переменным полем широко используются в разных задачах взаимодействия лазерного излучения с веществом и носят название волновых функций Волкова (Volkov wave functions). Наиболее часто волковские функции применяются в задачах о столкновении электронов и ионизации атомных систем.

Другим часто применяемым упрощением является модель двухуровневой системы. Хотя реальные квантовые системы практически всегда являются многоуровневыми, в условиях периодического внешнего воздействия близкого к резонансному наиболее существенным оказывается взаимовлияние уровней близких по частоте перехода с частотой внешнего воздействия. Пусть имеется два состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ с энергиями ε_1^0 , ε_2^0 при наличии периодического возбуждения с частотой

$$\omega = \varepsilon_2^0 - \varepsilon_1^0 - \delta, \quad (2.6.25)$$

которое можно представить в виде

$$\hat{V}(t) = V^{(-)} e^{-i\omega t} + V^{(+)} e^{i\omega t}, \quad V^{(-)} = V^{(+)*}. \quad (2.6.26)$$

Решение ψ нестационарного уравнения Шредингера можно искать в виде разложения по собственным функциям невозмущенного гамильтониана H_0 . В условиях близких к резонансным мы ограничимся двумя состояниями, для которых

$$H_0|1\rangle = \varepsilon_1^0|1\rangle, \quad (2.6.27)$$

$$H_0|2\rangle = \varepsilon_2^0|2\rangle$$

и

$$\psi = \sum_{n=1}^2 a_n(t) |n\rangle e^{-i\varepsilon_n t}. \quad (2.6.28)$$

Подставляя (2.6.28) в нестационарное уравнение Шредингера

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(H_0 + V^{(-)}e^{-i\omega t} + V^{(+)}e^{i\omega t}\right)\psi, \quad (2.6.29)$$

мы получим после проектирования на состояние m

$$i\frac{\partial a_m}{\partial t} = \sum_n [V_{mn}e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} + V_{mn}^*e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}]a_n, \quad V_{nm} = V_{nm}^{(-)}. \quad (2.6.30)$$

Наибольшее влияние на решение уравнения (2.6.30) оказывают те члены суммы в правой части уравнения, в которых зависимость коэффициентов от времени определяется малой частотой. Опуская остальные слагаемые, получим систему из двух линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами:

$$i\frac{\partial a_2}{\partial t} = V_{21}e^{i\delta t}a_1, \quad (2.6.31)$$

$$i\frac{\partial a_1}{\partial t} = V_{21}e^{-i\delta t}a_2.$$

Если сделать подстановку $a_1e^{i\delta t} = b_1$, получаем уравнения

$$i\dot{a}_2 = V_{21}b_1, \quad i(\dot{b}_1 - i\delta b_1) = V_{21}a_2. \quad (2.6.32)$$

Исключая из них a_2 , находим

$$\ddot{b}_1 - i\delta\dot{b}_1 + |V_{21}|^2 b_1 = 0 \quad (2.6.33)$$

с решением $b_i \sim e^{i\lambda_{1,2}t}$, где $\lambda_{1,2} = \delta/2 \pm \Omega$, а $\Omega = \sqrt{\delta^2/4 + |V_{21}|^2}$ – так называемая частота Раби. Два независимых решения дают два квазиэнергетических состояния

$$\psi_1(t) = A\{e^{-i\lambda_2 t - i\varepsilon_1^0 t} |1\rangle + \frac{\lambda_1}{V_{21}^*} e^{i\lambda_1 t - i\varepsilon_2^0 t} |2\rangle\}, \quad (2.6.34)$$

$$\psi_2(t) = B\{e^{-i\lambda_1 t - i\varepsilon_1^0 t} |1\rangle + \frac{\lambda_1}{V_{21}^*} e^{i\lambda_2 t - i\varepsilon_2^0 t} |2\rangle\}$$

с квазиэнергиями

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_1^0 - \Omega + \delta/2, \quad (2.6.35)$$

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_2^0 - \Omega - \delta/2.$$

Константы A и B являются нормировочными.

Важно иметь в виду, что хотя квазиэнергетические состояния дают удобный полный базис функций, уже учитывающих действие поля, динамика волновых функций, связанная с тем или иным режимом включения поля, может значительно отличаться от временной структуры квазиэнергетических состояний, соответствующих адиабатически медленному включению поля. Пусть, например, в момент времени $t = 0$ система находилась в состоянии $|1\rangle$. Состояние $\psi(t)$ системы в последующие моменты времени определяются линейной комбинацией полученных нами ранее решений $\psi_1(t)$ и $\psi_2(t)$, обращающейся при $t = 0$ в $|1\rangle$. С учетом этого

$$\begin{aligned} \psi(t) = & e^{-i\delta t/2} (\cos \Omega t + \frac{i\delta}{2\Omega} \sin \Omega t) e^{-i\varepsilon_0 t} |1\rangle - \\ & - \frac{iV_{12}}{\Omega} e^{i\delta t/2} \sin \Omega t \cdot e^{-i\varepsilon_2^0 t} |2\rangle. \end{aligned} \quad (2.6.36)$$

Заселенность состояния $|2\rangle$ определяется квадратом модуля коэффициента при этом состоянии в решении (2.6.33) и равна

$$w_2(t) = \frac{|V_{21}|^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t. \quad (2.6.37)$$

С периодичностью Ω заселенность меняется от 0 до $|V_{21}|^2/\Omega^2$. В точном резонансе $\Omega = |V_{21}|$, и заселенность может достигать единицы.

2.7. Вращательное приближение в теории тормозного излучения и рекомбинации

В оставшихся параграфах главы мы рассмотрим еще ряд частных, но полезных для практики приближений. Для характерных значений параметров электронов и ионов в плазме (тепловой скорости электронов v_{Te} и среднего заряда иона \bar{Z}_i) величина борновского отношения $\eta = \bar{Z}_i/v_{Te}$ больше или порядка единицы:

$$\eta = \bar{Z}_i/v_{Te} \geq 1. \quad (2.7.1)$$

Условие (2.7.1) является известным критерием использования квазиклассического приближения для описания движения электрона в кулоновском поле в одномерном случае. Более общим критерием квазиклассичности является неравенство [4]:

$$p^{-2} \operatorname{div} \mathbf{p}(\mathbf{r}) \ll 1, \quad (2.7.2)$$

где $\mathbf{p}(\mathbf{r})$ – полный импульс электрона. Условие (2.7.2) применимо для всех видов потенциалов, в которых движется электрон. Можно показать, что в случае частично-ионизированной плазмы неравенство (2.7.2) автоматически выполняется во всей пространственной области, в которой эффективный заряд иона Z_{ef} , определяющий интенсивность излучательного процесса, изменяется от своего минимального значения Z_i (большие расстояния до ядра) до максимального, равного заряду ядра Z , если только $Z \gg 1$. 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. Заметим, что в случае легких ионов, когда заряд ядра мало отличается от единицы, процесс можно рассматривать в кулоновском приближении при эффективном заряде иона равном $Z_{ef} = (Z + Z_i)/2$.

Заметим, что специфические свойства симметрии кулоновского поля приводят к характерной нечувствительности сечения ряда процессов к величине борновского параметра η . Это наиболее ярко проявляется в выпадении постоянной Планка \hbar из выражения для сечения рассеяния в кулоновском поле (формулы Резерфорда), а также в слабой зависимости интенсивного дипольного излучения в кулоновском

поле от η . Перечисленные факты послужили основой для развития так называемого полуклассического подхода в теории тормозного излучения [6], суть которого состоит в использовании классической электродинамики в сочетании с некоторыми квантовыми ограничениями. Эти ограничения сводятся к требованию относительной малости квантовых неопределенностей физических величин, определяющих излучение. Математическим выражением указанного требования являются критерии квазиклассичности (2.7.1) и (2.7.2).

В соответствии с классической теорией дипольного излучения для спектра эффективного излучения электрона, рассеивающегося (с прицельным параметром ρ) на силовом центре, справедливо следующее выражение [7]:

$$\frac{d\kappa}{d\omega} = \int_0^{\infty} \Delta E(\omega, \rho) d\rho, \quad (2.7.3)$$

где

$$\Delta E(\omega, \rho) = \frac{8\pi}{3c^3} \left| \ddot{\mathbf{d}}(\omega, \rho) \right|^2 \quad (2.7.4)$$

– энергия, излучаемая электроном в единичный частотный интервал на частоте ω , $\ddot{\mathbf{d}}(\omega, \rho)$ – временной Фурье-образ второй производной по времени от дипольного момента, рассеивающегося электрона с заданным прицельным параметром, c – скорость света. Подчеркнем, что формулы (2.7.3), (2.7.4) описывают так называемое статическое излучение, когда пренебрегается вкладом в процесс внутренних степеней свободы мишени.

Для полного эффективного излучения κ имеем:

$$\kappa = \int_0^{\infty} d\kappa(\omega) = \int_0^{\infty} \Delta E(\rho) 2\pi \rho d\rho. \quad (2.7.5)$$

Здесь $\Delta E(\rho)$ – проинтегрированная по всем частотам энергия электромагнитного поля, излучаемого электроном с заданным прицельным параметром. Для $\Delta E(\rho)$ при рассеянии налетающей частицы в центральном поле имеет место следующее выражение:

$$\Delta E(\rho) = \frac{2}{3c^3} \int_{-\infty}^{\infty} [w(\rho, t)]^2 dt = \frac{4}{3c^3} \int_{r_0(\rho)}^{\infty} \left(\frac{\partial U}{\partial r} \right)^2 \frac{dr}{v_r(r, \rho, E)}. \quad (2.7.6)$$

Здесь $w(\rho, t) = -\partial U/\partial r$ – 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:

$$\frac{U(r)}{E} + \frac{\rho^2}{r^2} = 1. \quad (2.7.7)$$

При переходе ко второму равенству в (2.7.6) была произведена замена переменной интегрирования $t \rightarrow r$. Подставляя (2.7.6) в (2.7.5) и меняя порядок интегрирования, находим для полного эффективного излучения по статическому каналу:

$$\kappa^{st}(E) = \frac{8\pi}{3c^3\sqrt{2E}} \int_{r_1}^{\infty} \left(\frac{\partial U}{\partial r}\right)^2 dr \int_{\rho_1}^{\rho_0(r)} \frac{\rho d\rho}{\sqrt{1 - U(r)/E - \rho^2/r^2}}, \quad (2.7.8)$$

где $\rho = \rho_0(r) = r\sqrt{1 - U(r)/E}$ – функция, обратная к $r_0(\rho)$. Производя в (2.7.8) интегрирование по прицельному параметру, получаем окончательно:

$$\kappa^{st}(E) = \frac{8\pi}{3c^3\sqrt{2E}} \int_0^{\infty} \left(\frac{\partial U}{\partial r}\right)^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E}} r^2 dr. \quad (2.7.9)$$

Интеграл в (2.7.9) 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 (2.7.9) является исходным для построения вращательного приближения в теории статического тормозного излучения и рекомбинации, справедливого в так называемой крамерсовской области частот, которая определяется неравенством:

$$\omega > \tilde{\omega} \equiv \frac{\sqrt{2E}}{a}, \quad |U(a)| = E, \quad (2.7.10)$$

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

Физически неравенству (2.7.10) соответствуют сильно искривленные траектории движения налетающей частицы. Теория электромагнитных процессов в условиях справедливости (2.7.10) получила название крамерсовской электродинамики [6]. Излучение в высокочастотном (крамерсовском) диапазоне $\omega \gg \tilde{\omega}$ происходит в локализованной области радиального движения рассеивающегося электрона вблизи классической точки поворота, там, где максимально его ускорение. Угловая скорость вращения в этой точке равна:

$$\omega_{rot}(r) = \frac{v(r)}{r} = \frac{\sqrt{2(E + |U(r)|)}}{r}. \quad (2.7.11)$$

При записи (2.7.11) предположено, что текущее расстояние r является точкой поворота, в которой радиальная скорость налетающей частицы равна нулю. Поскольку при заданном рассеянии заряженной частицы в спектре ее излучения представлены частоты, присутствующие в фурье-разложении ее траектории, а радиальная область испускания частот $\omega \gg \tilde{\omega}$ локализована, то можно записать следующее равенство (вращательное приближение):

$$\omega = \omega_{rot}(r), \quad \omega \gg \tilde{\omega}. \quad (2.7.12)$$

С учетом (2.7.12) для спектра эффективного излучения по статическому каналу во вращательном приближении имеем:

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega} \right)_{st}^{rot} = \frac{8\pi A}{3c^3 \sqrt{2E}} \int_0^\infty f_{st}(r)^2 \sqrt{1 + \frac{|U(r)|}{E}} \delta(\omega - \omega_{rot}(r)) r^2 dr, \quad (2.7.13)$$

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

$$f_{st}(r) = -dU/dr = Z_{ef}(r)/r^2, \quad (2.7.14)$$

$Z_{ef}(r)$ – эффективный заряд атома на расстоянии r от ядра. Более строгий анализ показывает, что для кулоновского и томас-фермиевского

потенциалов $A = \sqrt{3}$. Из (2.7.13) вытекает, что в рамках вращательного приближения излучение определяется расстоянием до ядра $r_{ef}(\omega, E)$, которое является решением уравнения

$$2(E + |U(r)|) = \omega^2 r^2. \quad (2.7.15)$$

Сравнение результатов расчетов по формулам (2.7.13), (2.7.14) с численными квантово-механическими вычислениями, проведенными для атомных потенциалов, а также с экспериментальными данными показывает высокую точность вращательного приближения. Так, например, в случае кулоновского поля точность вращательного приближения 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) вращательное приближение дает универсальное описание спектра статического тормозного излучения на многоэлектронном атоме в следующем виде:

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{st}^{rot} = \frac{8\sqrt{3}\pi Z^{2/3} b^{5/2} \nu}{3c^3 \sqrt{2}t} \left\{ \frac{x^4 [(\chi/x)']^2 \sqrt{1 + \chi/(xt)}}{b^3 x \nu^2 + |(\chi/x)'|} \right\}_{x=x_{ef}(\nu, t)}. \quad (2.7.16)$$

Здесь $b = 0.8853$, $\nu = \omega/Z$ – приведенная частота и $t = bE/Z^{4/3}$ – приведенная начальная энергия электрона, $x_{ef}(\nu, t)$ – нормированное на радиус Томаса–Ферми решение уравнения (2.7.15), выраженное через параметры ν , t . Точность универсальной (единой для всех зарядов ядра) зависимости (2.7.16) на границе применимости вращательного приближения $\omega = \tilde{\omega}$ составляет 10–20%.

Вращательное приближение (2.7.11) – (2.7.12) может быть перепиано через момент количества движения электрона M , являющийся интегралом движения:

$$\omega = \omega_{rot}(r) = \frac{M}{r^2}. \quad (2.7.17)$$

В крамеровском пределе $\omega \gg \tilde{\omega}$ имеем $|U| \gg E$, откуда с учетом (2.7.17) следует, что ω_{rot} зависит только от M , но не от начальной энергии E . Данный факт в крамеровской электродинамике получил специальное название «выключение интеграла энергии» [6]. Выключение интеграла энергии связано с тем, что условие квазиклассичности

спектра излучения в рамках применимости крамеровской электродинамики (2.7.10) определяется не обычным условием $\omega < E$, а существенно более слабым неравенством

$$\omega < E_{kin}(r_{ef}) . \quad (2.7.18)$$

Таким образом, в крамеровском случае квазиклассичным оказывается не только процесс тормозного излучения, но и процесс фоторекомбинации, когда электрон захватывается в связанное состояние иона-мишени. Этот, на первый взгляд парадоксальный, вывод непосредственно следует из упоминавшейся выше ограниченности радиальной области, ответственной за излучение в высокочастотном пределе. Действительно, коль скоро рассеивающийся электрон излучает частоты $\omega \gg \tilde{\omega}$ с локализованного участка траектории вблизи точки наибольшего сближения с ядром, то ему, фигурально выражаясь, «все равно», каким образом будет осуществляться дальнейшее движение – инфинитно (по гиперболе) или финитно (по эллипсу).

Можно констатировать, что формула вращательного приближения (2.7.13) 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

$$\sigma_r(E) = \int_E^{E+I(Z_i-1)} \frac{d\kappa}{d\omega} \frac{d\omega}{\omega} , \quad (2.7.19)$$

где $I(Z_i - 1)$ – потенциал ионизации иона (атома), возникающего после рекомбинации электрона на исходном ионе с зарядом Z_i . При выводе (2.7.19) была учтена связь между эффективным излучением и сечением процесса: $\kappa = \omega \sigma$. Формула (2.7.19) описывает как статический, так и поляризационный канал, если под $d\kappa/d\omega$ понимать соответствующее эффективное излучение.

В случае тормозного излучения на нейтральном атоме нетрудно обобщить выражение для спектрального сечения во вращательном приближении (2.7.16), справедливое в спектральном интервале $\omega \geq \tilde{\omega}$, на

низкочастотный диапазон $0 < \omega < \tilde{\omega}$. Для этого перепишем (2.7.16) через гаунт-фактор $G(\omega, E)$ — множитель, равный отношению данного эффективного излучения $(d\kappa/d\omega)$ (или соответствующего сечения) и его крамеровского аналога $(d\kappa/d\omega)^{Kr}$:

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{st}^{rot} = \left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)^{Kr} g^{rot}(\nu, t), \quad (2.7.20)$$

где

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)^{Kr} = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2}{E c^3}. \quad (2.7.21)$$

«Вращательный» фактор Гаунта $g^{rot}(\nu, t)$ является универсальной функцией, единой для всех зарядов ядра. Он зависит только от приведенных переменных ν и t . Выражение для $g^{rot}(\nu, t)$ следует из сравнения формулы (2.7.16) и равенств (2.7.20), (2.7.21).

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:

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{st} = \left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)^{Kr} \left\{ g_1(t) + \frac{\nu}{3t} [g_1(t) - g_0(t)] \right\}. \quad (2.7.22)$$

Заметим, что в случае тормозного излучения на многоэлектронном ионе формула (2.7.16) по-прежнему справедлива с точностью до замены функции Томаса—Ферми для нейтрального атома $\chi(x)$ на свой ионный аналог. Однако обобщение на низкочастотный диапазон $0 < \omega < \tilde{\omega}$ в этом случае представляет собой более сложную процедуру, так как фактор Гаунта на нулевой частоте, определяющий функцию $g_0(t)$ для иона расходится. Тем не менее, на основании качественных физических соображений можно сконструировать интерполяционное выражение, описывающее статическое излучение квазиклассического электрона на ионе во всем частотном диапазоне.

2.8. Локально-плазменная модель взаимодействия атома с электромагнитным полем

Существует весьма простой подход к описанию взаимодействия атома с электромагнитным полем, основанный на чисто классических соображениях. Это так называемая модель локальной плазменной частоты или приближение Брандта-Лундквиста [12, 13]. 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:

$$\omega = \omega_p(r) = \sqrt{4\pi n(r)}. \quad (2.8.1)$$

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:

$$g(\omega) = \int d^3r n(r) \delta(\omega - \omega_p(r)). \quad (2.8.2)$$

Легко видеть, что спектральная функция (2.8.2) удовлетворяет необходимому правилу сумм $\int g(\omega) d\omega = N$ (N — полное число электронов в атоме). Для сечения фотоионизации, связанного со спектральной функцией равенством $\sigma(\omega) = 2\pi^2 g(\omega)/c$ имеем:

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi^2}{c} \int d^3r n(r) \delta(\omega - \omega_p(r)). \quad (2.8.3)$$

Наличие дельта-функции в равенстве (2.8.3) позволяет легко произвести интегрирование по пространственным переменным. В результате для сечения фотоионизации в приближении Брандта—Лундквиста [13] находим:

$$\sigma_{ph}^{B-L}(\omega) = \frac{4\pi^2\omega}{c} r_\omega^2 \frac{n(r_\omega)}{|n'(r_\omega)|}. \quad (2.8.4)$$

Здесь r_ω есть решение уравнения (2.8.1). Эта величина соответствует расстоянию, на котором имеет место плазменный резонанс, т. е. равенству частоты внешнего электромагнитного поля ω локальной плазменной частоте $\omega_p(r)$, а штрих у электронной плотности обозначает дифференцирование по радиусу. Тем самым в рамках рассматриваемой модели сечение фотоэффекта определяется только распределением электронной плотности $n(r)$ [14]. 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 (2.8.4), находим [15, 16]:

$$\sigma_{ph}^{B-L}(\omega) = s\left(\nu = \frac{\omega}{Z}\right) = \frac{9\pi^4\nu}{32c} x_\nu^2 \frac{f(x_\nu)}{|f'(x_\nu)|}. \quad (2.8.5)$$

Здесь введена так называемая приведенная частота $\nu = \omega/Z$, x_ν — решение уравнения $\nu = \sqrt{4\pi f(x)}$, являющегося следствием равенства (2.8.1). Как видно из (2.8.5), сечение фотоионизации в приближении Брандта—Лундквиста оказывается универсальной, т. е. не зависящей от заряда ядра, функцией приведенной частоты $s(\nu)$. Формула (2.8.5) выявляет соответствующий закон подобия (скейлинг) сечения по отношению к переменной ν . Универсальная функция $s(\nu)$ определяется типом статистической модели атома, т. е. зависимостью $f(x)$.

На рис. 2.2 представлены результаты вычисления сечения фотоионизации атома криптона, проведенные в рамках двух альтернативных подходов: квантовом водородоподобном приближении — сплошная кривая и с помощью классической локально-плазменной модели (2.8.5) 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 подболочки. Сечение фотоионизации атома в локально-плазменной модели (для электронной плотности Томаса—Ферми) представляет собой монотонно убывающую кривую, сглаженным образом описывающую квантовые скачки водородоподобного приближения. Отметим, что это «сглаживание» частотной зависимости

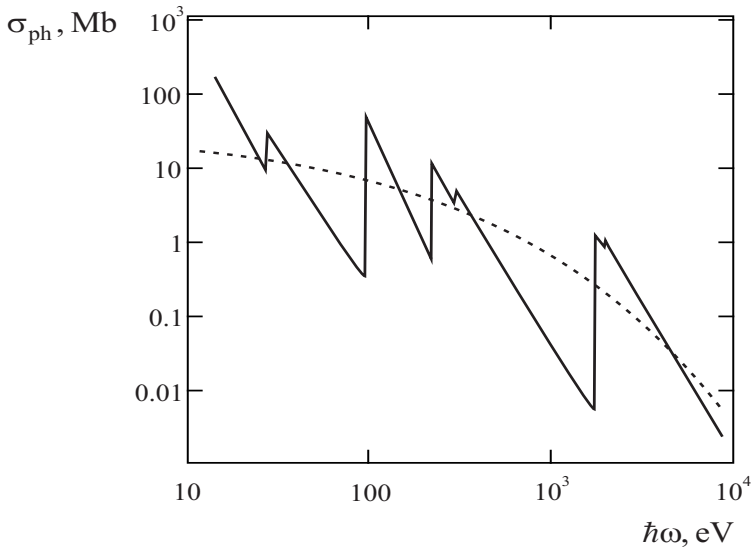


Рис. 2.2. Сечение фотоионизации атома криптона (в Mb): сплошная кривая — водородоподобное приближение; пунктир — локально-плазменная модель (2.8.5) с электронной плотностью по Томасу—Ферми

сечения фотоэффекта аналогично «сглаживанию» координатной зависимости реального распределения электронной плотности, осуществляемого в модели Томаса—Ферми.

Следует иметь в виду, что рассматриваемое здесь приближение Брандта—Лундквиста является, естественно, в большей мере качественным, чем количественным. Его основным достоинством является простота, наглядность и универсальность, а также то, что оно позволяет дать классическое представление такого существенно квантового явления как фотоэффект. Приближение локальной плазменной частоты дает наихудшее описание процесса в спектральных интервалах вблизи порогов ионизации электронных подболочек, как это видно и на рис. 2.2. В оригинальной работе Брандта и Лундквиста [13] отмечалось, что локально-плазменная модель адекватна физике фотопоглощения электромагнитного поля атомом не во всем частотном диапазоне, а на частотах $\omega \approx Z Ry$ ($Ry = 13.6$ эВ), когда коллективные

взаимодействия доминируют над одночастичными. Для таких частот расстояние до ядра, на котором выполняется условие плазменного резонанса (2.8.1) (в модели Томаса—Ферми), совпадает с радиусом Томаса—Ферми, т. е. равно расстоянию, где электронная плотность максимальна. Поэтому предположение о доминировании коллективных эффектов 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 [17] в виде

$$f_{\text{exp}}(x) = \frac{128}{9\pi^3} e^{-2x} \quad (2.8.6)$$

позволяет получить простое аналитическое выражение для сечения фотоэффекта. Действительно, тогда трансцендентное уравнение (2.8.1) легко решается, и для сечения фотоионизации с помощью (2.8.5) имеем

$$\sigma_{ph}^{B-L(\text{exp})}(\omega = Z\nu) = \frac{9\pi^4}{64c} \nu \ln^2 \left(\frac{16\sqrt{2}}{3\pi\nu} \right), \quad (2.8.7)$$

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

Характерной чертой сечения (2.8.7) является существование «частоты отсечки», что связано с ограниченностью величины радиальной электронной плотности вблизи ядра в модели (2.8.6). Так что существует частота излучения, при которой условия плазменного резонанса не выполняется. Другой характерной чертой сечения фотоэффекта, вычисленного с функцией (2.8.6), является наличие ярко выраженного максимума при $\omega_{\text{max}}^{(\text{exp})} \cong 8.8 Z$.

Использование более реалистических электронных распределений, учитывающих оболочечную структуру атома, таких как, например, слэтеровские или хартри-фоксовские электронные плотности, приводит к возникновению характерных «осцилляций» в спектральном сечении фотоэффекта вблизи «средней линии», задаваемой распределениями Томаса—Ферми и Ленца—Иенсена. При этом, однако, теряется универсальность описания фотоэффекта, характерная для простых статистических моделей.

Модель локальной плазменной частоты может быть использована и для вычисления динамической поляризуемости атома. Условию плаз-

менного резонанса (2.8.1) соответствует следующее выражение для дипольной поляризуемости, удовлетворяющее соотношениям Крамерса-Кронига и правилу сумм:

$$\alpha^{BL}(\omega) = \int_0^{R_0} \frac{\omega_p^2(r) r^2 dr}{\omega_p^2(r) - \omega^2 - i0} = \int \alpha^{BL}(r, \omega) 4\pi r^2 dr. \quad (2.8.8)$$

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

Выражение (2.8.8) имеет правильную высокочастотную асимптотику, а в низкочастотном пределе оно дает результат

$$\alpha^{BL}(\omega \rightarrow 0) \rightarrow R_0^3/3. \quad (2.8.9)$$

Несмотря на кажущуюся простоту, формула (2.8.9) 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 вносит непрерывный энергетический спектр атома, и приближение локальной плазменной частоты (2.8.8) наиболее адекватно. Указанное обстоятельство демонстрируется таблицей 2, в которой приведены значения статической поляризуемости атомов и ионов с замкнутыми электронными оболочками, рассчитанные в рамках различных моделей, а также экспериментальные данные. При расчетах статической поляризуемости в модели Брандта–Лундквиста использовался радиус атома (иона), вычисленный с учетом корреляционной поправки в модели Томаса–Ферми–Дирака.

$\alpha_0^{\text{вар}}$ – расчет вариационным методом, $\alpha_0^{\text{ВШ}}$ – расчет Виноградова и Шевелько, $\alpha_0^{\text{ШЗ}}$ – расчет Штотта и Зарембы в рамках формализма электронной плотности, $\alpha_0^{\text{БЛ}} = R_0^3/3$ – расчет в модели Брандта–Лундквиста.

С использованием формулы (2.8.8) и статистической модели для электронной плотности атомного остова для поляризуемости можно

Таблица 2.

Атом (ион)	ArI	KrI	XeI	KII	RbII	CsII	SrIII	BaIII
$\alpha_0^{\text{ЭК}} \text{ (a.u.)}$	11	17	27	7.5	12	16.3	6.6	11.4
$\alpha_0^{\text{вар}} \text{ (a.u.)}$	19.3	26.8	30.9	9.1	14.3	17.8	8.7	11.4
$\alpha_0^{\text{ВШ}} \text{ (a.u.)}$		21.1	25.5	6.6	11.9	15.3	7.5	9.7
$\alpha_0^{\text{ШЗ}} \text{ (a.u.)}$	11.6	17.2	27.3	5.25	8.5	14.6		
$\alpha_0^{\text{БЛ}} \text{ (a.u.)}$	22	24	27	8.6	11.6	13.5	7	8.4

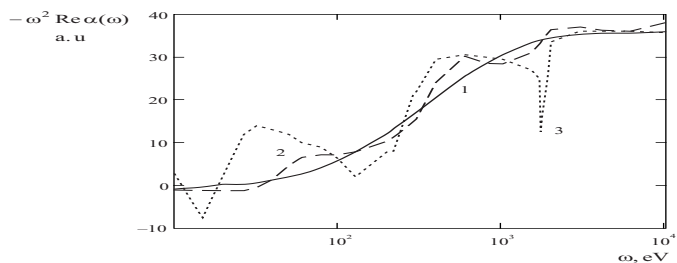
получить следующее выражение:

$$\alpha(\omega, Z) = r_{TF}^3 \beta\left(\frac{\omega}{Z}\right) = \frac{b^3 a_0^3}{Z} \beta\left(\frac{\omega}{Z}\right), \quad \beta(\nu) = \int_0^{x_0} \frac{4\pi f(x) x^2 dx}{4\pi f(x) - \nu^2 - i0}. \quad (2.8.10)$$

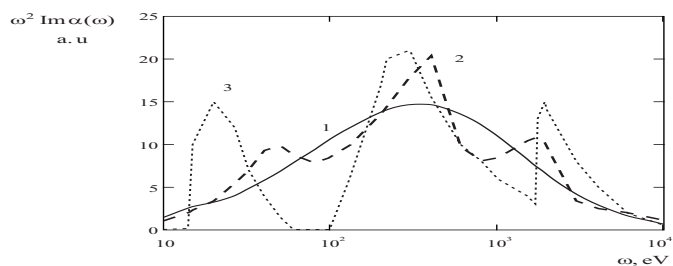
Здесь $r_{TF} = b a_0 / Z^{1/3}$ – радиус Томаса–Ферми, $b = (9\pi^2/128)^{1/3} \cong 0.8853$, Z – заряд ядра атома, a_0 – боровский радиус, $\beta(\nu)$ – безразмерная поляризуемость как функция приведенной частоты $\nu = \omega/Z$, $x_0 = R_0/r_{TF}$ – приведенный радиус атома, $f(x)$ – универсальная 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 (2.8.10) выявляет закон подобия (скейлинг) этой величины по параметру $\nu = \omega/Z$.

Результаты расчета действительной и мнимой части дипольной динамической поляризуемости атома криптона в рамках метода локальной плазменной частоты по формуле (2.8.8) с использованием электронной плотности по Слэтеру и Ленцу-Иенсену представлены на рис. 2.3. На этом же рисунке приведены результаты расчета соответствующих



(a)



(б)

Рис. 2.3. Частотные зависимости реальной (а) и мнимой (б) частей поляризуемости атома криптона, вычисленные в различных приближениях, умноженные на квадрат частоты: 1 – локальной плазменной частоты для электронной плотности Ленца–Иенсена, 2 – локальной плазменной частоты для слэтеровской электронной плотности, 3 – случайных фаз с обменом

величин в приближении случайных фаз с обменом. Видно, что динамическая поляризуемость атома криптона, рассчитанная в модели локальной плазменной частоты для электронной плотности Ленца—Иенсена, сглаженным образом передает квантово-механические особенности частотного поведения динамической поляризуемости, наиболее ярко проявляющиеся вблизи потенциалов ионизации электронных подболочек, подобно тому, как статистическая плотность электронного распределения передает общий ход точной квантово-механической зависимости. 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 (2.8.10) с учетом явного вида функции $f(x)$ для распределения электронной плотности Томаса—Ферми и Ленца—Иенсена. Для мнимой части $\beta(\nu)$ имеем

$$\text{Im} \{ \beta^{T-F}(\nu \rightarrow \infty) \} \rightarrow \frac{4.35}{\nu^4}, \quad (2.8.11)$$

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

Из формул (2.8.11) 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

$$\text{Re} \{ \beta(\nu \rightarrow \infty) \} \rightarrow -\frac{b^{-3}}{\nu^2}. \quad (2.8.12)$$

Из сравнения выражений (2.8.11) и (2.8.12), в частности, следует, что на больших частотах мнимая часть поляризуемости спадает существенно более быстро, чем ее действительная часть.

2.9. Гибридный метод Роста расчета сечения фотоионизации

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

$$e^{-i(H_0+\Delta_1)t} e^{iH_0t} \approx e^{-i\Delta_1t}, \quad \Delta_1 = \frac{1}{r^2}, \quad (2.9.1)$$

с помощью которого из общего выражения для сечения фотоионизации

$$\sigma_{ph}(\omega) = \frac{2\pi e^2}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \psi | D e^{-iHt} D e^{iHt} | \psi \rangle e^{i\omega t} \quad (2.9.2)$$

и формы ускорения для оператора дипольного момента

$$D = \frac{Z}{i\omega} \frac{1}{r^2} \cos\theta \propto H(l=1) - H(l=0) \quad (2.9.3)$$

после алгебраических преобразований можно получить приближенное равенство для сечения процесса:

$$\sigma_{ph}(\omega) \approx \frac{2\pi Z^2}{3c\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \psi | e^{-i\Delta_1t} | \psi \rangle e^{i\omega t}. \quad (2.9.4)$$

Представление сечения в виде (2.9.4) называется «гибридным» приближением. Оно является квантово-механическим в силу общего операторного подхода и в то же время имеет классические черты, поскольку используется приближенная коммутация операторных экспонент (2.9.1).

Из формулы (2.9.2) следует, что сечение фотоионизации атома полностью определяется его начальной волновой функцией ψ , а равенство (2.9.4) позволяет выразить сечение через электронную плотность, если сделать следующую замену:

$$|\psi(r)|^2 \rightarrow 4\pi r^2 n(r). \quad (2.9.5)$$

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

$$\sigma_{ph}(\omega) = \frac{8\pi^3 Z^2}{3c} \frac{1}{\omega^{7/2}} n \left(r = \frac{1}{\sqrt{\omega}} \right). \quad (2.9.6)$$

Из (2.9.6), 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—Лундквиста, 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 (2.8.1), а разностью атомных гамильтонианов с орбитальными квантовыми числами, отличающимися (в соответствии с дипольными правилами отбора) на единицу:

$$\omega = H_1(r) - H_0(r). \quad (2.9.7)$$

Уравнение (2.9.7) непосредственно вытекает из (2.9.1) с учетом закона сохранения энергии.

На основании (2.9.7) можно дать физическую интерпретацию приближения Роста. Из этого уравнения следует, что поглощение фотона происходит при фиксированной электронной координате, подобно тому, как в приближении Борна-Оппенгеймера координаты ядер молекулы не изменяются в процессе электронного перехода. Отметим, что формула (2.9.1) является математическим выражением этого факта. Итак, гибридное приближение Роста можно рассматривать как обобщение адиабатического принципа на случай электронных переходов в атомах.

На рис. 2.4 представлено отношения сечения фотоионизации основного состояния атома водорода, рассчитанного по формуле Роста (кривая 1) и в приближении Крамерса (кривая 2), к зоммерфельдовскому сечению [17]. Из приведенного рисунка следует, что вблизи порога квазиклассическое приближение Крамерса несколько лучше описывает сечение фотоэффекта, чем модель Роста, а на больших частотах – наоборот. Действительно, в высокочастотном пределе приближение Крамерса дает неточную асимптотичку (ω^{-3} вместо $\omega^{-7/2}$), в то вре-

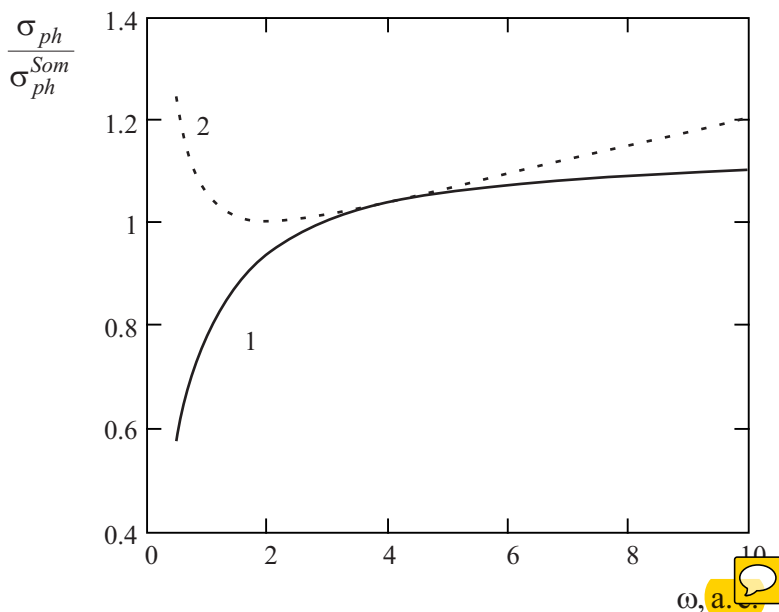


Рис. 2.4. Отношение сечения фотоионизации основного состояния атома водорода к зоммерфельдовскому сечению, рассчитанное в рамках различных подходов: кривая 1 – приближение Роста, кривая 2 – приближение Крамера

мя как в этом спектральном диапазоне отношение результата Роста к точному равно: $\pi/2\sqrt{2} \approx 1.11$.

Важно подчеркнуть, что в отличие от приближения Брандта—Лундквиста модель Роста не обеспечивает выполнения правила сумм для сечения фотопоглощения. Так, в случае атома водорода соответствующий интеграл по частоте дает вдвое большее значение. Заметим, что максимум фотопоглощения атома водорода в приближении Роста приходится на частоту $\omega_{\max}^{(R)} \cong 0.082$ а.е., что существенно меньше первого потенциала возбуждения, при этом максимальная величина сечения равна $\sigma_{ph, \max}^{(R)} \cong 1.127$ а.е..

В заключение отметим, что возможно обобщение формулы для сечения фотоэффекта (2.9.4) на случай атома гелия. Сравнение результатов такого обобщения с экспериментальными данными показывает,

что относительная ошибка для умеренных значений энергии фотона находится в пределах 5%.

Литература

1. *Виноградов А.В., Пустовалов В.В., Шевелько В.П.* Статистическая теория поляризуемости атомов и ионов // ЖЭТФ. 1972. Т. 63. С. 477–484.
2. *Виноградов А.В., Шевелько В.П.* Статическая дипольная поляризуемость атомов и ионов в модели Томаса–Ферми / Труды ФИАН. 1980. Т. 119. С.158–168.
3. *Мигдал А.Б.* Качественные методы в квантовой теории. – М: Наука, 1975.
4. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. – М.: Физматлит, 2008.
5. *Батыгин В.В., Топтыгин И.Н.* Современная электродинамика. Ч. 1. – М.: РХД, 2007.
6. *Kogan V.I., Kukushkin A.B., Lisitsa V.S.* Kramers electrodynamics and electron-atomic radiative-collisional processes // Phys. Rep. 1992. V. 213. P. 1–116.
7. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория поля. – М.: Физматлит, 2006.
8. *Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Квантовая электродинамика. – М.: Физматлит, 2006.
9. *Федорюк М.В.* Обыкновенные дифференциальные уравнения. – СПб.: Лань, 2003.
10. *Мотт Н., Месси Г.* Теория атомных столкновений. – М.: Мир, 1969.
11. *Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* Рассеяние реакции и распада в нерелятивистской квантовой механике. – М.: Наука, 1971.

12. *Астапенко В.А., Буреева Л.А., Лисица В.С.* Поляризационные эффекты в атомных переходах // УФН. 2002. Т. 172. С. 155–192.
13. *Brandt W., Lundqvist, S.* Atomic oscillations in the statistical approximation // Phys. Rev. 1965. V. 139. P. 612–617.
14. *Астапенко В.А.* Приближенные методы в теории взаимодействия электронов и фотонов с атомами. Учебное пособие. – М.: Изд. МФТИ, 2002.
15. *Astapenko V.A.* Plasma-statistical models of the atom in the theory of some collisional and radiative processes // Russian Journal of Physical Chemistry, 2002. V. 76.(1). P. 133–143.
16. *Astapenko V.A., Bureyeva L.A., Lisitsa V.S.* Plasma models of atom and radiative-collisional processes // Review of Plasma Physics. 2003. V. 23. P. 1–206.
17. *Зоммерфельд А.* Строение атома и спектры. Т. 2. – М.: ГИТТЛ, 1956.

Глава 3

Эффекты сильного поля и поляризации остова в процессах фотоионизации

3. 1. Теория многих частиц в сильном поле

Атомные системы, за исключение простейшего атома водорода, представляют собой сложные многоэлектронные объекты. Изложим методы, пригодные для описания воздействия сильного светового поля на многоэлектронные атомные системы. Они представляют интерес также для задач физики плазмы и твердого тела.

Основой развиваемого формализма может служить квантово-механическая теория многих тел [1, 2]. Естественным для сильных лазерных полей является путь, основанный на применении теории возмущений к «одетым» полем атомным электронам, движущимся в самосогласованном центральном поле и внешнем электромагнитном поле. При этом будем считать, что центральное поле и внешнее электромагнитное поле уже учтены, т. е. одночастичная задача решена. Тогда

проблема состоит в развитии теории возмущений по межэлектронному остаточному взаимодействию и определении техники суммирования соответствующих квантово-механических амплитуд.

Получим общие уравнения, описывающие влияние корреляционного взаимодействия на одноэлектронные многофотонные процессы. Мы оставляем в стороне возможные эффекты, связанные с коллективными колебаниями атомной оболочки и статистическими свойствами атомных спектров. Эти важные и малоизученные аспекты проблемы могут быть предметом отдельных исследований. Общие свойства квазиэнергетических состояний рассмотрены нами в разделе 2.5. Поскольку квазиэнергетические состояния образуют полную систему функций, любое решение уравнения (2.4.3) можно представить в виде

$$\psi = \sum_{\mu} a_{\mu} \psi_{\mu}(\xi, t). \quad (3.1.1)$$

где мера μ зависит от вида гамильтониана H .

При воздействии сильного электромагнитного излучения на вещество довольно часто реализуется ситуация, когда средняя за период внешнего воздействия энергия медленно меняется во времени. Наиболее очевидным примером может служить распространение излучения в прозрачной среде. При этом сильное излучение вызывает нелинейную поляризацию и стимулирует различные нелинейные процессы: трансформацию излучения в гармоники, самофокусировку и пр. В то же время, если диссипация энергии достаточно мала, процесс может быть квазистационарным. Аналогичную картину можно ожидать и при воздействии излучения на одиночные квантовые объекты, например, атомы. Тогда квазистационарность процесса, как обычно в квантовой механике, можно связать с выполнением неравенства $W \gg \Gamma$, где W — характерная энергия системы, Γ — полевая ширина.

Как отмечено выше, учет воздействия сильного периодического возмущения требует перехода от такого параметра как энергия к новой сохраняющейся величине — квазиэнергии ε . Поэтому целесообразно переформулировать правила обычной статистической механики, предполагая выполненным условие $\varepsilon \gg \Gamma$.

Квазиэнергия определяется как собственные значения оператора $H - i\partial/\partial t$. Квазиэнергия не взаимодействующих подсистем является

аддитивной величиной. Действительно, например, для двух не взаимодействующих подсистем волновая функция представима в виде

$$\psi(1, 2) = \psi_1(1)\psi_2(2). \quad (3.1.2)$$

Пусть $H_1(t)$ и $H_2(t)$ (3.1.2) — гамильтонианы подсистем. Тогда

$$(H_{1,2} - i\partial/\partial t) \psi_{1,2} = \varepsilon_{1,2} \psi_{1,2}, \quad (3.1.3)$$

$$(H_1 - H_2 - i\partial/\partial t) \psi(1, 2) = \varepsilon \psi(1, 2),$$

где $\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$.

Учет статистики Бозе-Эйнштейна или Ферми—Дирака не нарушает это свойство. Для произвольного числа не взаимодействующих подсистем квазиэнергия всей системы равна сумме квазиэнергий подсистем

$$\varepsilon = \sum_{\mu} \varepsilon_i. \quad (3.1.4)$$

При включении периодического по времени взаимодействия в системе с чисто дискретным спектром число состояний остается прежним. Если же система без внешнего поля имеет также и непрерывный спектр, то периодическое возмущение приводит к появлению непрерывного спектра квазиэнергий, качественно меняя ситуацию. Физически это объясняется тем, что переменное внешнее воздействие может ионизовать связанные состояния. Эту трудность можно обойти так же, как и в стационарном случае, вводя с учетом сделанных замечаний понятие комплексной квазиэнергии $\varepsilon = \varepsilon_0 + i\Gamma/2$.

Полное число состояний Ω для системы, состоящей из не взаимодействующих подсистем a и b , обладает тем свойством, что

$$\sigma = \sigma_a + \sigma_b, \quad (3.1.5)$$

$$\sigma = \ln(\Omega) = \ln(\Omega_a) + \ln(\Omega_b).$$

Если считать аналогично гипотезе Гиббса [3], что Ω является функцией только квазиэнергии, то из аддитивности σ и аддитивности квазиэнергии следует

$$\sigma = \alpha + \beta\varepsilon. \quad (3.1.6)$$

Соответственно энтропия S выражается через среднее квазиэнергии ε по ансамблю

$$S = -\ln(\Omega(\bar{\varepsilon})) = -\ln(\sigma(\bar{\varepsilon})). \quad (3.1.7)$$

Дальнейшие рассуждения полностью повторяют обычную схему статистической физики [4]. В частности $\beta = 1/T$, где T — абсолютная температура. Сохраняют свой вид распределения Ферми—Дирака и Бозе—Эйнштейна

$$n(\varepsilon_\mu) = \frac{1}{\exp((\varepsilon_\mu - \zeta)/T) \pm 1}, \quad (3.1.8)$$

где ζ — химический потенциал системы. Доказано, что введенная нами статистическая гипотеза справедлива для электронного газа свободных электронов [5] и двухуровневой системы в резонансном поле [6].

Систему многих частиц удобно описывать, используя представление вторичного квантования. Такая процедура в рамках квантовой теории поля для элементарных частиц в интенсивном электромагнитном поле описана в работах [7]. Мы сформулируем ее в применении к конечной ферми-системе. Полевые операторы $\hat{\psi}$ и $\hat{\psi}^+$ разложим по полной системе функций:

$$\hat{\psi}(r, t) = \sum \hat{a}_k(t) u_k(r, t), \quad (3.1.9)$$

$$\hat{\psi}^+(r, t) = \sum u_k^*(r, t) \hat{a}_k^+(t),$$

где \hat{a}_k^+ и \hat{a}_k — операторы рождения и уничтожения электронов в квазиэнергетических состояниях k . Эти операторы удовлетворяют стандартным перестановочным соотношениям [1]. Переход к представлению взаимодействия с использованием в качестве базисных функций одночастичных квазиэнергетических состояний осуществляется так же обычным образом, и мы на нем не останавливаемся.

Изучение функций Грина в целях построения теории возмущений удобно начать с общего случая системы, находящейся в постоянном поле и периодическом по времени внешнем поле. Состояние системы, во внешнем периодическом поле, удовлетворяет уравнению Шредингера, которое может быть записано в интегральной форме с помощью

функции Грина G :

$$\psi(\xi, t, t') = i \int G_0(\xi, t, \xi', t') \psi_0(\xi', t') d\xi', \quad (3.1.10)$$

$$\psi(\xi, t' + 0, t') = \psi_0(\xi, t'),$$

ξ – пространственные координаты системы. Функция Грина определена только для моментов времени $t > t'$, т. е.

$$G_0(t < t_0) = 0. \quad (3.1.11)$$

Нетрудно видеть, что G_0 удовлетворяет уравнению

$$(i\partial/\partial t - H) G_0(\xi, t, \xi', t') = \delta(\xi - \xi') \delta(t - t'). \quad (3.1.12)$$

Воспользовавшись тем, что квазиэнергетические состояния образуют полный набор, построим функцию Грина в виде [8]:

$$G_0(\xi, t; \xi', t') = -i\theta(t - t') \sum \psi_\mu(\xi, t) \psi_\mu^*(\xi', t'). \quad (3.1.13)$$

Определим G в квазиэнергетическом представлении соотношением

$$G_{\mu\mu_1}(t, t') = \int G_0(\xi, t; \xi', t') u_\mu^*(\xi_0, t) u_\mu(\xi'_0, t') d\xi d\xi', \quad (3.1.14)$$

где u_μ – решение уравнения (2.5.6), тогда

$$G_0(\xi, t; \xi', t') = \sum u_\mu(\xi, t) u_\mu^*(\xi', t') G_{\mu\mu'}(t, t'). \quad (3.1.15)$$

Подставляя (3.1.15) в уравнение (3.1.12) и пользуясь ортогональностью функций, получаем

$$(i\partial/\partial t - \varepsilon_\mu) G_{\mu\mu'}(t, t') = \delta_{\mu\mu'} \delta(t - t'). \quad (3.1.16)$$

В случае не зависящего от времени гамильтониана $\partial H/\partial t = 0$, и G_0 не зависит от начала отсчета времени, т. е. $G_0 = G(\tau)$ где $\tau = t - t'$. Для гамильтониана с периодической зависимостью от времени сохраняет простой вид G_0 . Из (3.1.16) ясно, что

$$G_{\mu\mu'} = \delta_{\mu\mu'} g(t, t'), \quad (3.1.17)$$

и уравнение на g есть

$$(i\partial/\partial t - \varepsilon_\mu) g_\mu(t, t') = \delta(t - t'). \quad (3.1.18)$$

Нетрудно видеть, что

$$g_\mu(\tau) = \frac{1}{2} \int g_\mu(\varepsilon) \exp(-i\varepsilon\tau) d\varepsilon, \quad g_\mu(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_\mu + i\delta}, \quad (3.1.19)$$

где $\tau = t - t'$, $\delta \rightarrow 0$, дает решение уравнения (3.1.18), причем в согласии с условием (3.1.11) $g_{t < t'} = 0$. Таким образом, для квазиэнергетических состояний имеется полная аналогия со стационарным случаем, в том числе аналог регулярного представления функции Грина:

$$G_0 = \int G_\varepsilon(\xi, t, \xi', t') \exp(i\varepsilon\tau) \frac{d\varepsilon}{2\pi}, \quad (3.1.20)$$

$$G_\varepsilon = \sum \frac{u_\mu(\xi, t) u_\mu^*(\xi', t')}{\varepsilon - \varepsilon_\mu + i\delta}. \quad (3.1.21)$$

Зная функцию Грина (3.1.20), нетрудно развить теорию возмущений по дополнительному взаимодействию $U(\xi, t)$. Мы не останавливаемся подробнее на построении теории возмущений по внешнему полю, поскольку она детально описана в [2].

Функция Грина (3.1.20) практически может быть наиболее просто применена к одноэлектронным системам. Решение задачи N взаимодействующих частиц в сильном электромагнитном поле представляет большие трудности. Однако, как и в отсутствии сильного внешнего поля, основные характеристики системы могут быть выражены через одночастичные и двухчастичные функции Грина в системе многих частиц. Для удобства работы полезно переопределить вакуум, взяв за него начальное, т. е. квазиэнергетическое состояние N -частиц в сильном электромагнитном поле с выключенным остаточным взаимодействием. Это достигается стандартным введением электронно-дырочного формализма: переопределением операторов рождения и уничтожения. Пусть все состояния ниже энергии Ферми ε_F заполнены. Операторы рождения и уничтожения электронов с энергиями $\varepsilon_\mu > \varepsilon_F$ сохраним прежними: \hat{a}_μ^+ , \hat{a}_μ . Операторы уничтожения и рождения электронов в состояниях с $\varepsilon_\mu < \varepsilon_F$ будем рассматривать соответственно как операторы рождения и уничтожения дырки:

$$\begin{aligned} \hat{a}_\mu &= \hat{b}_\mu^+, \\ \hat{a}_\mu^+ &= \hat{b}_\mu, \quad \varepsilon_\mu \leq \varepsilon_F. \end{aligned} \quad (3.1.22)$$

Операторы поля в координатном представлении также разбиваются на сумму рождающей и уничтожающей частей

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\xi, t) &= \hat{\psi}(\xi, t)_{(+)} + \hat{\psi}(\xi, t)_{(-)}, \\ \hat{\psi}^+(\xi, t) &= \hat{\psi}^+(\xi, t)_{(+)} + \hat{\psi}(\xi, t)_{(-)}, \\ \hat{\psi}_{(+)}^+ &= \left[\hat{\psi}_{(-)} \right]^+, \end{aligned} \quad (3.1.23)$$

где индексы $(+)$ и $(-)$ указывают на рождающую и уничтожающую части. Из правил коммутации для операторов \hat{a}_μ^+ , \hat{a}_μ получим для одновременных коммутаторов:

$$\begin{aligned}\left\{ \hat{\psi}(\xi, t)_{(+)}, \hat{\psi}^+(\xi', t)_{(-)} \right\} &= \sum_\mu n_\mu u_\mu^*(\xi', t) u_\mu(\xi, t), \\ \left\{ \hat{\psi}(\xi, t)_{(-)}, \hat{\psi}^+(\xi', t)_{(+)} \right\} &= \sum_\mu (1 - n_\mu) u_\mu^*(\xi', t) u_\mu(\xi, t). \end{aligned} \quad (3.1.24)$$

Здесь учтено, что число электронов в данном состоянии $n_\mu = 0, 1$.

Нетрудно найти спектральное представление для одночастичной функции Грина при $t_1 > t_2$:

$$\begin{aligned}G_0 &= -i \langle 0 \left| T \left[\hat{\psi}(x_1) \hat{\psi}^+(x_2) \right] \right| 0 \rangle = -i \langle 0 \left| \hat{\psi}_{(-)}^+(x_1) \hat{\psi}_{(+)}(x_2) \right| 0 \rangle = \\ &= -i \sum_\mu (1 - n_\mu) \psi_\mu(x_1) \psi_\mu^*(x_2), \end{aligned} \quad (3.1.25)$$

где мы обозначили буквой совокупность переменных ξ, t . Аналогично при $t_1 < t_2$

$$G_0 = i \langle 0 \left| \hat{\psi}_{(-)}^+(x_2) \hat{\psi}_{(+)}(x_1) \right| 0 \rangle = i \sum_\mu n_\mu \psi_\mu(x_1) \psi_\mu^*(x_2). \quad (3.1.26)$$

В заключение данного раздела еще раз отметим, что замкнутое аналитическое выражение для функции Грина квантово-механической системы в сильном внешнем поле может быть построено только для ряда простых случаев. Такое построение возможно для системы резонирующих состояний, в случае нерезонансного взаимодействия мультиплета с внешним полем, а также для газа не взаимодействующих между собой электронов.

3.2. Поляризационный потенциал и наведенный дипольный момент

Точный учет межэлектронного взаимодействия в задачах с переменным внешнем полем требует суммирования всех диаграмм с корреляционным взаимодействием во всех порядках теории возмущений. В действительности, расчеты сравнительно легко осуществимы только в низких порядках теории возмущений. Эффективные способы построения приближений могут быть основаны на частичном или полном суммировании определенного класса диаграмм.

Уравнение, описывающее частицу, движущуюся во внешнем постоянном поле V_{ext} , переменном поле V и взаимодействующую с другими частицами, имеет вид [1]:

$$\left[i\partial/\partial t - \hat{T} - V_{ext} - V(x_1) \right] \psi(x_1) - \int dx_2 M(x_1, x_2) \psi(x_2) = 0, \quad (3.2.1)$$

где T – оператор кинетической энергии, ψ – одночастичная волновая функция, M – массовый оператор, представляющий собой сумму компактных диаграмм, т. е. не содержащий диаграмм, состоящих из частей, соединяемых только одной линией.

Таким образом, для описания движения частицы нужно уметь строить эффективный потенциал

$$V_{eff}\psi(1) = \int dx_2 M(x_1, x_2) \psi(x_2). \quad (3.2.2)$$

Этот потенциал, вообще говоря, нелокален. Он применяется в атомной физике, например, при решении задачи о рассеянии электронов на атоме, где таким образом описывается поляризация внутренних оболочек внешним электроном. Для практического вычисления массового оператора неизбежно приходится делать определенные приближения. Нахождение M можно заменить вычислением функции Грина

$$G(x_1, x_2) = G_0(x_1, x_2) + \int dx_3 dx_4 G_0(x_1, x_2) \Sigma(x_3, x_4) G_0(x_4, x_2), \quad (3.2.3)$$

связанной с массовым оператором соотношением [1] $\Sigma G_0 = MG$, где Σ – собственно-энергетическая часть.

В теории ферми-систем без внешнего поля широко используется приближение Хартри—Фока, которое соответствует учету взаимодействия между электронами в уравнении (3. 2.3) в первом порядке теории возмущений. Аналогичным образом учтем корреляционное взаимодействие между частицами $W(\xi_1 - \xi_2)$ при наличии сильного поля в виде двух слагаемых – прямого и обменного. Часть эффективного потенциала (3. 2.2), даваемая первым слагаемым, в соответствии с правилами Фейнмана [1] имеет вид

$$V_{eff}(\xi, t) = \int W(x, x_1) iG(x_1, x) dx_1 = \sum_{\mu} \int W(\xi - \xi_1) |\psi_{\mu}(\xi_1, t)|^2 d\xi_1. \quad (3. 2.4)$$

Здесь мы использовали равенство $W(x, x_1) = W(\xi - \xi_1)\delta(t - t_1)$. В сумме должно быть исключено самодействие, т. е. нет члена с $\mu = \mu_1$, где μ_1 – состояние рассматриваемого электрона.

Уравнение (3. 2.4), очевидно, может быть записано как

$$V_{eff1}(\xi, t) = \int \rho(\xi_1, t) W(\xi, \xi_1) d\xi_1 \quad (3. 2.5)$$

и интерпретировано как взаимодействие электрона с колебаниями электронной плотности, наведенными переменным полем. Аналогично для второго слагаемого, учитывающего обмен, получим нелокальный потенциал

$$V_{eff2}(\xi, t) = - \sum_{\mu < \mu_1} \psi_{\mu}(\xi, t) W(\xi, \xi_1) \psi_{\mu}^*(\xi_1, t) \psi(\xi_1, t) d\xi_1. \quad (3. 2.6)$$

Простая замена в этих выражениях квазиэнергетической функции на стационарные состояния приводит к обычному стационарному приближению Хартри—Фока.

Определенным недостатком построенного эффективного потенциала является его нелокальность. Для расчета различных характеристик атомов, твердого тела и плазмы часто используются локальные приближения, в частности, приближение функционала плотности. Хохенберг и Кон [9] установили для произвольной системы N электронов во внешнем поле $V_{ext}(\mathbf{r})$ существование функционала энергии $E_0[n(\mathbf{r})]$, зависящего только от полной электронной плотности $n(\mathbf{r})$.

Для использования этого свойства в реальных расчетах необходим конкретный вид функционала $[n(\mathbf{r})]$. Кон и Шем [10] предложили ап-

проксимировать точный функционал так называемым функционалом в приближении электронной локальной плотности:

$$E_0[n] = T_s[n] + \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) V_{eff}(\mathbf{r}), \quad (3.2.7)$$

где T_s — кинетическая энергия системы невзаимодействующих электронов, V_{eff} — эффективный потенциал, который учитывает внешнее поле и обменно-корреляционное взаимодействие электронов. Электронная плотность $n(\mathbf{r})$ строится из одночастичных состояний подобно приближению Хартри—Фока.

Часто утверждается, что функционал плотности не подразумевает одночастичного приближения. Это верно по отношению к теореме Хохенберга-Кона, но после введения одночастичных состояний и функционала кинетической энергии в одночастичном базисе перестает быть справедливым. Кроме того, в конкретных расчетах широко используется статистика Ферми и вычисление с помощью ψ_μ амплитуд перехода, что подразумевает одночастичную интерпретацию. С другой стороны, известно, что в основном состоянии наилучшим одночастичным приближением является приближение Хартри—Фока. Это, однако, не означает, что функционал локальной плотности дает в целом заведомо худший результат, поскольку в нем, по сути, используется иной гамильтониан, который эффективно учитывает корреляции и обмен. В то же время, возможности его применения к расчету нелинейных процессов ограничены.

Функционал плотности строго введен для основного состояния. Несмотря на это, подобно приближению Хартри—Фока, его довольно часто пытаются применять к описанию возбужденных состояний и их динамики. Приближение локальной плотности фактически сводится к тому, что электронный газ нужно описывать, заменяя кулоновское взаимодействие электронов эффективным взаимодействием

$$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{dV_{ec}}{dn} \delta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (3.2.8)$$

учитывающим также в определенной степени обменные и корреляционные эффекты. Взаимодействие электрона с другими окружающими его электронами приводит к перенормировке внешнего для системы переменного поля — так называемой перенормировке вершины. Нали-

чие взаимодействия вида (3.2.8) вызывает изменение результирующего поля V_{eff} , действующего на отдельный электрон при изменении электронной плотности.

Предположим, что полученный вид эффективного взаимодействия в (3.2.8) справедлив и в нестационарном случае. Тогда электроны во внешнем поле можно описать системой нестационарных уравнений

$$i\partial\psi_\mu/\partial t = \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{eff}(\mathbf{r}, n(\mathbf{r}, t)) + V_{ext}(\mathbf{r})\right)\psi_\mu + V(\mathbf{r}, t)\psi_\mu(\mathbf{r}, t). \quad (3.2.9)$$

Если в отсутствие внешнего поля стационарное распределение электронной плотности есть $n_0(\mathbf{r})$, то

$$n(\mathbf{r}, t) = n_0(\mathbf{r}) + \delta n(\mathbf{r}, t)$$

и

$$i\partial\psi_\mu/\partial t = \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_c(n_0(\mathbf{r})) + V_c(\delta n) + V_{ec}(n)\right)\psi_\mu(n) + V\psi_\mu(\mathbf{r}, t), \quad (3.2.10)$$

где V_c – кулоновская часть взаимодействия, совпадающая по виду с $V_{ext} + V_{eff1}$, $V_{ec}(n)$ – потенциал, учитывающий обменно-корреляционное взаимодействие.

Разложим V в окрестности n по величине изменения электронной плотности δn . Тогда уравнение (3.2.8) можно записать в виде

$$i\partial\psi_\mu/\partial t = \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_c(n_0(\mathbf{r})) + V_{ec}(n_0)\right)\psi_\mu + V_{eff}\psi_\mu + V\psi_\mu, \quad (3.2.11)$$

где

$$V_{eff}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{\delta n(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{dV_{ec}}{dn} \delta n.$$

Этот результат мы назовем поляризационным приближением в методе функционала плотности. Ограничение в (3.2.11) двумя членами разложения в ряд по изменению электронной плотности выражения для обменно-корреляционного взаимодействия электронов связано с тем, что при удержании более высоких степеней возникает опасность существенно более эффективной генерации нелинейных эффектов в сравнении с приближением Хартри—Фока, и результаты расчетов ухудшаются.

Другой опасной особенностью метода функционала плотности является то, что собственные значения одночастичного стационарного уравнения с обменно-корреляционным взаимодействием, вообще говоря, не совпадают с энергиями одночастичных возбуждений в системе. Соответственно неверным будет и расположение полюсов одночастичной функции Грина и положение нелинейных резонансов. Поэтому приближение локальной плотности применимо для частот далеких от резонансов в области дискретного спектра. В частности, хорошо описываются однофотонные процессы с учетом динамики взаимодействия разных оболочек атома. Применимо это приближение и в низкочастотном пределе.

Явное построение поляризационного потенциала может основываться на тех или иных дополнительных приближениях. Поляризационное приближение в пределе слабого поля дает известное приближение случайных фаз. Для однофотонных процессов это соответствует перенормировке однофотонной вершины за счет корреляционного взаимодействия. Приближение случайных фаз с большим успехом применено к расчету сложных атомных систем [11], включая отрицательные ионы. Диаграммная техника позволяет простым и ясным способом обобщить приближение случайных фаз на многофотонные процессы и получить интегральное уравнение для перенормировки k -фотонной вершины [12]. Графическое уравнение имеет вид, показанный на рис. 3.1. Соответственно можно записать интегральное уравнение для перенормировки k -фотонной вершины:

$$D_{fi}^{(k)}(\omega) = D_{fi}^{(k)} - \sum \frac{2\omega_{ni} W_{ifni} D_{ni}^{(k)}(\omega)}{\omega_{ni}^2 - (k\omega)^2}, \quad (3.2.12)$$

где $W_{ifni} = \langle if | |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} | ni \rangle$, $D_{fi}^{(k)}$ – матричный элемент, при расчете которого перенормирован $(k-1)$ – фотонный матричный элемент, т. е.

$$D_{fi}^{(k)} = \sum \frac{D_{fn}^{(1)} D_{ni}^{(k-1)}(\omega)}{\omega_{ni} - (k-1)\omega}. \quad (3.2.13)$$

На основании такого обобщения приближения случайных фаз для многофотонных процессов были, например, рассчитаны сечения двухфотонной ионизации атомов He и Xe [13]. Фактически перенормировке подвергалась только однофотонная вершина $D^{(1)}$. Далее мы приве-

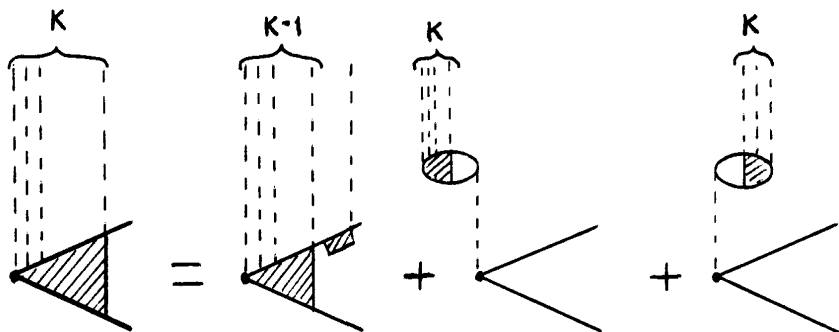


Рис. 3.1. Диаграмма Фейнмана для перенормировки многофотонной вершины за счет корреляционного взаимодействия в приближении случайных фаз

дем примеры применения этого приближения к расчету других конкретных фотопроцессов.

Рассмотренные нами методы учета корреляционного взаимодействия в многоэлектронных системах, помещенных в сильное внешнее переменное электромагнитное поле, позволяют проводить расчеты различных нелинейно-оптических процессов. К их числу можно отнести задачу о многофотонной ионизации сложных атомов и их многофотонном возбуждении, нелинейную ионизацию атомов с возбуждением остаточного иона, вынужденное тормозное излучение при рассеянии электронов на атомах в присутствии сильного электромагнитного поля, а также возбуждение в этих условиях атомов электронным ударом и многие другие.

3.3. Фотоотрыв электронов от отрицательных ионов

Важной особенностью отрицательных ионов является то, что корреляционное взаимодействие электронов сильно влияет на их строение. Особенно это заметно на примере отрицательных ионов атомов щелочных элементов. Энергии связи внешних электронов в этих ионах составляют несколько долей электрон-вольта, а сами они сильно неэк-

вивалентны, так что состояние одного близко к состоянию валентного электрона в нейтральном атоме, в то время как другой электрон слабо связан и более удален от сердцевины атома.

Корреляционное взаимодействие играет весьма заметную роль в однофотонных процессах. Наиболее просто это можно проследить на примере отрицательных ионов щелочных элементов и отрицательного иона атома водорода [12]. Выберем волновую функцию электрона в отрицательном ионе в виде

$$\psi_1(r) = \frac{B}{r} \left(\frac{\kappa}{2\pi} \right)^{1/2} (e^{-\kappa r} - e^{-\beta r}), \quad (3.3.1)$$

$$B = \frac{[\beta(\beta + \kappa)]^{1/2}}{\beta - \kappa},$$

являющемся аппроксимацией результатов, полученных вариационным методом. При таком выборе волновой функции слабосвязанного электрона в отрицательном ионе сечение фотоотрыва описывается соотношением

$$\sigma(\omega) = \frac{4\pi}{3c} B^2 \frac{\kappa p^3}{\omega^2} \left[1 - \left(\frac{\kappa^2 + p^2}{\beta^2 + p^2} \right)^2 - \frac{\alpha(\omega)(\kappa^2 + p^2)}{4p^3} (f(p, \kappa) - f(p, \beta)) \right]^2, \quad (3.3.2)$$

$$f(p, \gamma) = (\gamma^2 + p^2) \operatorname{arctg} \frac{P}{\gamma} - \gamma,$$

где $\alpha(\omega)$ – динамическая поляризуемость атома, p – импульс вылетевшего электрона при поглощении фотона с частотой ω . Корреляционное взаимодействие учитывается в формуле (3.3.2) членом, содержащим динамическую поляризуемость. При выводе формулы (3.3.2) предполагалось, что центрально-симметричной частью взаимодействия электрона с атомом в непрерывном спектре можно пренебречь, и волновые функции являются плоскими волнами. Результаты расчетов для иона Li^- ($\kappa = 0.21, \beta = 0.46$) представлены на рис. 3.2 кривой 1. Они хорошо согласуются как с экспериментальными данными (кривая 2), так и теоретическим расчетом методом сильной связи каналов (кривая 3) [14].

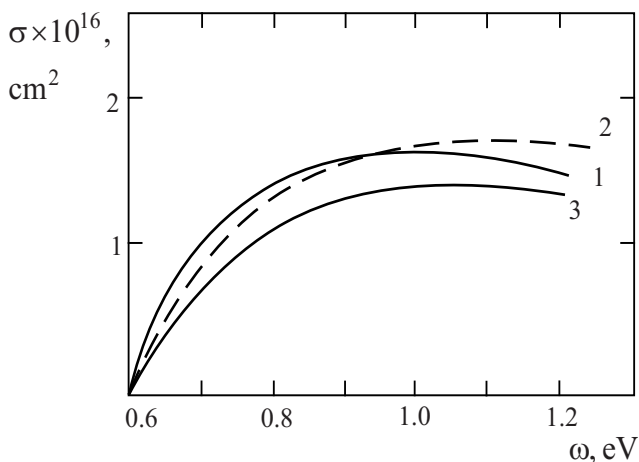


Рис. 3.2. Сечение однофотонного разрушения отрицательного иона Li^- как функция частоты: 1 – теоретический расчет по формуле (3.3.2), 2 – экспериментальные результаты, 3 – расчет методом сильной связи каналов в приближении дипольного матричного элемента длины

Аналогичным образом можно учесть корреляционное взаимодействие в случае двухфотонных процессов разрушения отрицательных ионов. Для учета виртуального возбуждения остова (атома) в первом порядке теории возмущений по корреляционному взаимодействию и во втором порядке по взаимодействию с полем следует рассмотреть диаграммы вида рис. 3.3, а также обменные диаграммы, получающиеся перестановкой порядка учета взаимодействия во времени. Отметим, что использование δ -потенциальной модели для двухфотонного отрыва s -электронов от отрицательных ионов полем линейной поляризации должно, по-видимому, приводить к заметным погрешностям, поскольку при поглощении двух фотонов электрон может перейти в s -состояние непрерывного спектра. В этом случае матричные элементы корреляционного взаимодействия будут завышены, поскольку сингулярность волновой функции сказывается наиболее сильным образом.

Несмотря на плодотворность прямого применения теории возмущений, ее использование при описании процессов более высоких порядков

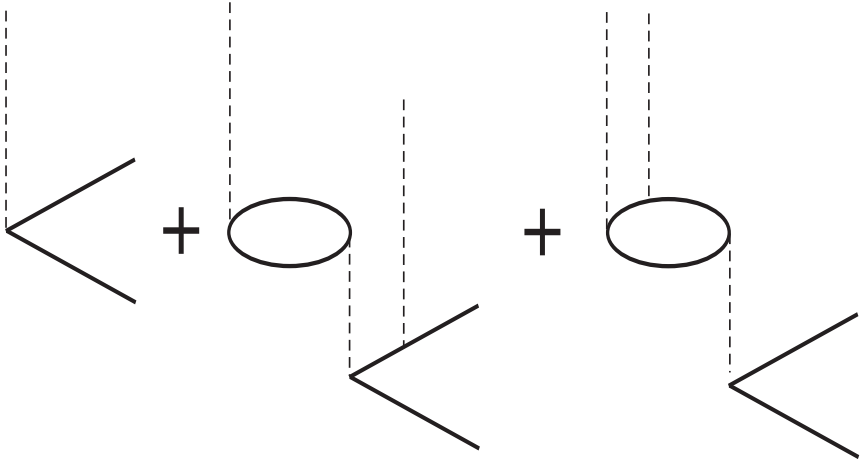


Рис. 3.3. Диаграммы Фейнмана для расчета двухфотонного распада отрицательного иона с учетом корреляционного взаимодействия электронов по теории возмущений

наталкивается как на технические, так и на принципиальные трудности. Техническая проблема заключается в стремительном росте числа диаграмм Фейнмана с ростом фотонности процесса, а также при попытке более полного учета корреляционного взаимодействия. Остается неясным и то, какая часть корреляционного взаимодействия учтена, а это уже затруднение принципиального характера.

Воспользуемся асимптотическим выражением для поляризационного потенциала (3.2.4) – (3.2.6) и обсудим роль поляризационных эффектов при произвольном многофотонном отрыве электронов от отрицательных ионов с валентными s -электронами. В таких отрицательных ионах слабосвязанный электрон находится на расстояниях, значительно превышающих размеры атома. Действительно, если ε_a – энергия связи электрона в атоме, а ε_i – энергия связи электрона в отрицательном ионе, то отношение этих расстояний можно оценить как $(\varepsilon_a/\varepsilon_i)^{1/2} \gg 1$. Гармоники поляризационного потенциала, соответствующие дипольным моментам, наведенным в атоме внешним полем, имеют асимптотический вид

$$V_{eff}^{(k)}(\mathbf{r}, t) \cong \frac{\mathbf{F}\mathbf{r}}{2r^3} F^{k-1} \chi^{(k)} (e^{-ik\omega t} + e^{ik\omega t}) , \quad (3.3.3)$$

где $\chi^{(k)}$ – нелинейная восприимчивость нейтрального атома на соответствующей гармонике. Члены с четными k отсутствуют, так как по дипольным правилам отбора по четности соответствующие восприимчивости обращаются в нуль. Отрицательно-частотная часть формулы (2.4) соответствует поглощению атомом кванта с частотой $k\omega$ ($k = 1, 3, 5, \dots$). Положительно-частотная часть описывает излучение таких квантов. Поскольку мы ограничили задачу исследованием фотоотрыва, то в низшем порядке теории возмущений можно не принимать во внимание положительно-частотные возмущения, пренебрегая, таким образом, процессами переизлучения фотонов. Поскольку исходный атом имеет основное s -состояние, то $\chi^{(k)}$ – скалярные величины.

Дальнейшее решение задачи основывается на интегральном уравнении, эквивалентном уравнению Дайсона (3.3.1) и описывающем распад квазистационарного состояния:

$$\psi = -i \int_{-\infty}^t dt' \int dr' G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') (U(\mathbf{r}') + V_{eff}(\mathbf{r}', t)) \psi(\mathbf{r}', t'), \quad (3.3.4)$$

где $G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t')$ – функция Грина электрона, движущегося в поле $F(t) = F_0 \cos(\omega t)$, $U(\mathbf{r})$ – статический потенциал взаимодействия электрона с атомом.

Поскольку U и V_{eff} спадают при $r \rightarrow \infty$ быстрее, чем $1/r$, то в интегральном уравнении (3.3.4) можно заменить в правой части волновую функцию ψ на невозмущенную волновую функцию слабо-связанного электрона

$$\psi = \psi_i(\mathbf{r}) \exp(-i\varepsilon_i t). \quad (3.3.5)$$

Вероятность w отрыва электрона в единицу времени линейно поляризованным полем можно определить через усредненный по времени полный поток электронов вдоль направления поляризации.

Оценим вклад в сечение многофотонного отрыва нелинейных восприимчивостей высших порядков. В условиях, когда характерный параметр задачи $\gamma = \omega|\varepsilon_i|/F_0 \gg 1$, амплитуда вероятности поглощения одного фотона пропорциональна γ^{-1} . Тогда с помощью выражения (3.3.3) можно оценить отношение слагаемых в выражении для полной амплитуды отрыва с участием k и $k+2$ гармоник поляризационного

взаимодействия. Оценивая отношение восприимчивостей, получим

$$\zeta^{(k)} = \frac{\varepsilon_a^2}{4(d_z^2)_{00}\omega_0^3}, \quad (3.3.6)$$

где $(d_z^2)_{00}$ – средний квадрат дипольного момента атома, ε_a – характеристическая энергия возбуждения атома. Численные оценки для щелочных атомов дают значения $\zeta > 10$. Таким образом, вкладом в вероятность фотоотрыва нелинейных восприимчивостей высших порядков ($k > 1$) можно пренебречь.

Если ограничиться учетом поляризуемости на частоте ω и вычислить с учетом неравенства $\omega/|\varepsilon| \ll 1$ интеграл в (3.3.4) методом перевала, то для вероятности n -фотонного отрыва получается

$$w_n = w_n^0 \left(1 - \omega^2 \frac{2^{3/2}\alpha}{B|\varepsilon_i|^{1/4}} \Phi(\mathbf{k}) \right)^2, \quad (3.3.7)$$

где $\Phi(\mathbf{k})$ – фурье-образ произведения поляризационного взаимодействия на волновую функцию слабосвязанного состояния $\varphi_i(\mathbf{r})$, B – коэффициент в асимптотике волновой функции

$$\varphi_1(\mathbf{r}) \sim \frac{B}{r} \left(\frac{|\varepsilon_i|}{2\pi^2} \right)^{1/4} \exp(-\kappa r), r \rightarrow \infty, \quad (3.3.8)$$

w_n^0 – вероятность фотоотрыва без учета поляризационных эффектов.

Наличие двух слагаемых в круглой скобке в формуле (3.3.7) отражает интерференцию прямой многофотонной ионизации и процесса, идущего через виртуальное возбуждение атома. Множитель, учитывающий поляризационные эффекты, является универсальным в том смысле, что он не зависит от степени многофотонности процесса и интенсивности поля. Выражение имеет минимум (обращается в нуль) при $\omega > |\varepsilon_i|$, поэтому поляризационные эффекты наиболее существенно проявляются при однофотонном отрыве. С ростом числа требуемых для отрыва фотонов они уменьшаются, так как уменьшается частота поля. Увеличение поляризационных эффектов с ростом частоты имеет ясный физический смысл. С ростом величины энергии, поглощенной атомом, увеличиваются его эффективные размеры, и перекрытие волновых функций слабосвязанного и возбужденного атомного электрона

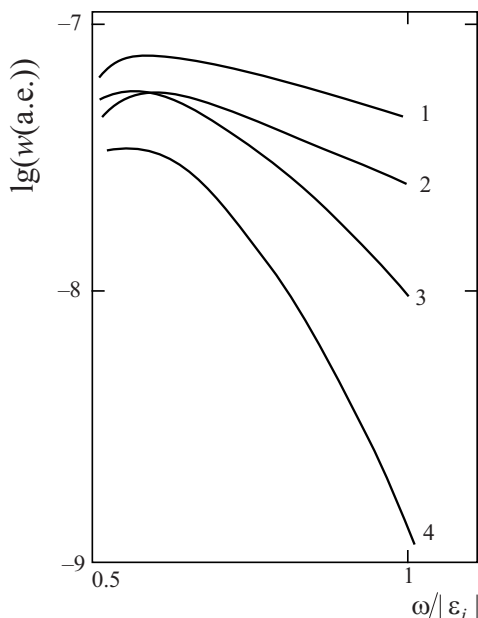


Рис. 3.4. Частотная зависимость вероятности двухфотонного распада отрицательных ионов щелочных атомов с учетом поляризационных эффектов (2 – Na^- , 3 – K^- , 4 – Rb^-), а также без учета таких эффектов (1 – Na^-)

также возрастает. Соответственно возрастает и корреляционное взаимодействие между ними.

На рис. 3.4 представлены результаты расчетов вероятности двухфотонного отрыва электронов от отрицательных ионов атомов щелочных металлов при напряженности лазерного поля $F_0 = 10^6$ В/см. Учет поляризации атома внешним полем приводит к изменению дисперсионной зависимости вероятности многофотонного отрыва электронов. В частности, происходит подавление абсолютной величины вероятности.

На рис. 3.5 приведена частотная зависимость вероятности пятифотонного распада отрицательных ионов щелочных атомов с учетом поляризационных эффектов. Физически эффект подавления вероятностей нелинейных процессов в атомной системе за счет корреляцион-

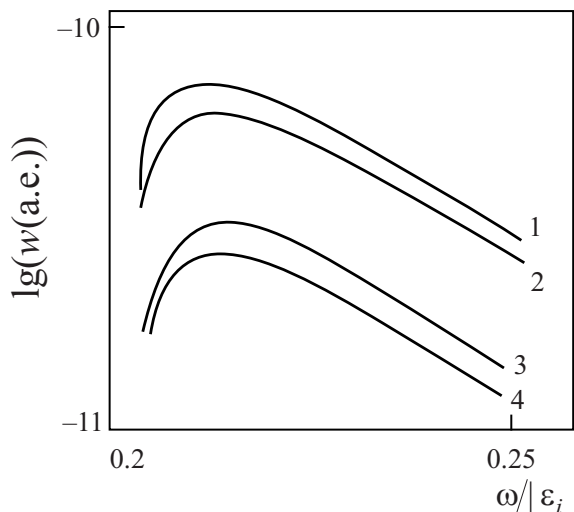


Рис. 3.5. Частотная зависимость вероятности пятифотонного распада отрицательных ионов щелочных атомов с учетом поляризационных эффектов (2 – Na^- , 3 – K^- , 4 – Rb^-), а также без учета таких эффектов (1 – Na^-)

ного взаимодействия можно объяснить следующим образом. Под действием внешнего поля электронная плотность остова перераспределяется. Наведенное при этом электрическое поле частично компенсирует действие внешнего поля в пределах атома. В результате суммарное воздействие, которое испытывает фотоэлектрон, становится слабее.

Известны сечения нелинейного разрушения ряда отрицательных ионов галогенов. Для них такое взаимодействие можно учесть в рамках теории возмущений при расчете поляризуемостей и сечений двухфотонного распада отрицательных ионов галогенов и щелочных атомов. При этом поляризационный потенциал аппроксимируется аналитически:

$$V_{eff}(\mathbf{r}, t) = \frac{\alpha \mathbf{F} \mathbf{r}}{r^3} [1 - \exp(-r/r_0)^3] \cos(\omega t), \quad (3.3.9)$$

где α – поляризуемость атома, r_0 – радиус внешней атомной оболочки, а множитель в квадратных скобках введен для того, чтобы в численных расчетах устранить расходимость при $r \rightarrow 0$. Описанная

процедура требует проведения довольно значительных по объему численных расчетов.

Существует более простой метод расчета сечений многофотонного разрушения отрицательных ионов, основанный на использовании приближения плоских волн с учетом корреляционных поправок. Такой подход позволяет получить простые аналитические выражения, описывающие нелинейный отрыв электрона от произвольного отрицательного иона галогена с хорошей точностью. Приближение плоских волн неоднократно применялось в задаче о многофотонном разрушении отрицательных ионов. Воспользуемся удобным в данной задаче выбором оператора поглощения фотонов поля в форме скорости: $V = \hat{v}F$, $\hat{v} = -i\hat{\mathbf{p}}\mathbf{e}/\omega$. Здесь $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор импульса, \mathbf{e} – вектор поляризации поля. При использовании приближенных гамильтонианов и, в частности, приближения плоских волн, численные значения сечений радиационных процессов, рассчитанные в приближении длины и в приближении скорости, отличаются. Выбор в пользу того или иного приближения делают обычно путем сравнения результатов теоретических расчетов с экспериментальными данными.

Вероятность n -фотонного разрушения отрицательного иона в единицу времени, рассчитанная в низшем порядке теории возмущений по взаимодействию иона с электромагнитным полем, выражается в виде:

$$dw^{(n)} = 2\pi N \left(\frac{2\pi I}{c\omega} \right)^n |K_{f1}^{(n)}|^2 \rho_f, \quad (3.3.10)$$

где N – число электронов во внешней оболочке, I – плотность потока фотонов, $K_{fi}^{(n)}$ – n -фотонный одноэлектронный матричный элемент, $\rho_f = p do$ – плотность конечных состояний с конечным импульсом \mathbf{p} в телесном угле do по энергетической шкале. Волновые функции непрерывного спектра нормированы условием $\psi = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$. Вероятность $dw^{(n)}$ связана с дифференциальным сечением процесса соотношением $dw^{(n)} = (d\sigma^{(n)})F^{(n)}$. Мы проводим все вычисления в атомной системе единиц. Для получения сечения в единицах см²ⁿ · сⁿ⁻¹ нужно умножить результат на $4.139 \cdot 10^{16} \cdot (6.761 \cdot 10^{-34})^n$.

Приближение плоских волн позволяет простым образом учесть и корреляционные эффекты. Ограничимся изменением за счет корреляций однофотонной вершины взаимодействия. В приближении случайных фаз уравнение для перенормированной однофотонной вершины

\tilde{v} можно записать как

$$\tilde{v} = v - \frac{N-1}{(2l+1)^2} \sum_{M, M_1} [\langle M | W G_{\varepsilon_1 + \omega} \tilde{v} | M_1 \rangle + \langle M | \tilde{v} G_{\varepsilon_1 - \omega} W | M_1 \rangle], \quad (3.3.11)$$

где G – одночастичная функция Грина оптического электрона, $W = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$ – межэлектронное взаимодействие. В формуле (3.3.11) проведено усреднение по проекциям углового момента M, M_1 остова в начальном и конечном состояниях.

Если ограничиться дипольным приближением, то можно записать $W \approx 1/r + \mathbf{r}'\mathbf{r}/r^3$. Формально такое разложение справедливо только асимптотически при $r \rightarrow \infty$. Однако в действительности оно точнее, поскольку из-за угловых правил отбора следующий член разложения, так же как и первый, не дает вклада в правую часть уравнения (3.3.11). Как известно, матричный элемент от \mathbf{r}/r^3 в форме ускорения можно выразить через матричный элемент длины и скорости в виде $\langle n | \mathbf{r}/r^3 | m \rangle = \omega_{nm}^2 \langle n | \mathbf{r} | m \rangle = -i\omega_{nm} \langle n | \dot{\mathbf{r}} | m \rangle$. С учетом этого в первом порядке теории возмущений по v будем иметь [15]:

$$\langle n | \tilde{v} | m \rangle = \langle n | v | m \rangle [1 - \omega_{nm}^2 (N-1) \alpha(\omega)/N], \quad (3.3.12)$$

где $\alpha(\omega)$ – динамическая поляризуемость. Множитель $(N-1)/N$ учитывает исключение корреляционного самодействия электронов. Представление матричного элемента взаимодействия \tilde{v} в виде (3.3.12) возможно только для отрицательных ионов галогенов. Волновые функции валентных электронов этих ионов являются эквивалентными и удовлетворительно воспроизводятся в приближении Хартри–Фока. В случае же отрицательных ионов атомов щелочных элементов внешние электроны не являются эквивалентными и соотношение (3.3.12) неприменимо.

Многофотонный матричный элемент $K_{fi}^{(n)}$ имеет вид

$$K_{fi}^{(n)} = \int \int \dots \dots \int \frac{\langle i | v | \mathbf{k}_1 \rangle \langle \mathbf{k}_1 | v | \mathbf{k}_2 \rangle \dots \langle \mathbf{k}_{n-1} | v | \mathbf{p} \rangle}{[\varepsilon_1 + \omega - k_1^2/2] \dots [\varepsilon_i + (n-1)\omega_{n-1} - k^2/2]} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 \dots d\mathbf{k}_{n-1}. \quad (3.3.13)$$

Для вычисления величины $K_{fi}^{(n)}$ по формуле (3.3.13) воспользуемся равенством

$$\langle \mathbf{k}_1 | -ie\nabla | \mathbf{k}_2 \rangle = (\mathbf{e}\mathbf{k}_1)\delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2). \quad (3.3.14)$$

Таким образом, для учета корреляционных эффектов в первом порядке теории возмущений достаточно в формуле (3.3.14) ввести в каждую вершину дополнительный множитель $[1 - (k_j^2 - k_{j-1}^2)\alpha(\omega)/2]^2$. Для всех промежуточных состояний в силу условия (3.3.14) справедливо соотношение $\mathbf{k}_{j-1} = \mathbf{k}_j = \mathbf{p}$. Поэтому дополнительный коэффициент исчезает во всех сомножителях, кроме первого. Интегрирование по всем промежуточным состояниям можно выполнить аналитически. Окончательный ответ для $K_{fi}^{(n)}$ имеет вид

$$K_{fi}^{(n)} = \frac{\langle i|\mathbf{p}\rangle(\mathbf{e}\mathbf{p})^n [1 - \omega^2 n^2 (N-1)\alpha(n\omega)/N]}{[\varepsilon + \omega - p^2/2] \dots [\varepsilon + (n-1)\omega - p^2/2]}. \quad (3.3.15)$$

Волновая функция связанного электрона в импульсном представлении $\langle i|\mathbf{p}\rangle$ может быть записана как

$$\langle i|\mathbf{p}\rangle = g(p)Y_{lm}(\mathbf{p}/p), g(p) = (2/\pi)^{1/2}(-i)^l \int j_1(pr)R_{i1}(r)r^2 dr, \quad (3.3.16)$$

где $j_1(pr)$ – сферическая функция Бесселя, $R_{i1}(r)$ – радиальная волновая функция начального состояния оптического электрона в отрицательном ионе. Учтем, что $p^2/2 = \varepsilon_i + n\omega$. После усреднения по проекциям момента электрона в начальном состоянии m и интегрирования по углам вылета электрона полное сечение имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma_c^{(n)} &= 2\pi \left(\frac{2\pi}{c\omega} \right)^n [1 - \omega^2 n^2 (N-1)\alpha(n\omega)/N]^2 \times \\ &\times \frac{N(2l+1)g(p)^2 p^{2n+1}}{(2n+1) [(n-1)!\omega^{(n-1)}]^2}. \end{aligned} \quad (3.3.17)$$

Поскольку для любой фотонности процесса формула имеет универсальный вид, то сечение многофотонного отрыва легко выразить через сечение однофотонного отрыва:

$$\sigma^{(n)} = 2\pi \left(\frac{2\pi}{c\omega} \right)^{n-1} \frac{\sigma^{(1)} p^{2n-2}}{(2n+1) [(n-1)!\omega^{(n-1)}]^2}. \quad (3.3.18)$$

Этот результат обладает определенной практической ценностью, поскольку сечения однофотонного разрушения многих отрицательных ионов хорошо известны, а расчет по формуле (3.3.18) вполне элементарен. Окончательный результат учета корреляционного взаимодействия при расчете сечения n -фотонного отрыва $\sigma_c^{(n)}$ в приближении плоских волн может быть записан через сечение (3.3.18), полученное без учета корреляционного взаимодействия, в виде

$$\sigma_c^{(n)} = \sigma^{(n)} [1 - \alpha(\omega)(N-1)(n\omega)^2/N]^2. \quad (3.3.19)$$

На рис. 4.6 показаны результаты расчетов сечения двухфотонного разрушения отрицательного иона F^- как функции частоты. Как видно из приведенных результатов, теоретический расчет воспроизводит экспериментальное значение в пределах его погрешности.

3.4. Многоэлектронные эффекты при фотоионизации атомов

Расчет сечений фотоотрыва электронов из различных оболочек сложных атомов в одноэлектронном приближении в целом ряде случаев показывает неудовлетворительное согласие с экспериментальными данными. В частности, неверно передается положение максимумов в дисперсионных кривых для сечений отрыва электронов из d -оболочек атомов тяжелых элементов. Естественной причиной таких отличий является остаточное взаимодействие между электронами. Соответственно, поглощение фотонов атомом носит неодночастичный характер.

Кроме прямого поглощения кванта оптическим электроном, возможно поглощение кванта света другими электронами атома с последующей передачей энергии оптическому электрону за счет корреляционного межэлектронного взаимодействия. При этом, зачастую, корреляционное взаимодействие при явном пространственном разделении оболочек невелико и может быть учтено в первом порядке теории возмущений по взаимодействию. В то же время при сильном перекрытии виртуально-возмущенных состояний с внутриатомными состояниями, корреляционное взаимодействие довольно велико, и требуется его

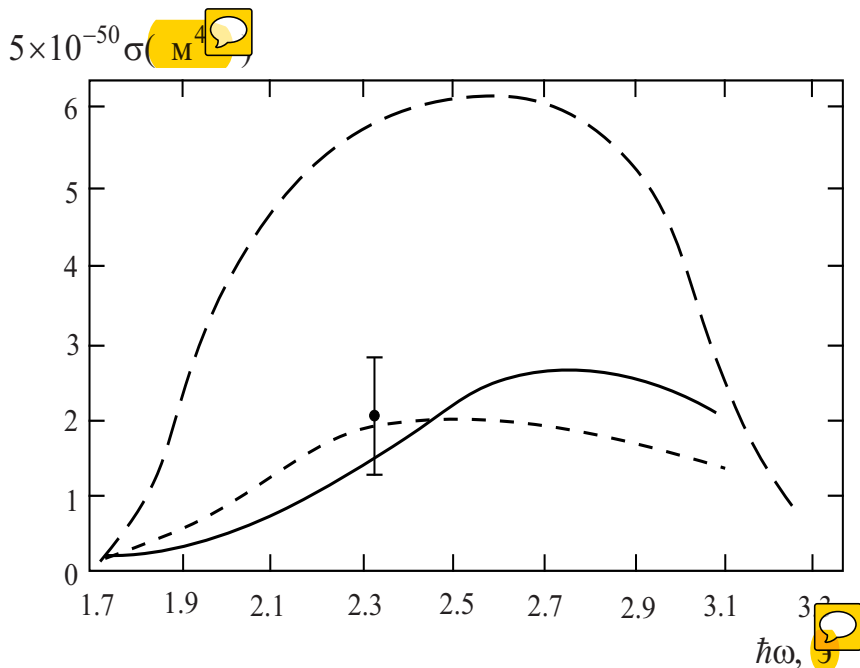


Рис. 3.6. Сечение двухфотонного разрушения отрицательного иона F^- как функция частоты: сплошная линия – результаты расчетов по формуле (3.3.17), пунктирная линия – корреляционные расчеты с поляризационным потенциалом (3.3.9), штрих пунктирная линия – расчеты с учетом искажения плоских волн. Экспериментальное значение приведено по работе [16]

основательный учет. Это может быть достигнуто в рамках приближения случайных фаз с обменом.

Использование для приближения случайных фаз с обменом приближения Хартри—Фока в качестве нулевого приводит к ряду трудностей, связанных с нелокальностью возникающих при этом одночастичных потенциалов. Так при построении функций Грина приходится пользоваться спектральным представлением. Это, в свою очередь, требует проведения суммирования по бесконечному дискретному спектру и интегрирования по непрерывному, что можно осуществить в приближении Хартри—Фока лишь с помощью специальных численных прие-

мов. В то же время использование приближений локальной плотности позволяет обойти эти трудности и получить конечные выражения для функций Грина. При этом, правда, как мы уже отмечали, полюсы функций Грина не будут в достаточной степени соответствовать экспериментальным значениям энергии, но в задачах об однофотонном отрыве вдали от дискретных и автоионизационных резонансов такой недостаток не является принципиальным [11].

Алгоритм перенормировки однофотонной вершины за счет корреляционного взаимодействия, предложенный в [17], основан на использовании локального приближения для атомного потенциала и пренебрежении обменными эффектами. Это позволяет получить достаточно простое интегральное уравнение для вершины. Итерации этого уравнения быстро сходятся к решению, а алгоритм обладает высокой численной эффективностью и устойчивостью. Расчеты можно проводить для любого атома периодической таблицы элементов Менделеева. Для применения полученных данных по сечениям к конкретным фотопроцессам необходимо произвести свертку сечений с экспериментальным спектром. Под действием переменного поля достаточно большой частоты атомная система может терять свои внутренние электроны путем однофотонного отрыва, как это показано на рис. 3.7 для d -электронов. При этом, очевидно, энергия фотона достаточна и для отрыва менее связанных верхних электронов. Внешнее электрическое поле вызывает поляризацию верхних электронов. Это приводит к искажению первоначального потенциала $V(\mathbf{r}, t)$ и добавлению к нему переменного во времени слагаемого $\delta V(\mathbf{r}, t)$.

Суммарное эффективное поле

$$V_{eff}(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r}, t) + \delta V(\mathbf{r}, t). \quad (3.4.1)$$

Тем самым, учтены диаграммы, показанные на рис. 3.8, где фотон поглощается электроном, электрон переходит в непрерывный спектр и, не успев улететь, передает путем кулоновского взаимодействия свою энергию другому электрону. Чтобы задача была самосогласованной, в однофотонной вершине должно стоять эффективное поле $V_{eff}(\mathbf{r})$. Для пространственной части имеем при единичной напряженности поля

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = \mathbf{r} \mathbf{e} - \sum_{q,j} \frac{2\omega_{qj} \langle j | |\mathbf{r} - \mathbf{r}|^{-1} | q \rangle V_{qj}}{\omega_{qj}^2 - \omega^2}, \quad (3.4.2)$$

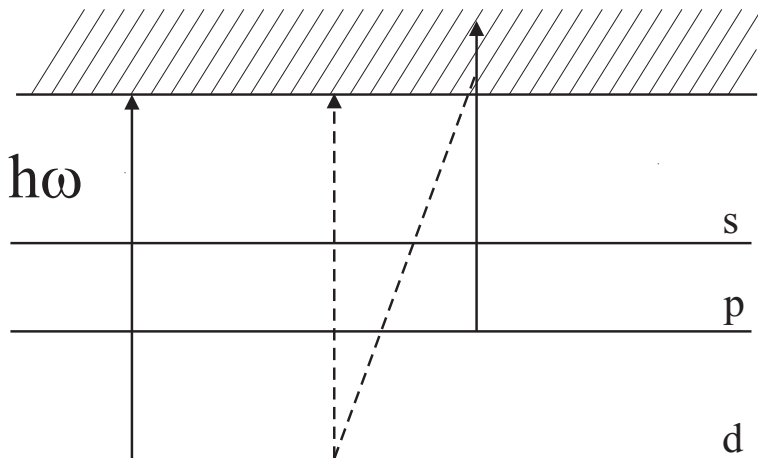


Рис. 3.7. Диаграмма уровней энергии при фотоионизации внутренних оболочек сложных атомов

где $V_{eff} = \tilde{d}(\mathbf{r}) \cos \theta$, \mathbf{e} – единичный вектор поляризации, θ – угол между \mathbf{r} и \mathbf{e} . Индекс j – означает суммирование по исходным состояниям электронов, способных участвовать в виртуальном возбуждении. Индекс q – указывает на суммирование по промежуточным состояниям.

Вводя вместо суммирований по атомным состояниям j суммирование по подоболочкам k и, отделяя угловые коэффициенты, полу-

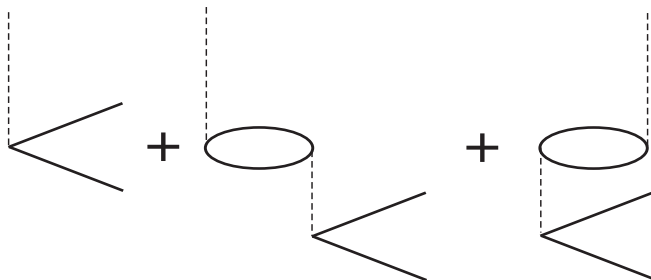


Рис. 3.8. Диаграммы Фейнмана, учитывающие корреляционное взаимодействие электронов при однофотонной ионизации атомов

чим:

$$\tilde{d}(r) = r - \sum_{qk} C_{qk} \frac{J_{qk}^{(1)}(r) \tilde{d}_{qk}}{\omega_{qk}^2 - \omega^2}, \quad (3.4.3)$$

где $J_{kq}^{(1)} = \int_0^\infty u_k(r') u_q(r') (r_{<})(r_{>})^{-2} dr'$, $\tilde{d}_{qk} = \int_0^\infty u_q(r') u_k(r') \tilde{d}(r') dr'$, $C_{qk} = (N_k - 1)(2l_q + 1)/3$, l_k – орбитальные моменты состояний оболочек k , имеющей N_k электронов с радиальными волновыми функциями $u_k(r)$; l_q – орбитальные моменты промежуточных состояний с радиальными волновыми функциями $u_q(r)$.

Через функцию Грина то же интегральное уравнение (3.4.3) запишется в виде

$$\tilde{d}(r) = r - \sum_{l_q, k} C_{l_q l_k} g_{l_q}(E_{l_k} \pm \omega, r_1, r_2) \frac{r_{<}}{r_{>}^2} \tilde{d}(r_2) u_k(r_1) u_k(r_2) dr_1 dr_2. \quad (3.4.4)$$

В действительности функцию Грина $g_{l_q}(E_{l_k} - \omega, r_1, r_2)$ можно отбросить как быстро затухающую на малых расстояниях. Итак

$$\tilde{d}(r) = r - \sum_{l_q, k} C_{l_q l_k} g_{l_q}(E_{l_k} + \omega, r_1, r_2) \frac{r_{<}}{r_{>}^2} \tilde{d}(r_2) u_k(r_1) u_k(r_2) dr_1 dr_2. \quad (3.4.5)$$

Интегральное уравнение (3.4.5) можно решать методом итераций с начальным приближением $\tilde{d} = r$. Функция Грина g_l строится как произведение

$$g_l(E, r_1, r_2) = \chi_{kl}^{(+)}(r_{<}) \chi_{kl}(r_{>}), \quad (3.4.6)$$

где χ_{kl} – регулярное, а $\chi_{kl}^{(+)}$ – нерегулярное решение радиального уравнения Шредингера, $r_{>} (<)$ – большая (меньшая) из величин r_1, r_2 .

Асимптотика $\chi_{kl}(r)$ в нуле: $\chi_{kl} \sim r^{l+1}$. Асимптотика при $r \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\operatorname{Re} \chi_{kl}^{(+)}(r) \sim \frac{1}{\sqrt{k(r)}} \cos \left(\int_{r_1}^r k(r') dr' + \varphi \right), \quad (3.4.7)$$

$$\chi_{kl}(r) = \operatorname{Im} \chi_{kl}^{(+)}(r) \sim \frac{1}{\sqrt{k(r)}} \sin \left(\int_{r_1}^r k(r') dr' + \varphi \right),$$

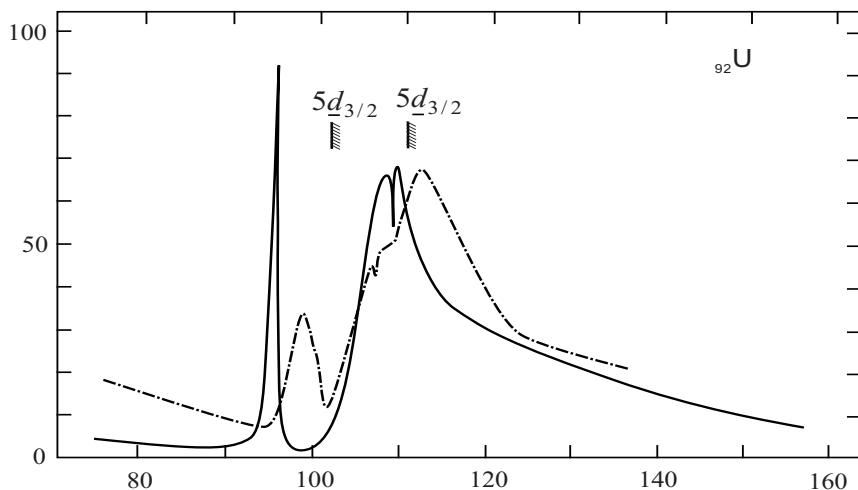


Рис. 3.9. Сечение ионизации d подоболочки U. Сплошная линия – расчет, штрих-пунктир – экспериментальные данные

$$k(r) = \sqrt{\left(2(E - U(r) - \frac{(l + 1/2)^2}{2r^2})\right)}.$$

Решения χ_{kl} , и, следовательно, $\text{Im } \chi_{ke}^{(+)}$, а также $\text{Re } \chi_{ke}^{(+)}$ можно построить численно, стартуя с асимптотик нуле и на бесконечности (3.4.7) методом Нумерова [18].

На рис. 3.9 и 3.10 сплошными линиями приведены результаты расчета [17] сечений ионизации из $5d$ оболочек Th и U, а также нормированные результаты экспериментальных измерений, представленные пунктирными кривыми. Видно весьма хорошее согласие для атома Th и заметно худшее согласие для U, связанное с ростом спин-орбитального взаимодействия. Хотя такие расчеты не обладают спектроскопической точностью, они позволяют получить достаточно хорошие результаты при расчетах взаимодействия атомов с широкополосным излучением, в частности с тепловым излучением в рентгеновском диапазоне, которое можно моделировать планковским спектром.

Сечения ионизации из разных оболочек сложных атомов имеют максимумы при различных частотах. Эффективность образования элек-

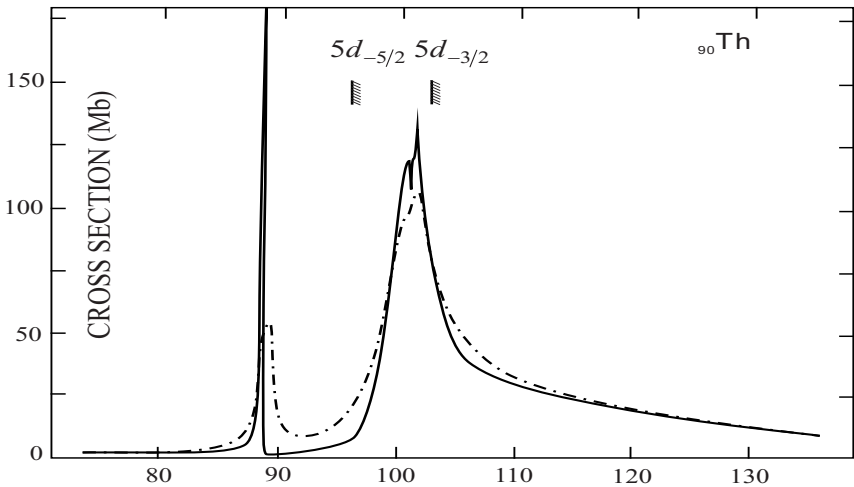


Рис. 3.10. Сечение ионизации d подоболочки Th. Сплошная линия – расчет, штрих-пунктир – экспериментальные данные

тронных вакансий при облучении тепловым источником определяется интегралом перекрытия соответствующих сечений с планковским спектром рентгеновского излучения. Среднее сечение в атомных единицах равно

$$\bar{\sigma} = \int_0^{\infty} \sigma(\omega) f(\omega) d\omega, \quad (3.4.8)$$

где

$$f(\omega) = \frac{(x/\pi)^2}{(e^x - 1) \cdot 0.244T} \quad x = \omega/T, \quad \omega_{\max} = 2.822 \cdot T. \quad (3.4.9)$$

При расчете среднего значения $\bar{\sigma}$ температура источника подбиралась таким образом, чтобы сделать образование данной вакансии максимально эффективным. Результаты соответствующих расчетов приведены в таблице 1.

Таким образом, при фотоионизации внутренних атомных оболочек обменные и корреляционные эффекты могут быть учтены при определении волновых функций и энергий состояний на основе локального приближения близкого к $X\alpha$ -методу. При расчете однофотонных

Таблица 1.

Атом	Оболочки	Температура, Ry	Среднее сечение (а. е.)
Cs	4d	5.52	25.27
	5s		0.76
	5p		3.56
Ba	4d	5.81	21.72
	5s		0.57
Zn	3d	5.88	20.69
	4s		2.11×10^{-3}
Xe	4d	4.88	23.36
	5s		0.7
	5p		3.85
Kr	3d	15.14	28.63
	4s		2.63×10^{-2}
	4p		
I	4d 5s	3.8	21.89
	5p		0.3
			1.66

переходов роль корреляции может быть эффективно учтена в приближении случайных фаз. Отличие, возникающее за счет учета корреляций, для сил осцилляторов определяется фактором порядка 2, а для сечений фотоотрыва заключается в появлении новых дисперсионных зависимостей. При расчете образования вакансий рентгеновским излучением с достаточно выраженным максимумом в спектральном распределении учет корреляции совершенно необходим, поскольку меняет эффективность в десятки раз, а также радикально сказывается на селективности образования вакансий в определенной оболочке.

Литература

1. *Киржниц Д.А.* Полевые методы теории многих частиц. – М.: Либроком, 2010.
2. *Мигдал А.Б.* Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер. – М.: Наука, 1983.
3. *Гиббс Дж. В.* Термодинамика и статистическая физика. – М.: Наука, 1982.
4. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. – М.: Физматлит, 2005.
5. *Seminozhenko V.P.* Kinetics of interaction quasiparticles in strong external fields // Phys. Rep. 1982. V. 91. P. 103–182.
6. *Пестов Э.Г.* Теория релаксации квантовых систем в сильном электромагнитном поле / Труды ФИАН им. П.Н. Лебедева. 1988. Т. 187. С. 60–116.
7. *Ритус В.И.* Квантовые эффекты взаимодействия элементарных частиц с интенсивным электромагнитным полем / Труды ФИАН им. П.Н. Лебедева. 1979. Т. 111. С. 5–151.
8. *Бьеркен Дж. Д., Дрелл С.Д.* Релятивистская квантовая теория. – М.: Наука, 1978.
9. *Hohenberger P., Kohn W.* Inhomogeneous electron gas // Phys. Rev. B. 1964. V. 136. P. 864–871.
10. *Kohn W., Sham L.J.* Self-consistent equation including exchange and correlation effects // Phys. Rev. 1965. V. 140. P. 1133–1138.
11. *Амусья М.Я.* Атомный фоттоэффект. – М.: Наука, 1987.
12. *Головинский П.А., Киян И.Ю.* Нелинейные процессы в отрицательных ионах // УФН. 1990. Т. 160. С. 97–140.
13. *Wendin G., Jönson L., l’Huillier A.* Many-electron dynamics of heavy atoms in intense laser fields: effects of screening and correlation // J. Opt. Soc. Am. B. 1987. V. 4. P. 833–845.

14. *Mott G.* Отрицательные ионы. – М.: Мир, 1979.
15. *Golovinskiy P.A.* Multiphoton detachment of negative halogen ions // Phys. Lett. A. 1993. V. 183. P. 89–92.
16. *Pan Chi Gao Bo, Starace A.F.* Two-photon ionization of the Ar atom and detachment of F^- // Phys. Rev. A. 1990. V. 41. P. 6271–6286.
17. *Wendin G.* Photoionization of Metallic Lanthanum, Thorium, and uranium in a local-density-based random-phase approximation // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 724–727.
18. *Хемминг P.B.* Численные методы. – М.: Наука, 1972.

Глава 4

Поляризационные свободно-свободные и свободно-связанные переходы

4. 1. Спонтанное тормозное излучение на атомах и ионах с учетом поляризационного канала

Рассмотрим тормозное излучение при рассеянии быстрых заряженных частиц на атомах с учетом вклада в процесс динамической поляризации электронного остова мишени, т. е. поляризационного тормозного излучения [1-5]. Предполагается, что скорость налетающей частицы такова, что борновский параметр задачи меньше единицы (в этом параграфе, если не оговорено противное, используем релятивистскую систему единиц ($\hbar = c = 1$) :

$$\eta = Z/v_0 \ll 1. \quad (4.1.1)$$

Здесь Z – заряд ядра атома, v_0 – начальная скорость рассеивающегося электрона. Неравенство (4. 1.1) обратно критерию квазиклассического движения электрона в кулоновском поле (2. 2.8) и является необходимым условием применимости борновского приближения. Напомним, что последнее означает слабость возмущения движения налетающей частицы актом рассеяния и возможность использования плоских волн в качестве волновых функций налетающей частицы. Формула (4. 1.1) может быть переписана в виде $v_0 \gg v_K$, где v_K – характерное значение скорости атомных электронов на ближайшей к ядру K -оболочке. Таким образом, неравенство (4. 1.1) выполняется только для достаточно быстрых, в том числе релятивистских налетающих частиц.

В борновском приближении (4. 1.1), когда движение налетающей частицы слабо возмущается в ходе тормозного излучения, для вектор-потенциала электромагнитного поля налетающей частицы справедливо следующее выражение:

$$\mathbf{A}^{(0)}(q_1) = \frac{4\pi e_0}{q_1^0} \frac{\mathbf{v} q_1^0 - \mathbf{q}_1}{(q_1^0)^2 - \mathbf{q}_1^2}, \quad q_1^0 = \mathbf{q}_1 \mathbf{v}_0, \quad (4. 1.2)$$

где \mathbf{v}_0 – скорость налетающей частицы, $q_1 = \{q_1^0, \mathbf{q}_1\}$ – изменение энергии-импульса налетающей частицы, e_0 – ее заряд.

Амплитуду поляризационного тормозного излучения можно вычислить (в духе метода эквивалентных фотонов Ферми), заменив налетающую частицу создаваемым ею полем по формуле (4. 1.2). Тогда в рассматриваемом здесь случае нерелятивистских атомных электронов единственная релятивистская степень свободы – налетающая частица – будет исключена путем такой замены, и можно пользоваться нерелятивистским формализмом для вычисления амплитуды тормозного излучения.

Вычислим, заменив налетающую частицу ее полем, амплитуду поляризационного тормозного излучения для нерелятивистского много-электронного атома ($Z \ll 137$) в пренебрежении обменом налетающего и связанных электронов. Используем аксиальную калибровку электромагнитного потенциала ($A_0 = 0$). Нерелятивистский гамильтониан возмущения атомных электронов электромагнитным полем имеет

вид

$$\hat{V} = \frac{e}{2m} \sum_j \left\{ \hat{\mathbf{p}}_j \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_j, t) + \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_j, t) \hat{\mathbf{p}}_j + e \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}_j, t) \right\}, \quad (4.1.3)$$

$\hat{\mathbf{p}}_j = -i \nabla_j$, $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}^{ph} + \mathbf{A}_{fi}^{(0)}$ – суммарный вектор-потенциал, оператор $\hat{\mathbf{A}}^{ph}$ описывает фотонное поле ($kx = \omega t - \mathbf{k}\mathbf{r}$, $\omega = |\mathbf{k}|$)

$$\hat{\mathbf{A}}^{ph}(x) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \left\{ \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \exp(-ikx) + \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \sigma}^* \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^+ \exp(ikx) \right\}, \quad (4.1.4)$$

где $\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \sigma}$ – орт поляризации фотона, $\hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^+$, $\hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}$ – операторы рождения и уничтожения фотонов; $\mathbf{A}_{fi}^{(0)}$ дается формулой (4.1.2) – это внешнее классическое поле, порождаемое налетающей частицей.

Переходя к представлению взаимодействия

$$\hat{V}_{int} = \exp(iH_a t) \hat{V} \exp(-iH_a t),$$

имеем для оператора рассеяния:

$$\hat{S} = T \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{\infty} \hat{V}_{int}(t) dt \right\}. \quad (4.1.5)$$

Вклад в амплитуду поляризационного тормозного излучения в низшем порядке теории возмущений (во втором по заряду электрона) дают первый и второй члены разложения \hat{S} , (нулевой член этого разложения – единица – соответствует, очевидно, неизменному состоянию системы). В члене первого порядка вклад в процесс дает слагаемое, содержащее квадрат суммарного вектор-потенциала, в члене второго порядка по возмущению – слагаемое, содержащее $\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}}$. Согласно физической картине поляризационного тормозного излучения нужно учитывать слагаемые, содержащие смешанное произведение $\hat{\mathbf{A}}_{ph}$ и $\mathbf{A}_{fi}^{(0)}$. Итак, матричный элемент процесса представляется в виде

$$S_{fi}^{pol} = S_{fi}^{(1)} + S_{fi}^{(2)},$$

где

$$S_{fi}^{(1)} = -i \langle \Phi_f | \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(iH_a t) \frac{e^2}{2m} \times$$

$$\times \sum_{j=1}^N 2 \hat{\mathbf{A}}^{ph}(\mathbf{r}_j, t) \mathbf{A}_{fi}^{(0)}(\mathbf{r}_j, t) \exp(-iH_a t) |\Phi_i\rangle, \quad (4.1.6)$$

причем $|\Phi_j\rangle = |j\rangle |n_{\mathbf{k},\sigma}\rangle$, так как переменные, связанные с налетающей частицей, уже учтены в $\mathbf{A}_{fi}^{(0)}$. С учетом сказанного из (4.1.6) находим

$$S_{fi}^{(1)} = -2i\pi \delta(\varepsilon_f + E_f + \omega - \varepsilon_i - E_i) \times \\ \times \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma}^* \mathbf{A}_{fi}^{(0)}(q_1) \langle f | \sum_{j=1}^N \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) | i \rangle \frac{e^2}{m}, \quad (4.1.7)$$

где $\mathbf{A}_{fi}^{(0)}(q_1)$ – пространственно-временной фурье-образ поля налетающей частицы, вычисленный на четырех-векторе $q_1 = \{\varepsilon_f - \varepsilon_i, \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i\}$, а $\varepsilon_{i,f}$, $\mathbf{p}_{i,f}$ – энергия и импульс начального и конечного состояний налетающей частицы, $E_{i,f}$ – энергия начального и конечного состояния атома, $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{k}$ – переданный атому импульс. Спиновыми эффектами пренебрегаем. Для $S_{fi}^{(2)}$ аналогично имеем выражение:

$$S_{fi}^{(2)} = -\frac{1}{2} \langle \Phi_f | T \iint dt dt' \hat{V}_{int}(t) \hat{V}_{int}(t') | \Phi_i \rangle. \quad (4.1.8)$$

После несложных преобразований $S_{fi}^{(2)}$ приводится к виду:

$$S_{fi}^2 = -e^2 2\pi \delta(\Delta E_i) \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma,l}^* A_{fi,s}^{(0)}(q_1) \times \\ \times \langle f | \int d\tau \exp(i\omega\tau) \hat{j}^l(\mathbf{k}, \tau) \hat{j}^s(\mathbf{q}_1) | i \rangle, \quad (4.1.9)$$

где

$$j^l(\mathbf{k}, \tau) = \\ = \exp(iH_a\tau) \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N \{ \hat{p}_j^l \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) + \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \hat{p}_j^l \} \exp(-iH_a\tau)$$

– пространственный фурье-образ оператора тока атомных электронов в представлении взаимодействия.

Складывая $S_{fi}^{(1)}$ и $S_{fi}^{(2)}$, получаем амплитуду поляризационного тормозного излучения в виде:

$$S_{fi}^{pol} = 2\pi i \delta(\varepsilon_f + E_f + \omega - \varepsilon_i - E_i) (q_1^0)^2 \times \\ \times \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} e_{\mathbf{k},\sigma,l}^* A_{fi,s}^{(0)}(q_1) \langle f | \hat{c}^{ls}(k, \mathbf{q}_1) | i \rangle. \quad (4.1.10)$$

В выражении (4.1.10) $\hat{c}^{ls}(k, \mathbf{q}_1)$ – оператор рассеяния электромагнитного поля на атоме в нерелятивистском (по атомным электронам) приближении, который можно представить в следующей форме:

$$\hat{c}^{ls}(k, \mathbf{q}_1) = \frac{e^2}{m (q_1^0)^2} \times \\ \times \left[\text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \exp(i\omega\tau) T \left\{ \hat{j}^l(\mathbf{k}, \tau) \hat{j}^s(\mathbf{q}_1, 0) \right\} - \delta^{ls} n(\mathbf{q}) \right], \quad (4.1.11)$$

$n(\mathbf{q}) = \sum_{j=1}^N \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j)$ – фурье-образ оператора электронной плотности атома. Полученное выражение для амплитуды поляризационного тормозного излучения (4.1.10) соответствует его интерпретации как процесса рассеяния собственного поля налетающей частицы на атомных электронах с преобразованием в тормозной фотон.

Запишем матричный элемент $c_{fi}^{ls}(k, \mathbf{q}_1)$ через сумму по промежуточным состояниям атомных электронов:

$$c_{fi}^{ls}(k, \mathbf{q}_1) = \frac{e^2}{m (q_1^0)^2} \times \\ \times \left\{ \sum_n \left[\frac{j_{fn}^l(\mathbf{k}) j_{ni}^s(\mathbf{q}_1)}{\omega_{fn} + \omega + i0} + \frac{j_{fn}^s(\mathbf{q}_1) j_{ni}^l(\mathbf{k})}{\omega_{in} - \omega + i0} \right] - \delta^{ls} n_{fi}(\mathbf{q}) \right\}. \quad (4.1.12)$$

В случае сферически-симметричного состояния $|i\rangle$ для $f = i$, $\mathbf{k} = \mathbf{q}_1 = 0$ из (4.1.12) следует известное выражение для дипольной поляризуемости атома:

$$c_{ii}^{ls}(\mathbf{q}_1, \mathbf{k} \rightarrow 0) \rightarrow \alpha(\omega) \delta^{ls} = \delta^{ls} \frac{e^2}{m} \sum_n \frac{f_{in}}{\omega_{in}^2 - \omega^2}, \quad (4.1.13)$$

где f_{in} – сила осциллятора перехода $i \rightarrow n$. В формулах (4.1.12) – (4.1.13) подразумевается, что отстройка от резонанса Δ достаточно велика, так что: $\Delta = |\omega - \omega_{f(i)n}| \gg \Gamma_{f(i)n}$, где $\Gamma_{f(i)n}$ – ширина линии перехода $n \rightarrow f(i)$. В противном случае в данных выражениях необходимо учитывать ширину линии соответствующих переходов.

Вычислим теперь амплитуду статического («традиционного») тормозного излучения, обусловленного испусканием фотона налетающей частицей в результате торможения в статическом поле мишени с учетом возможного возбуждения атомных электронов. Используем вновь интерпретацию тормозного излучения как процесса рассеяния виртуального фотона в реальный. Теперь удобно считать, что виртуальные фотоны создаются атомом (ядром и связанными электронами). Для покоящегося атома и нерелятивистских атомных электронов создаваемые ими виртуальные фотоны в основном продольные. В этом случае удобно использовать кулоновскую калибровку электромагнитного потенциала ($\text{div} \mathbf{A} = 0$), поскольку тогда можно учитывать лишь его временную компоненту. Пространственные компоненты описывают в кулоновской калибровки поперечную часть поля и в рассматриваемом случае малы. Временная компонента потенциала виртуального фотона, создаваемого атомом, равна

$$A_{fi}^0 = - \int d1' D_{00}(1, 1') \langle f | \hat{J}^0(1') | i \rangle, \quad (4.1.14)$$

где $\hat{J}^0(1) = Ze \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0) - e \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_j)$ – оператор плотности заряда атома в координатном представлении (\mathbf{r}_0 – радиус-вектор ядра), $D_{00}(1, 1')$ – временная компонента фотонного пропагатора. Применяя стандартные правила квантовой электродинамики, можно получить выражение для амплитуды статического тормозного излучения:

$$S_{fi}^{st} = -2\pi i \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} e_0^2 e_{\mathbf{k}, \sigma, \nu}^* T^\nu(p_{f,i}; k) A_{fi}^0(q) \delta(\varepsilon_f + E_f + \omega - \varepsilon_i - E_i). \quad (4.1.15)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$T^\nu = \frac{\bar{u}_f}{\sqrt{2\varepsilon_f}} \left\{ \gamma^\nu \frac{p_f \gamma + \gamma k + m_0}{(p_f + k)^2 - m_0^2} \gamma^0 + \right.$$

$$+ \gamma^0 \frac{p_i \gamma - \gamma k + m_0}{(p_i - k)^2 - m_0^2} \gamma^\nu \left\{ \frac{\bar{u}_i}{\sqrt{2\varepsilon_i}} \right\}, \quad (4.1.16)$$

где γ^ν – матрицы Дирака, $\bar{u}_{i,f}$ – биспинорные амплитуды начального и конечного состояния налетающей частицы, e_0 , m_0 – ее заряд и масса, k – четыре-вектор фотона. По дважды повторяющимся индексам в формуле (4.1.15) осуществляется суммирование. Временная компонента четырех-потенциала электромагнитного поля мишени дается выражением:

$$A_{fi}^0(\mathbf{q}) = (4\pi/\mathbf{q}^2) \{ \delta_{fi} Ze - e n_{fi}(\mathbf{q}) \}. \quad (4.1.17)$$

Таким образом, полная амплитуда тормозного излучения релятивистской налетающей частицы на нерелятивистском атоме ($Z \ll 137$) с учетом поляризационного механизма и возможного возбуждения атомных электронов имеет вид:

$$S_{fi}^{Br} = S_{fi}^{st} + S_{fi}^{pol}, \quad (4.1.18)$$

где S_{fi}^{pol} и S_{fi}^{st} даются соответственно формулами (4.1.10) и (4.1.15).

Исходя из полученного выражения для амплитуды, запишем выражение для спектрального сечения тормозного излучения:

$$\frac{d\sigma^{Br}(\omega)}{d\omega} = \frac{\varepsilon_i}{|\mathbf{p}_i|} \sum_{f,\sigma} \frac{d\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{|S_{fi}^{Br}(\sigma; \mathbf{p}_{f,i}; \mathbf{k})|^2}{T}. \quad (4.1.19)$$

Здесь $d\Omega_{\mathbf{k}}$ – телесный угол вокруг направления волнового вектора фотона \mathbf{k} , T – нормировочный параметр, имеющий смысл времени. Суммирование производится по поляризациям испущенного фотона (σ) и конечным состояниям атома (f). Далее считаем налетающую частицу борновской, а ее начальное состояние – невырожденным.

С учетом явного вида S_{fi}^{Br} формулу (4.1.19) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma^{Br}(\omega)}{d\omega} = & \frac{\varepsilon_i}{|\mathbf{p}_i|} \sum_{f,\sigma} \omega^2 \frac{d\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} 2\pi \delta(\Delta E) \frac{2\pi}{\omega} \times \\ & \times \left| e_{\mathbf{k}\sigma,l}^* \left\{ e_0^2 T^l \frac{4\pi}{q^2} (Ze\delta_{fi} - en_{fi}(\mathbf{q})) + (q_1^0)^2 c_{fi}^{ls} A_{fi,s}^0 \right\} \right|^2, \end{aligned} \quad (4.1.20)$$

включающем три члена:

$$\frac{d\sigma^{Br}(\omega)}{d\omega} = \frac{d\sigma^{st}}{d\omega} + \frac{d\sigma^{pol}}{d\omega} + \frac{d\sigma^{int}}{d\omega}. \quad (4.1.21)$$

Последний член в (4.1.21) описывает интерференцию статического и поляризационного слагаемых тормозного излучения, T^l и c_{fi}^{ls} даются формулами (4.1.16) и (4.1.12). В приближении $|\mathbf{q}_1| \ll |\mathbf{p}_{f,i}|$ для функции \mathbf{T} (см. определение (4.1.16)) получаем:

$$\mathbf{T} = \frac{\mathbf{q}_1}{m_0 \gamma (\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}_0)}, \quad \gamma = \varepsilon_i/m_0. \quad (4.1.22)$$

Выражение (4.1.20) для сечения тормозного излучения на атоме является наиболее общим. В пренебрежении внутренними степенями свободы налетающей частицы и атомного ядра оно последовательно описывает вклад атомных электронов в процесс тормозного излучения. Для сечения статического тормозного излучения из (4.1.20) после несложных преобразований находим:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma^{st}}{d\omega} &= \frac{\omega}{v_0} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}} d\mathbf{q}}{(2\pi)^4} \int dt e^{it(\omega+q_1^0)} \times \\ &\times \sum_{\sigma} |\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma}^* \mathbf{T}|^2 \frac{e_0^4 e^2}{q^2} \langle i | (Z - n(-\mathbf{q})) (Z - n(\mathbf{q}, t)) | i \rangle. \end{aligned} \quad (4.1.23)$$

Если можно пренебречь энергией возбуждения атомных электронов по сравнению с частотой излучаемого фотона ω , тогда в формуле (4.1.23) можно положить $n(\mathbf{q}, t) \approx n(\mathbf{q}, 0)$:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma^{st}}{d\omega} &= \frac{\omega}{v_0} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}} d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \delta(q_1^0 + \omega) [\mathbf{n} \mathbf{T}]^2 \frac{e_0^4 e^2}{q^2} \langle i | |Z - \hat{n}(\mathbf{q})|^2 | i \rangle, \\ \mathbf{n} &= \mathbf{k}/k. \end{aligned} \quad (4.1.24)$$

При выводе (4.1.24) было использовано равенство: $\sum_{\sigma} e_{\mathbf{k}\sigma,l}^* e_{\mathbf{k}\sigma,s} = \delta_{ls} - n_l n_s$.

В случае тяжелой налетающей частицы ($m_0 \gg m$) первым слагаемым под знаком модуля в формуле (4.1.20) можно пренебречь по сравнению со вторым, так как $|\mathbf{T}| \propto 1/m_0$, в то время, как $\mathbf{A}^{(0)}(\mathbf{q})$ и $\hat{c}^{ls}(k, \mathbf{q}_1)$ от массы налетающей частицы не зависят. Тогда полное

сечение тормозного излучения на атоме сводится к сечению поляризационного тормозного излучения, для которого из (4.1.20) находим:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma^{pol}}{d\omega} = \frac{\omega}{v_0} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}} d\mathbf{q}}{(2\pi)^5} (\delta_{ls} - n_l n_s) (q_1^0)^4 A_{fi,s'}^{(0)}(q_1) A_{fi,l'}^{(0)}(q_1) \times \\ \times \int dt e^{iq_0 t} \langle i | \hat{c}^{sl'*}(0) \hat{c}^{ls'}(t) | i \rangle, \end{aligned} \quad (4.1.25)$$

где положено

$$\hat{c}^{ls}(t) = \exp(i H_a t) \hat{c}^{ls}(0) \exp(-i H_a t). \quad (4.1.26)$$

Рассмотрим поляризационное тормозное излучение без возбуждения атома (упругое поляризационное тормозное излучение). Его сечение дается слагаемым с $f = i$ во втором члене под знаком модуля в формуле (4.1.20):

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{ii}^{pol}}{d\omega} = \frac{\omega}{v_0} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}} d\mathbf{q}}{(2\pi)^4} (\delta_{ls} - n_l n_s) (q_1^0)^4 A_h^{(0)}(q_1) A_r^{(0)}(q_1) \delta(q_1^0 + \omega) \times \\ \times \langle i | \hat{c}^{lh} | i \rangle \langle i | \hat{c}^{sr*} | i \rangle. \end{aligned} \quad (4.1.27)$$

В частотном диапазоне $\omega \ll p_a v_0$ ($p_a \approx Z^{1/3} m e^2$ — характерный атомный импульс) основной вклад в процесс будут давать модули $|\mathbf{q}_1| \ll p_a$, разрешенные законом сохранения энергии. В противном случае (при $|\mathbf{q}_1| \gg p_a$) должно превалировать поляризационное тормозное излучение с возбуждением и ионизацией атома. Поэтому в данном случае для тензора рассеяния можно использовать дипольное приближение:

$$c_{ii}^{lh}(k, \mathbf{q}_1) \rightarrow \delta^{lh} \alpha_i(\omega) \theta(p_a - |\mathbf{q}_1|), \quad (4.1.28)$$

и вместо (4.1.27) получим

$$\frac{d\sigma_{ii}^{pol}}{d\omega} \approx \frac{\omega}{v_0} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}} d\mathbf{q}}{(2\pi)^4} \left[\mathbf{n} \mathbf{A}^{(0)}(q_1) \right]^2 \delta(q_1^0) \theta(p_a - |\mathbf{q}_1|) |\omega^2 \alpha_i(\omega)|^2,$$

$$\omega < p_a v_0. \quad (4.1.29)$$

Использованный подход соответствует приближению Борна—Бете в теории возбуждения атома электронным ударом. Из формулы (4. 1.29) находим частотно-угловое распределение упругого поляризационное тормозного излучения в рассматриваемом частотном диапазоне:

$$\frac{d\sigma_{ii}^{pol}(\omega, \vartheta)}{d\omega} = \frac{2e_0^2}{v_0^2} \frac{d\omega}{\omega} |\omega^2 \alpha_i(\omega)|^2 \times \\ \times (1 + \cos^2 \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta \ln \left(\frac{\gamma p_a v_0}{\omega} \right). \quad (4. 1.30)$$

При получении (4. 1.30) мы пренебрегли слагаемыми порядка единицы по сравнению с большим логарифмом. Из выражения (4. 1.30) вытекают два следствия: (а) в отличие от статического тормозного излучения поляризационное тормозное излучение ультрарелятивистской налетающей частицы ($\gamma \gg 1$) в частотном интервале $\omega < p_a v_0$ не является узконаправленным, а его распределение по углам носит дипольный характер, (б) сечение поляризационного тормозного излучения логарифмически возрастает с ростом энергии налетающей частицы в ультрарелятивистском пределе при $\omega < p_a v_0$. Эти характерные черты поляризационного тормозного излучения релятивистской налетающей частицы допускают наглядную физическую интерпретацию. Логарифмический рост сечения поляризационного тормозного излучения с ростом энергии налетающей частицы связан с особенностями пространственной структуры собственного электромагнитного поля релятивистской заряженной частицы. Пространственное распределение потенциала этого поля на частоте ω дается формулой

$$A^{(0)}(\omega) \propto \exp \left(i \frac{\omega}{v_0} (z - v_0 t) - i \frac{\omega \rho}{\gamma v_0} \right), \quad (4. 1.31)$$

где z , ρ — цилиндрические координаты поля налетающей частицы. Из (4. 1.31) следует, что поперечный размер поля порядка $\rho_{max} \approx \gamma v_0 / \omega$, и, соответственно, для минимального поперечного переданного импульса имеем $|\mathbf{q}_\perp|_{min} \approx \omega / \gamma v_0$. Отсюда и из формулы для спектрального сечения поляризационного тормозного излучения (в борновском приближении): $d\sigma^{pol}(\omega) \propto \ln(|\mathbf{q}_\perp|_{max} / |\mathbf{q}_\perp|_{min})$ вытекает второе отмеченное выше свойство поляризационного тормозного излучения. В случае статического тормозного излучения на нейтральном атоме максимальный размер поля, рассеивающегося на налетающей частице в тормозной фотон, определяется размерами атома.

Из формулы (4.1.30) следует, что сечение поляризационного тормозного излучения без возбуждения мишени в приближении Борна—Бете определяется динамической поляризуемостью атома $\alpha(\omega)$. Вычисление величины $\alpha(\omega)$ в случае многоэлектронного атома представляет собой сложную квантово-механическую задачу. В то же время, как раз для многоэлектронного атома существует альтернативный подход к решению данной проблемы, основанный на статистической модели атомного остова. В рамках этого подхода для вычисления динамической поляризуемости можно использовать приближение локальной плазменной частоты, согласно которому отклик электронной оболочки мишени на внешнее электромагнитное воздействие определяется из условия плазменного резонанса (2.8.1). Тогда для динамической поляризуемости атома справедливо выражение (2.8.10), универсальным образом описывающее данную величину для всех зарядов ядра.

Интегрируя правую часть равенства (4.1.30) по углу испускания фотона, для спектрального сечения поляризационного тормозного излучения релятивистского электрона на атоме находим:

$$\frac{d\sigma^{pol}}{d\omega} = \frac{16\omega^3 |\alpha(\omega)|^2}{3v_0^2} \ln \left(\frac{2\gamma p_a v_0}{\omega(1+v_0)} \right), \quad \omega < p_a v_0, \quad (4.1.32)$$

где $\gamma = (1 - v_0^2)^{-1/2}$ – релятивистский фактор. Подставляя в (4.1.32) формулу для поляризуемости статистического атома (5.46), получаем:

$$d\sigma^{pol}(\nu) = \frac{16Z^2 b^6}{3v_0^2} |\nu^2 \beta(\nu)|^2 \frac{d\nu}{\nu} \times \\ \times \ln \left(\frac{2\gamma p_a v_0}{(1+v_0)Z^{2/3}} \right) = Z^2 d\tilde{\sigma}^{PB}(\nu). \quad (4.1.33)$$

Здесь введена функция $d\tilde{\sigma}^{PB}(\nu)$, которую естественно назвать приведенным сечением процесса. Для нее имеет место приближенный скейлинг по параметру $\nu = \omega/Z$, тогда как остающаяся зависимость от заряда ядра только логарифмическая.

Спектральное сечение обычного (статического) тормозного излучения с учетом экранировки поля ядра в борновском приближении может быть получено из (4.1.24):

$$d\sigma^{st}(\omega) = \frac{16Z^2}{3v_0^2} \frac{d\omega}{\omega} \ln \left\{ \frac{v_0}{p_a} \right\}, \quad \omega < p_a v_0. \quad (4.1.34)$$

Отношение сечений поляризационного и статического тормозного излучения (R - фактор) в частотном диапазоне $\omega < p_a v_0$ для релятивистских частиц равно:

$$R(\nu, Z, \gamma) \equiv \frac{d\sigma^{pol}}{d\sigma^{st}} = b^6 |\nu^2 \beta(\nu)|^2 \left(\ln \left\{ \frac{137 \gamma}{\nu Z^{2/3}} \right\} \right) / \left(\ln \left\{ \frac{137}{Z^{1/3}} \right\} \right),$$

$$\nu < \frac{137}{Z^{2/3}}. \quad (4.1.35)$$

Таким образом, как это видно из (4.1.35), зависимость спектрального R -фактора, выраженного через приведенную частоту, от заряда ядра Z весьма слабая. Существенно более сильно функция $R(\nu)$ зависит от релятивистского фактора γ . Последнее обстоятельство имеет простое физическое обоснование: с ростом энергии релятивистской налетающей частицы возрастает поперечный размер ее собственного электромагнитного поля, способного в соответствии с кинематическими ограничениями конвертироваться в реальный фотон заданной частоты.

Результаты расчета R - фактора в зависимости от безразмерной частоты ν для различных значений γ в диапазоне $\nu < 137/Z^{2/3}$ представлены на рис. 4.1. Изображенные на этом рисунке кривые обладают максимумом, приходящимся на значение приведенной частоты, примерно равное единице. Значение R -фактора в максимуме логарифмически возрастает с ростом параметра γ и становится равным единице для $\gamma \approx 7$, т. е. в этом случае вклады поляризационного и статического канала в излучение совпадают. При этом необходимо отметить, что в силу различной угловой направленности статического и поляризационного тормозного излучения интерференционным слагаемым в полном сечении (4.1.21) можно пренебречь.

Анализ общего выражения для сечения поляризационного тормозного излучения (4.1.29) показывает, что в высокочастотном диапазоне $\omega > p_a v_0$ сужается диаграмма направленности излучения по поляризационному каналу, так что эффективные углы излучения удовлетворяют неравенству $\vartheta \leq \sqrt{p_a/\omega}$. В частотном интервале $p_a < \omega < \gamma^2 p_a$ существует область углов тормозного излучения: $\gamma^{-1} < \vartheta \leq \sqrt{p_a/\omega}$, в которой поляризационный механизм превалирует над обычным (статическим) механизмом излучения. Сужение диаграммы направленно-

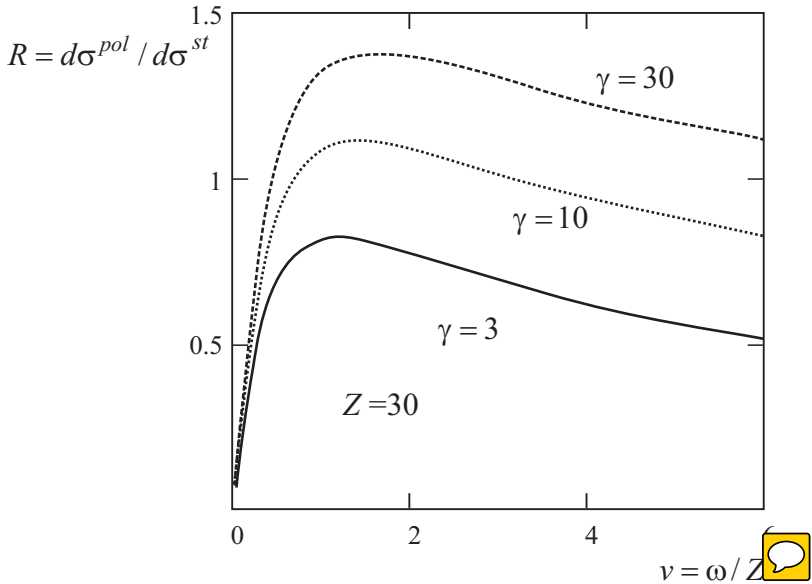


Рис. 4.1. Зависимость R -фактора от приведенной частоты ν , рассчитанная для тормозного излучения быстрого электрона на томас-фермиевском атоме с зарядом ядра $Z = 30$ для различных значений релятивистского фактора $\gamma = 3, 10, 30$

сти поляризационного тормозного излучения представлено на рис. 4.2.

Как видно из (4.1.33) динамические свойства статистического атома в приближении Борна—Бете определяются функцией

$$g(\nu) = |\beta(\nu)/\beta^{hf}(\nu)|,$$

хорошее приближение к которой (с точностью не менее $\pm 5\%$) дает следующая аппроксимационная формула

$$g_{fit}(\nu) = (1 - e^{-2.2\nu})^{0.7}. \quad (4.1.36)$$

На рис. 4.3 представлена функция $g(\nu)$, вычисленная для статистического атома по формуле (4.1.34) и в приближении случайных фаз с обменом для атома криптона. Видно, что рассматриваемый подход сглаженным образом описывает частотное поведение поляризуемости,

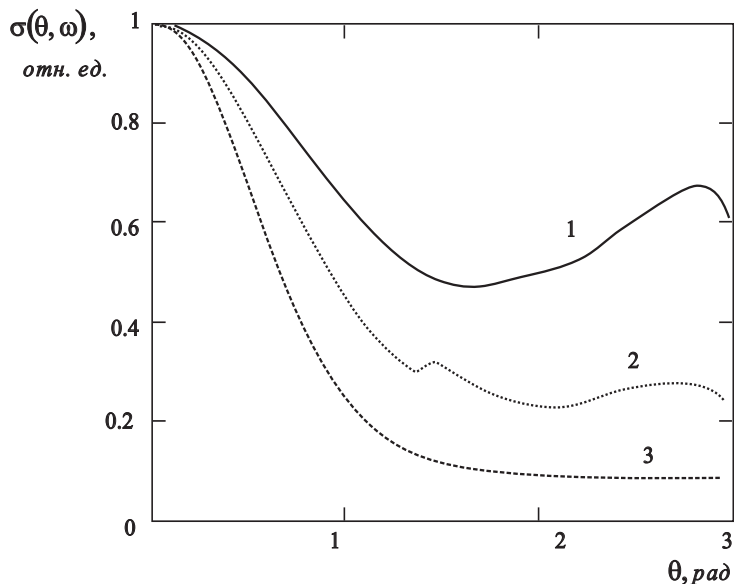


Рис. 4.2. Угловая зависимость поляризационного тормозного излучения на атоме ($Z=30$) для различных энергий тормозного фотона: $\omega = 5$ кэВ (кривая 1), $\omega = 15$ кэВ (кривая 2), $\omega = 50$ кэВ (кривая 3), скорость налетающей $v=0.9$ с

подобно тому, как радиальная плотность Томаса—Ферми сглаживает квантовомеханические колебания распределения электронного заряда. Из рисунка также следует, что точность используемого приближения возрастает с ростом частоты и минимальна на частотах, соответствующих потенциалу ионизации электронных оболочек атома. На этих частотах квантово-механические особенности динамики связанных электронов проявляются наиболее сильно, и, естественно, классическое приближение локальной плазменной частоты дает здесь наихудший результат.

Вне рамок приближения Борна—Бете (но по-прежнему в борновском приближении) сечение поляризационного тормозного излучения может быть выражено через обобщенную динамическую поляризуемость $\alpha(\omega, q)$, которая представляет собой фурье-образ пространственной плотности поляризуемости атома. В модели локальной плазменной частоты для сферически симметричной мишени справедливо

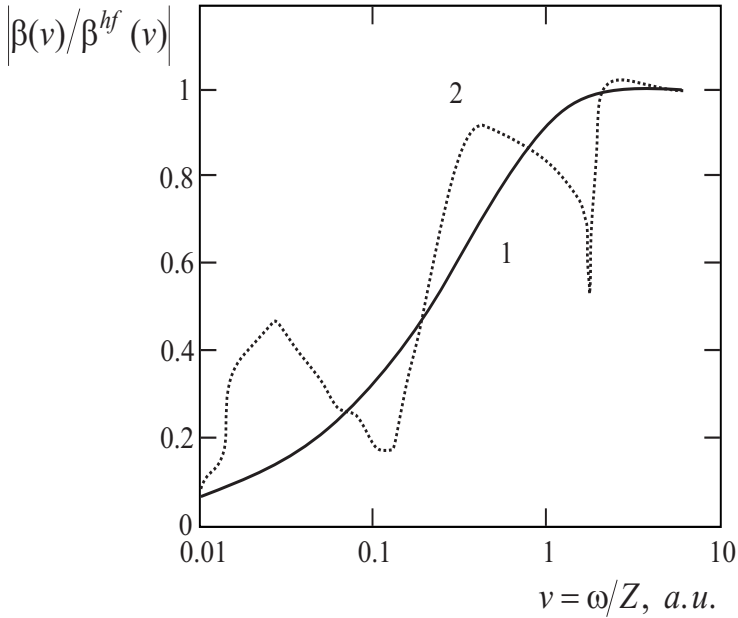


Рис. 4.3. Нормированный на свой высокочастотный предел модуль безразмерной поляризуемости атома как функция приведенной частоты: 1 – статистическая модель, 2 – приближение случайных фаз с обменом

равенство

$$\alpha(\omega, q) = \frac{1}{q} \int_0^\infty \frac{\omega_p^2(r) \sin(qr) r dr}{\omega_p^2(r) - \omega^2 - i0}. \quad (4.1.37)$$

Также, как и в дипольном случае, можно ввести безразмерную обобщенную поляризуемость мишени, исключив зависимость от заряда атомного ядра с помощью нормировки на куб радиуса Томаса—Ферми:

$$\begin{aligned} \beta(\nu, h) &= \frac{\alpha(\omega = Z\nu, q = h/r_{TF})}{r_{TF}^3} = \\ &= \frac{1}{h} \int_0^\infty \frac{4\pi f(x) \sin(hx) x dx}{4\pi f(x) - \nu^2 - i0}. \end{aligned} \quad (4.1.38)$$

Здесь введен приведенный переданный импульс $h = qr_{TF}$.

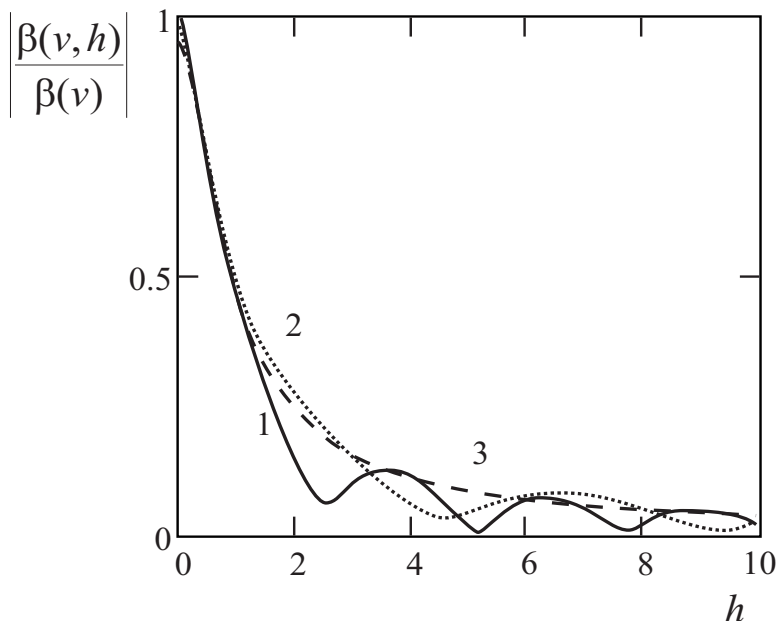


Рис. 4.4. Модуль обобщенной поляризуемости атома Ленца—Иенсена, нормированный на свой дипольный аналог, как функция безразмерного переданного импульса для двух значений приведенной частоты: 1 – $\nu = 0.5$, 2 – $\nu = 1$ и 3 – статический форм-фактор атома Ленца—Иенсена

На рис. 4.4 представлен модуль обобщенной поляризуемости статического атома Ленца—Иенсена, нормированный на свой дипольный аналог, как функция приведенного импульса для различных значений приведенной частоты. На этом же рисунке показан приведенный статический форм-фактор атома Ленца—Иенсена, представляющий собой фурье-образ нормированной на квадрат заряда ядра пространственной плотности электронного остова:

$$F_{LJ}(h) = \frac{4\pi b^3}{h} \int_0^\infty x f_{LJ}(x) \sin(hx) dx. \quad (4.1.39)$$

Из рис. 4.4 видно, что обобщенная поляризуемость атома Ленца—Иенсена представляет собой осциллирующую функцию переданного импульса h , уменьшающуюся до нуля с характерным масштабом $h \approx$

1. Период осцилляций растет с ростом частоты электромагнитного поля, а сглаженный ход соответствующих кривых близок к монотонной функции $F_{LJ}(h)$.

R -фактор атома Ленца—Иенсена вне рамок приближения Борна—Бете, т. е. с использованием формул (4.1.36), (4.1.37), для спектральных сечений статического и поляризационного каналов тормозного излучения как функция приведенной частоты представлен на рис. 5.5 для заряда ядра $Z = 30$ и скорости рассеивающегося электрона $v = 85.5$ а.е. На этом же рисунке показана соответствующая зависимость, полученная в приближении Борна—Бете. Видно, что в низкочастотном диапазоне $\nu \leq 1$ обе зависимости практически совпадают. Наибольшее различие имеет место в частотном интервале $8 < \nu < 10$. Для частот $\nu > 10$ сечение поляризационного тормозного излучения в приближении Борна—Бете равно нулю. В целом из рис. 4.5 следует, что приближение Борна—Бете является разумным методом расчета сечения поляризационного тормозного излучения во всем спектральном диапазоне, в котором вклад поляризационного канала в тормозное излучение существенен.

В приближении Борна—Бете легко получить простое аналитическое выражение для тормозных потерь быстрого электрона на статистическом атоме по поляризационному каналу в заданном спектральном интервале $0 < \nu < \nu_h$, для чего вместо выражения (4.1.34) возьмем более простое приближение

$$g_a(\nu) = \sqrt{(\nu - 1) \theta(1 - \nu) + 1}. \quad (4.1.40)$$

Подставляя (4.1.38) в формулу для спектрального сечения и интегрируя по частоте выражение для спектральных потерь в заданных пределах, получаем простое аналитическое выражение

$$W_{pol}^{B-B}(\nu_h) \cong \frac{16 Z^3}{3 c^3 v_0^2} [\nu_h (1 + \ln(\nu_{\max}/\nu_h)) - \ln \sqrt{\nu_{\max}} - 3/4], \quad (4.1.41)$$

$$1 < \nu_h < \nu_{\max}$$

где $\nu_{\max} = \gamma v_0 / (b Z^{2/3})$.

Подводя итог рассмотрению тормозного излучения быстрых электронов, можно сделать вывод, что статистический подход к рассмотрению тормозного излучения на атоме обеспечивает разумную для задач

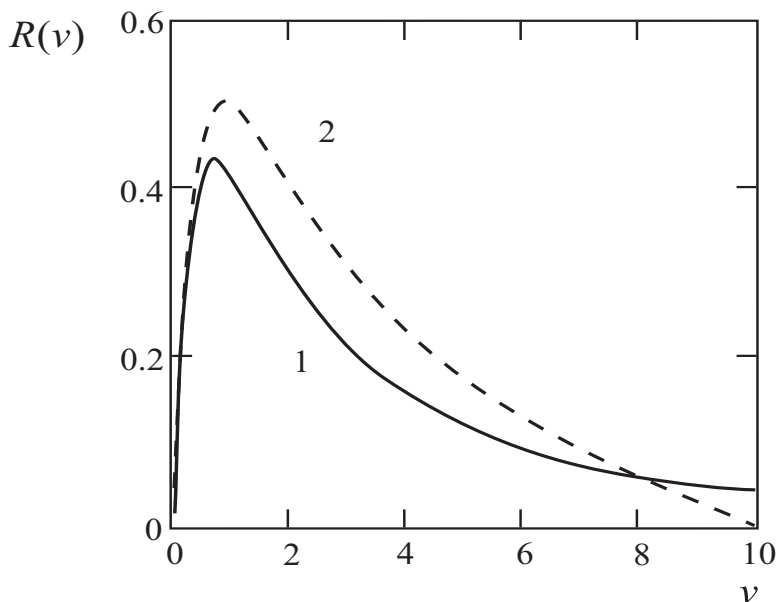


Рис. 4.5. Сравнение результатов расчета спектрального R -фактора, полученного с помощью обобщенной поляризуемости и электрического потенциала атома Ленца—Иенсена (кривая 1) и в приближении Борна—Бете (кривая 2) для скорости рассеивающегося электрона $\nu = 85.5$ а.е. и заряда ядра $Z = 30$

физики плазмы точность описания, совместимую с вычислительной простотой и физической наглядностью. Кроме того, полученные выражения для сечения процесса являются универсальными, (т. е. едиными для всех зарядов ядра), что исключает необходимость производить расчет для каждого атома заново.

Статическое излучение квазиклассических электронов на атомном потенциале рассматривалось выше в рамках вращательного приближения крамерсовской электродинамики. Здесь мы обобщим этот подход с учетом поляризационного тормозного излучения и поляризационной рекомбинации, которые представляют собой дополнительные излучательные каналы, сопутствующие статическому излучению при рассеянии заряженных частиц на мишенях с электронным остовом [6, 7]. Поляризационный канал излучения обусловлен динамической поля-

ризацией остова мишени, наводимой электрическим полем налетающей частицы и приводящей к излучению электромагнитных волн. Рассматриваются относительно невысокие скорости электронов, характерные для плазменных приложений, так что выполняется условие квазиклассического приближения (2.2.8) для движения налетающей частицы. Поскольку те же квазиклассические волновые функции налетающего электрона фигурируют и при расчете поляризационного тормозного излучения, естественно использовать вращательное приближение также и для описания поляризационного канала.

Простейший вариант вращательного приближения в теории поляризационного тормозного излучения состоит в замене в формуле (2.7.13) «статической» силы на «поляризационную». Поляризационная сила, зависящая от частоты, дается выражением

$$f_{pol}(r, \omega) = \frac{N_{pol}(r, \omega)}{r^2}, \quad (4.1.42)$$

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

$$N_{pol}(r, \omega) = \omega^2 \left| \int_0^r \beta(r', \omega) 4\pi r'^2 dr' \right|. \quad (4.1.43)$$

Здесь $\beta(r, \omega)$ – пространственная плотность динамической поляризуемости мишени, для которой мы в дальнейшем будем использовать приближение Брандта–Лундквиста, физически адекватное статистической плазменной модели атома:

$$\beta(r, \omega) = \frac{n(r)}{4\pi n(r) - \omega^2 - i0}, \quad (4.1.44)$$

где $n(r)$ – локальная электронная плотность атомного остова. Равенство (4.1.42) следует из выражения (2.8.8) для динамической поляризуемости. Наличие текущего радиуса (расстояния до ядра) в верхнем пределе интегрирования формулы (4.1.41) описывает проникновение налетающего электрона в остов мишени и связанные с этим эффекты.

Подставляя «поляризационную» силу (4.1.40) в (2.7.13) вместо обычной «статической» силы, получаем для спектральных потерь энергии

на излучение по поляризационному каналу в рамках вращательного приближения следующее выражение:

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega} \right)_{pol}^{rot} = \frac{8 \pi A}{3 c^3 \sqrt{2 E}} \int_0^{\infty} (N_{pol}(r, \omega))^2 \sqrt{1 + \frac{|U(r)|}{E}} \delta(\omega - \omega_{rot}(r)) r^{-2} dr. \quad (4.1.45)$$

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

$$R^{(rot)}(\omega, T) = \left\{ \frac{d\kappa_{pol}(\omega, E)}{d\kappa_{st}(\omega, E)} \right\}^{(rot)} = \left[\frac{N_{pol}(r, \omega)}{Z_{ef}(r)} \right]_{r=r_{ef}(\omega, E)}^2. \quad (4.1.46)$$

Второе равенство в (4.1.44) следует из выражений (2.7.13), (4.1.43), 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 (4.1.41) к эффективному заряду мишени в целом $Z_{ef}(r)$. Эффективный заряд мишени определяется равенством (4.1.41). Указанные заряды при вычислении R -фактора берутся на характерном для вращательного приближения радиусе излучения, который является решением уравнения (2.7.15).

Как видно из выражений (4.1.43), (4.1.44), ключевой величиной, определяющей в рассматриваемом приближении излучение по поляризационному каналу, является частотно зависимый эффективный поляризационный заряд $N_{pol}(r, \omega)$, на свойствах которого мы остановимся ниже. Сначала отметим общие соотношения для поляризационного заряда в приближении локальной электронной плотности, вытекающие из формул (4.1.41), (4.1.42). Легко видеть, что N_{pol} удовлетворяет правильной высокочастотной асимптотике, (следующей также и из квантово-механического выражения для поляризуемости):

$$N_{pol}^{\infty}(r) = N_{pol}(r, \omega \rightarrow \infty) = N_e(r) = \int_0^r 4 \pi n(r) r^2 dr, \quad (4.1.47)$$

где $N_e(r)$ – число атомных электронов в сфере радиуса r . Естественно, что для $r > R_0$ (R_0 – размер атома) величина $N_e(r)$ равна полному числу электронов в остова мишени N . В противоположном, низкочастотном пределе из (4.1.41), (4.1.42) имеем

$$N_{pol}^{(0)}(r, \omega) = \omega^2 \left[\theta(r - R_0) \frac{R_0^3}{3} + \theta(R_0 - r) \frac{r^3}{3} \right]. \quad (4.1.48)$$

Подставляя в определение поляризационного заряда (4.1.41), (4.1.42) выражение для электронной плотности остова вида

$$n(r) = Z^2 f(x = r/r_{TF}),$$

получаем в модели Томаса—Ферми следующее выражение для поляризационного заряда:

$$N_{pol}(r, \omega, Z) = Z g\left(\frac{r}{r_{TF}}, \frac{\omega}{Z}\right), \quad (4.1.49)$$

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

$$g(x, \nu) = \nu^2 \left| \int_0^x \frac{\chi^{3/2}(x') \sqrt{x'} dx'}{b^{-3} (\chi(x')/x')^{3/2} - \nu^2 - i0} \right|. \quad (4.1.50)$$

Эта величина представляет собой нормированный на полное число атомных электронов поляризационный заряд как функцию безразмерного расстояния $x = r/r_{TF}$ и приведенной частоты $\nu = \omega/Z$. Формулы (4.1.47), (4.1.48) 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 (4.1.41) и равенства:

$$N_{pol}^{(rot)}(\omega, E) = N_{pol}(r_{ef}(\omega, E), \omega), \quad (4.1.51)$$

где $r_{ef}(\omega, E)$ представляет собой решение уравнения (2.7.15). Отсюда для нормированного поляризационного заряда во вращательном

приближении имеем

$$g^{(rot)}(\nu, t) = g(x_{ef}(\nu, t), \nu), \quad (4.1.52)$$

где $t = bE/Z^{4/3}$ – приведенная энергия; $x_{ef}(\nu, t)$ – решение уравнения (2.7.15), переписанного через параметры ν и t .

С помощью формул (4.1.43), (4.1.47) можно получить в рамках вращательного приближения следующее выражение для спектрального эффективного излучения электрона на атоме Томаса—Ферми по поляризационному каналу:

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{pol}^{rot} = \frac{8\sqrt{3}\pi Z^{2/3} b^{5/2} \nu}{3c^3 \sqrt{2t}} \left\{ \frac{g(x, \nu)^2 \sqrt{1 + \chi/(xt)}}{b^3 x \nu^2 + |(\chi/x)'|} \right\}_{x=x_{ef}(\nu, t)}. \quad (4.1.53)$$

Здесь функция $g(x, \nu)$ определена равенством (4.1.48).

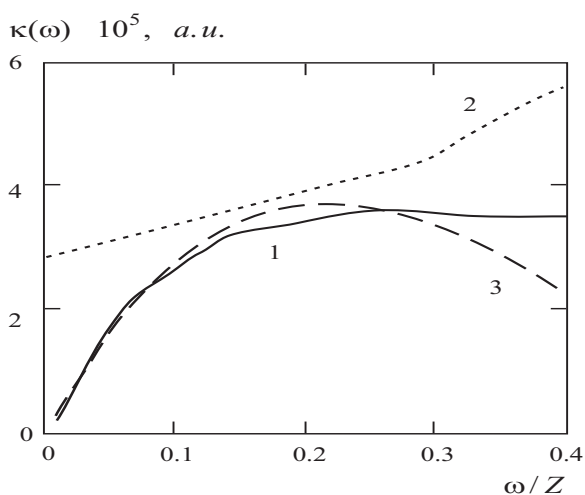
Формула (4.1.51) вместе с (2.7.16) универсальным образом (единым для всех зарядов ядра) описывает спектральные потери энергии электронов при рассеянии на томас-фермиевском атоме в высокочастотном диапазоне $\omega \geq \tilde{\omega}$ с учетом двух возможных каналов излучения. Обобщение этой величины на «невращательный» интервал частот $0 < \omega < \tilde{\omega}$ для статического канала дается формулой (2.7.22). Анализ показывает, что для поляризационного канала нет необходимости в процедуре интерполяции $(d\kappa/d\omega)$ в область малых частот, подобной (2.7.22). Чтобы удостовериться в этом приведем выражение для спектральных потерь энергии по поляризационному каналу, полученное в приближении Борна—Бете:

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

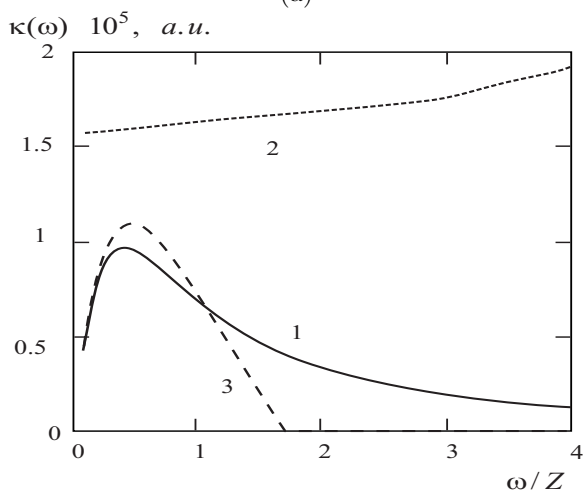
$$t > \frac{1}{8bZ^{2/3}}, \quad (4.1.54)$$

где $g_{dip}(\nu) = g(x \rightarrow \infty, \nu)$ – нормированный поляризационный заряд (4.1.48) в дипольном приближении. Из (4.1.52) следует, что в приближении Борна—Бете, в противоположность вращательному приближению, имеется ограничение на частоту сверху: $\nu < 1.7 \sqrt{t}$.

На рис. 4.6 представлены зависимости эффективного излучения электрона на атоме Томаса—Ферми от приведенной частоты по поляризационному и статическому каналам для двух значений начальной



(а)

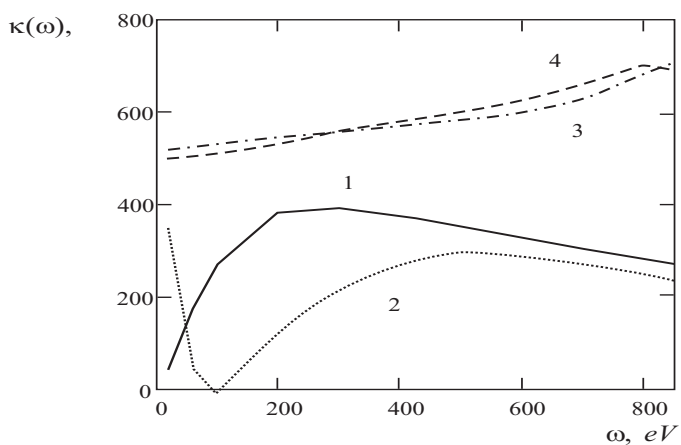


(б)

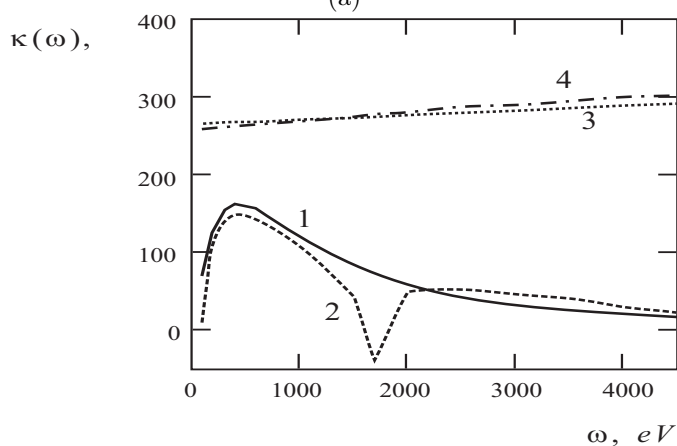
Рис. 4.6. Зависимость спектрального эффективного излучения электрона на атоме Томаса—Ферми ($Z = 90$) от приведенной частоты $\nu = \omega/Z$ для различных значений приведенной энергии налетающего электрона (а) $t = 0.1$: (б) $t = 1.1$ – по поляризационному каналу (во вращательном приближении), 2 – по статическому каналу, 3 – по поляризационному каналу (в приближении Борна—Бете)

энергии налетающей частицы, рассчитанные в рамках различных приближений. Кривые 1 и 3 описывают поляризационный канал, рассчитанный в рамках вращательного приближения и приближения Борна—Бете (4. 1.52) соответственно. При расчете зависимости 2, относящейся к статическому каналу, использовалась формула (2. 7.22). Из рис. 4.6 следует, что вращательное приближение в диапазоне $\nu < t$ дает для поляризационного излучения результат, практически совпадающий с результатом использования приближения Борна—Бете. Заметим, что неравенство $\nu < t$ может быть переписано в виде: $\omega < b E/Z^{1/3}$. Следовательно, для больших Z оно соответствует условиям применимости низкочастотного приближения в теории тормозного излучения. В этом случае рассеивающийся на нейтральном атоме электрон слабо возмущается излучательным процессом, и его движение при расчете поляризационного тормозного излучения можно считать равномерным и прямолинейным даже для медленных электронов. Этим оправдывает адекватность использования приближения Борна—Бете для поляризационного канала в низкочастотном диапазоне. Таким образом, в силу довольно хорошего сопряжения кривых 1 и 3 вращательное приближение мы будем применять для расчета поляризационного излучения во всей рассматриваемой спектральной области. Уменьшение $(d\kappa/d\omega)_{pol}^{rot}$ с ростом частоты, изображенное на рис. 4.6, является следствием эффектов проникновения налетающей частицы в остов мишени. Оно не столь резкое, как это следует из расчета в приближении Борна—Бете. Первоначальный рост $(d\kappa/d\omega)_{pol}$ с частотой, хорошо известный из теории поляризационного тормозного излучения, обусловлен фактором ν^2 , входящим в определение поляризационного заряда (4. 1.48). Таким образом, спектральная зависимость интенсивности поляризационного тормозного излучения обладает максимумом, центральная частота которого смещается в область высоких частот с ростом начальной энергии налетающей частицы.

На рис. 4.7 представлено спектральное эффективное излучение по статическому и поляризационному каналам электронов с энергией 1 кэВ и 5 кэВ, рассеивающихся на атоме криптона, рассчитанное в рамках вращательного приближения (кривые 1, 3) и последовательными квантовомеханическими методами (кривые 2, 4). Расчет зависимостей для статического канала проводился нами с помощью формулы (2. 7.22).



(а)



(б)

Рис. 4.7. 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 вращательного приближения); 2 – поляризационный канал с учетом вклада интерференции (расчет в приближения случайных фаз с обменом; 3 – вклад статического канала (расчет по формуле (2.7.22)); 4 – вклад статического канала (расчет в приближении искаженных плоских волн)

Расчет статического тормозного излучения (кривая 4) был осуществлен в рамках приближения искаженных плоских волн методом суммирования парциальных вкладов различных угловых моментов с использованием точного потенциала атома криптона. Видно, что результаты обоих подходов для статического канала очень близки. Для поляризационного канала результат использования вращательного приближения, естественно, более сильно отличается от точного квантовомеханического результата, полученного в приближении случайных фаз с обменом, которое учитывает не только индивидуальные квантовомеханические особенности движения атомных электронов, но и межчастичные корреляционные эффекты. Это различие наиболее существенно вблизи потенциалов ионизации электронных подоболочек, где реальная и мнимая части атомной поляризуемости обладают резонансными структурами. Для электронов с энергией 1 кэВ широкий провал в спектральной зависимости интенсивности поляризационного тормозного излучения связан с ионизацией 3d подоболочки атома криптона. В случае 5 кэВ-х электронов изображенный на рис. 4.7(б) провал на кривой 2 обусловлен ионизацией 2p подоболочки. Его относительная ширина заметно меньше, поэтому и соответствие результатов используемого подхода с последовательным квантово-механическим расчетом лучше. В целом рис. 4.7 демонстрирует разумную точность используемого метода для расчета поляризационного тормозного излучения на многоэлектронном атоме.

Выражение для полных радиационных потерь по обоим каналам легко получить из формул для спектральных потерь, интегрируя по частоте с учетом дельта-функции. В результате для статического канала получаем

$$\begin{aligned} \kappa_{st} \left(E = \frac{Z^{4/3}}{b} t \right) = \\ = \frac{8\sqrt{3}\pi\sqrt{b}}{3c^3} \frac{Z^{5/3}}{\sqrt{2}t} \int_{x_{ef}(\nu_{hf}, t)}^{\infty} \left[\left(\frac{\chi(x)}{x} \right)' \right]^2 \sqrt{1 + \frac{\chi(x)}{tx}} x^2 dx, \quad (4.1.55) \end{aligned}$$

где $\nu_{hf} = \left(\sqrt[3]{Z}/b \right) t$ – приведенная частота, соответствующая высокочастотной границе тормозного излучения. Существенно, что для справедливости выражения (4.1.55) не требуется выполнения критерия вращательного приближения ($\nu > \nu_{\min}^{(rot)}(t) \cong 3t$), а необходимо

лишь соблюдение условия квазиклассичности движения рассеивающегося электрона $t \leq 1$.

Аналогично для полных потерь энергии по поляризационному каналу, получаем

$$\kappa_{pol} \left(E = \frac{Z^{4/3}}{b} t \right) \approx \kappa_{pol}^{rot}(t) = \frac{8 \sqrt{3} \pi \sqrt{b}}{3 c^3} \frac{Z^{5/3}}{\sqrt{2} t} \times \\ \times \int_{x_{ef}(\nu_{hf}, t)}^{\infty} g(x, \nu_{rot}(x, t))^2 \sqrt{1 + \frac{\chi(x)}{t x}} x^{-2} dx, \quad (4.1.56)$$

где функция $g(x, \nu)$ представляет собой нормированный поляризационный заряд (4.1.48); $\nu_{rot}(x, t)$ – зависящая от приведенного расстояния и энергии приведенная вращательная частота, выражение для которой следует из (2.7.11):

$$\nu_{rot}(x, t) = \sqrt{\frac{2}{b^3} \frac{t + \chi(x)/x}{x^2}}. \quad (4.1.57)$$

Выражение (4.1.54) для полных энергетических потерь по поляризационному каналу получено во вращательном приближении, которое, как это было показано в предыдущем разделе, хорошо описывает поляризационное тормозное излучение (в противоположность статическому тормозному излучению) и в низкочастотном диапазоне.

На рис. 4.8 представлена зависимость фактора Гаунта – отношения эффективного излучения электрона на атоме Томаса–Ферми ($Z = 60$) к своему крамерсовскому аналогу – от приведенной энергии налетающей частицы для статического и поляризационного каналов процесса. Видно, что имеется весьма узкая область доминирования поляризационного излучения над статическим в низкоэнергетическом диапазоне $t < 0.05$, что в пересчете на обычные единицы для заданного заряда ядра соответствует неравенству: $T < 360$ эВ. Заметим, что для таких энергий налетающей частицы характерные излучаемые частоты лежат на границе применимости приближения Брандта–Лундквиста для расчета поляризуемости мишени. Из рис. 4.8 также следует, что полные потери по поляризационному каналу с ростом энергии электрона быстро выходят на насыщение в отличие от потерь по статическому каналу, интенсивно возрастающих вплоть до кулоновского предела.

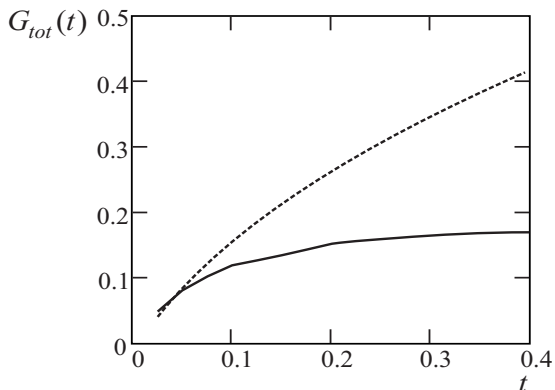


Рис. 4.8. Зависимость фактора Гаунта для полных потерь энергии при рассеянии квазиклассического электрона на атоме Томаса—Ферми ($Z = 60$) по статическому (пунктир) и поляризационному (сплошная кривая) каналам от приведенной энергии $t = bE/Z^{4/3}$ (E – начальная энергия электрона в атомных единицах)

Быстрое насыщение энергетических потерь на поляризационное излучение объясняется увеличением роли эффекта проникновения электрона в остов мишени с ростом энергии налетающей частицы и связанным с этим уменьшением поляризационного заряда. В результате рассеивающимся электроном по поляризационному каналу излучаются в основном относительно низкие частоты, так что возрастание энергии электрона не приводит к росту полных энергетических потерь на поляризационное излучение.

В заключении этого раздела укажем, что применение полученных выражений к анализу зависимости относительного вклада поляризационного канала в излучение от заряда ядра атома Z позволяет сделать вывод о росте поляризационных эффектов в тормозногоизлучения с увеличением параметра Z . Последнее обстоятельство находится в качественном соответствии с имеющимися экспериментальными данными. Согласно этим данным измеренные значения интенсивности тормозного излучения электронов киловольтных энергий на тяжелых атомах превышают результат расчета с учетом только статического канала. В то же время для легких атомов расчет, проделанный в тех

же предположениях, находится в хорошем соответствии с экспериментом.

4.2. Тормозной эффект на атомах и ионах в сильных световых полях

Возбуждение атомов и ионов при столкновении с быстрыми электронами в поле лазерного излучения интенсивно исследуется в связи с различными задачами лазерной плазмы, в том числе при изучении лазерной искры и механизмов создания инверсной населенности в газах. Важным обстоятельством является тот факт, что сами элементарные процессы в сильных полях могут заметно отличаться от процессов в равновесной среде как за счет влияния на свободный электрон поля электромагнитной волны, так и внутренней динамики мишени.

Процессы возбуждения атомов при столкновении с быстрыми электронами в сильном световом поле впервые, видимо, были рассмотрены в [8], где движение электрона описывалось в приближении заданной классической траектории во внешнем электромагнитном поле. Полное квантово-механическое рассмотрение проведено в [9]. Однако в этих работах прямое влияние поля на электроны атома фактически считалось пренебрежимо малым, что, впрочем, специально не оговаривалось. Результаты расчетов имеют вид рядов по функциям Бесселя, которые медленно сходятся при больших интенсивностях поля.

Учтем изменение свойств мишени во внешнем электромагнитном поле, исходя из нестационарной теории возмущений в базисе квазиэнергетических функций. Задачи о взаимодействии систем с внешним электромагнитным полем и между собой можно разделить. Первая задача сводится к определению квазиэнергетических состояний, в данном случае атома (иона) и налетающего электрона. Вторая задача для быстрого налетающего электрона со скоростью, намного превышающей скорость атомных электронов во внешней оболочке ($v \gg v_{at}$), может быть решена в первом порядке теории возмущений, то есть в приближении Борна [10]. Скорости электронов нерелятивистские и мы используем атомную систему единиц.

Воспользуемся нестационарной теорией возмущений в базисе квазиэнергетических функций. Пусть полный гамильтониан $H(t)$ системы атом+электрон имеет вид

$$H(t) = H(t)_e + H(t)_a + W, \quad (4.2.1)$$

где $H(t)$ – гамильтониан электрона во внешнем поле с вектором потенциалом $\mathbf{A}(t)$:

$$H(t)_e = \frac{1}{2} \left(-i\nabla + \frac{1}{c} \mathbf{A}(t) \right)^2, \quad (4.2.2)$$

c – скорость света в вакууме, $H_a(t)$ – гамильтониан атома во внешнем поле. W – оператор взаимодействия налетающего электрона с атомом:

$$W = \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} - \frac{Z}{r}, \quad (4.2.3)$$

\mathbf{r} – координата налетающего электрона, \mathbf{r}_j – координата j -го электрона атома, содержащего N электронов, Z – заряд атомного ядра.

Примем во внимание полноту базиса квазиэнергетических функций и будем искать решение задачи о рассеянии в виде разложения полной волновой функции ψ системы атом + электрон по волновым функциям свободного электрона с импульсом \mathbf{p} в поле волны

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = (2\pi)^{-3/2} \exp \left[i \left\{ \mathbf{p}\mathbf{r} - \frac{1}{2} \int_0^t \mathbf{P}(\tau)^2 d\tau \right\} \right], \quad (4.2.4)$$

$$\mathbf{P}(t) = \mathbf{p} + \frac{1}{c} \mathbf{A}(t),$$

и квазиэнергетическим состояниям атома-мишени $u_k(\mathbf{R}, t)$ в виде

$$\psi = \sum a_{k\mathbf{p}}(t) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) u_k(\mathbf{R}, t) \exp(-i\varepsilon_k t). \quad (4.2.5)$$

Подставляя (4.2.5) в уравнение Шредингера с гамильтонианом (4.2.1) для всей системы, получим уравнение для амплитуд

$$i\partial a_{k\mathbf{p}}/\partial t = \sum_{k_1 \mathbf{p}_1} \langle \psi_{\mathbf{p}} u_k | W | \psi_{\mathbf{p}_1} u_{k_1} \rangle \exp(i(\varepsilon_k - \varepsilon_{k_1})t) a_{k_1 \mathbf{p}_1}. \quad (4.2.6)$$

Амплитуда перехода из начального квазиэнергетического состояния системы u_i и состояния электрона в поле волны с квазиимпульсом \mathbf{p}_0 в конечное состояние мишени u_f и электрона $\psi_{\mathbf{p}}$ за время t в первом порядке теории возмущений по взаимодействию W равна

$$a_{f\mathbf{p}}^{(1)} = -i \int \langle \varphi_{\mathbf{p}} u_f | W | \varphi_{\mathbf{p}_0} u_i \rangle \times \\ \times \exp \left[i(\varepsilon_f - \varepsilon_i) t_1 + i \int_0^{t_1} (\varepsilon_{\mathbf{p}}(\tau) - \varepsilon_{\mathbf{p}_0}(\tau)) d\tau \right] dt_1, \quad (4.2.7)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{p}}(t) = P^2(t)/2$ — энергия электрона в поле волны в момент времени t , $\varphi = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r})$. Отметим, что при выборе взаимодействия электрона с полем в другой калибровке в виде $\mathbf{r}\mathbf{F}(t)$ функция $\varphi = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{P}(t)\mathbf{r})$. При этом в выражение для амплитуды перехода (5.2.7) входят произведения комплексно-сопряженных функций $\varphi_{\mathbf{p}}$ и $\varphi_{\mathbf{p}_0}$. В силу этого дополнительные одинаковые фазовые множители взаимно компенсируются и результаты не будут зависеть от выбора калибровки. Для гармонического поля с линейной поляризацией

$$\mathbf{A}(t) = -(c\mathbf{F}_0/\omega) \cos(\omega t) \quad (4.2.8)$$

и интегральный множитель

$$\int_0^t (\varepsilon_{\mathbf{p}}(\tau) - \varepsilon_{\mathbf{p}_0}(\tau)) d\tau = \frac{1}{2}(p^2 - p_0^2)t + \mathbf{a}\mathbf{q} \sin(\omega t), \quad (4.2.9)$$

где $\mathbf{a} = \mathbf{F}_0/\omega^2$ — амплитуда колебаний электрона в световом поле, $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_0$ — переданный импульс.

В соответствии с теоремой Флоке произвольное квазиэнергетическое состояние u_k представим в виде разложения по гармоникам

$$u_k = \sum_n u_k^n \exp(in\omega t). \quad (4.2.10)$$

Подставляя (4.2.10) и (4.2.9) в (4.2.7) и пользуясь видом производящей функции для функций Бесселя

$$\exp[i\lambda \sin(\omega t)] = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} J_{\nu}(\lambda) \exp(i\nu\omega t), \quad (4.2.11)$$

получим квадрат амплитуды вероятности рассеяния электрона с возбуждением атома из состояния i в состояние f в виде

$$|a_{f\mathbf{p}}|^2 = 4t \sum_M \left| \sum_{\nu+n=m=M} \langle u_f^n | \sum_{j=1} \exp(-i\mathbf{q}_M \mathbf{r}_j) - Z|u_f^m \rangle J_\nu(\mathbf{q}_M \mathbf{a}) / q_M^2 \right|^2 \times \\ \times \delta [(\varepsilon_f - \varepsilon_i) + (p^2 - p_0^2)/2 - \omega M] . \quad (4.2.12)$$

Соответствующее дифференциальное сечение возбуждения атома есть

$$d\sigma_{fi} = 4 \sum_M \frac{p_M}{p_0} \times \\ \times \int \frac{1}{q_M^4} \left| \sum_{\nu+n-m=M} (F_{fi}^{nm}(\mathbf{q}_M) - Z\delta_{fi}) J_\nu(\mathbf{q}_M \mathbf{a}) \right|^2 d\mathbf{p}_M, \quad (4.2.13)$$

где $F_{fi}^{nm}(\mathbf{q}_m) = \langle u_f^n | \sum \exp(-i\mathbf{q}_m \mathbf{r}) | u_i^m \rangle$ — динамический форм-фактор перехода из квазиэнергетической гармоники m начального состояния i в квазиэнергетическую гармонику n конечного состояния f . Квазиэнергия и квазиимпульс в начальном и конечном состоянии удовлетворяют соотношению $(\varepsilon_f - \varepsilon_i) + (p^2 - p_0^2)/2 - \omega M = 0$ для каждого канала M во внутренней сумме выражения (4.2.13).

Физический смысл полученного результата прост. В процессе рассеяния электрона на атоме с его возбуждением может меняться как энергия электрона, так и энергия атома в конечном состоянии. При этом часть энергии может сообщаться от внешнего поля как путем передачи этой энергии рассеивающемуся электрону, так и за счет непосредственного виртуального поглощения поля атомом. В дальнейшем мы имеем в виду только нерезонансный случай, когда отстройка от многофотонного резонанса по частоте больше полной ширины уровней. Ситуация точного резонанса требует отдельного рассмотрения. В некотором смысле она проще, так как позволяет использовать формализм матрицы плотности в двухуровневом приближении. Ее решение в случае близости однофотонного резонанса приведено в работе [11].

Рассмотрим предельный случай относительно слабой интенсивности и больших квантов. Тогда виртуальное возбуждение атома может

эффективно осуществляться несколькими фотонами, в то время как движение налетающего электрона лишь в малой степени искажается полем лазерного излучения. Иными словами, мы полагаем, что размер осцилляции налетающего электрона во внешнем поле $\mathbf{a} = \mathbf{F}_0/\omega^2$ намного меньше атомных размеров и $q\mathbf{a} \ll 1$.

Тогда можно положить $J_0 = 1, J_n = 0$ ($n > 1$). Соответственно

$$d\sigma_{fi} = 4 \sum_M \frac{p_M}{p_0} \int \frac{1}{q_M^4} \left| \sum_{\nu+n-m=M} (F_{fi}^{nm}(\mathbf{q}_M) - Z\delta_{fi}) \right|^2 d\mathbf{o}_{\mathbf{p}_M}, \quad (4.2.14)$$

Основной вклад в полное сечение возбуждения атома электронным ударом вносят переходы с малым переданным импульсом, меньшим характерного атомного импульса ($q < q_{at}$). При $q\mathbf{r} \ll 1$ можно воспользоваться дипольным приближением, т. е. разложением $\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) \approx 1 - i\mathbf{q}\mathbf{r}$. Проводя интегрирование по углам вылета рассеянного с импульсом \mathbf{p} электрона, получим формулу, являющуюся обобщением известного приближения Бете-Борна:

$$\begin{aligned} \sigma_{fi} = \sigma_{fi}^B + \frac{4}{p_0^2} \cos^2(\vartheta) \sum_{M=1} \ln |kp/(\varepsilon_f - \varepsilon_i - M\omega)| \times \\ \times (E/2)^{2M} |\chi^M(M\omega; n_f, m_i)|^2, \end{aligned} \quad (4.2.15)$$

где $k = \min \left\{ |2\varepsilon_f|^{1/2}, |2\varepsilon_i|^{1/2} \right\}$,

$\chi^M =$

$$= \sum \langle f | \mathbf{de} G_{E-\omega} \mathbf{de} G_{E-2\omega} \dots \mathbf{de} G_{E-n\omega_f} \mathbf{de} G_{E+m\omega_i} \mathbf{de} \dots G_{E+\omega_1} \mathbf{de} | i \rangle,$$

σ_{fi} – борновское сечение возбуждения атома в отсутствие поля, χ^M – тензор нелинейной восприимчивости атома, свернутый с векторами поляризации лазерного излучения. Величина θ – угол между импульсом налетающего электрона \mathbf{p}_0 и вектором нелинейной поляризации атома. Наибольший вклад виртуальное возбуждение атома вносит в полное сечение возбуждения атома электронным ударом в условиях близости промежуточного резонанса. При этом вес соответствующей

квазиэнергетической гармоникой становится большим, и возбуждение идет не из основного, а из виртуально возбужденного состояния.

В качестве примера рассмотрим возбуждение $1s \rightarrow 3s$ перехода в атоме водорода. Воспользовавшись аппроксимацией сечений возбуждения водорода, вычисленных в борновском приближении, получим формулу для полного сечения возбуждения $1s \rightarrow ns$ переходов с учетом виртуального возбуждения атома полем в виде

$$\sigma_{fi} = \frac{\pi n C}{(n^2 - 1)^2} \left(\frac{u}{u + 1} \right)^{1/2} \frac{1}{u + \varphi} + \cos^2(\beta) \frac{1}{2} \ln |k p_0 / (\varepsilon_f - \varepsilon_i - \omega)| \times \\ \times \chi(\omega) F_0^2 / E^2, \quad (4.2.16)$$

где E – энергия налетающего электрона, $\chi(\omega)$ – нелинейная восприимчивость, учитывающая виртуальное возбуждение атома,

$$u = (E - \varepsilon_f - \varepsilon_i) / (\varepsilon_f - \varepsilon_i).$$

Значения коэффициентов C и φ зависят от главного квантового числа n конечного состояния и приведены в виде таблиц в [12].

На рис. 4.9 показаны результаты расчета отношения сечений, рассчитанных с учетом и без учета влияния поля, при напряженности поля $5 \cdot 10^{-7}$ В/см и $\beta = 0^\circ$. Энергия налетающего электрона равна 500 эВ. Сечение возбуждения $3s$ состояния атома водорода в отсутствие поля лазерного излучения равно $8.013 \cdot 10^{-2}$ (πa_0^2), где a_0 – борковский радиус. Из представленных на рис. 4.9 данных видно, что при приближении частоты внешнего поля к частоте промежуточного резонанса полное сечение возбуждения резко увеличивается за счет виртуального возбуждения атома полем.

Полученная выше формула (4.2.13) позволяет рассчитывать также упругий вынужденный тормозной эффект, в результате которого происходит поглощение (излучение) определенного количества фотонов электроном без изменения конечного состояния мишени ($f = i$) [13]. При этом учитывается внутренняя динамика мишени в процессе перехода. Соответственно дифференциальное сечение вынужденного тормозного эффекта можно записать как

$$\frac{d\sigma^{(m)}}{dq_p} = \frac{4p}{p_0 q^4} \left| \sum_{n+\nu=m} [F_{nn}(\mathbf{q}) - Z\delta_{no}] J_\nu \left(\frac{\mathbf{q}\mathbf{F}_0}{\omega^2} \right) \right|^2. \quad (4.2.17)$$

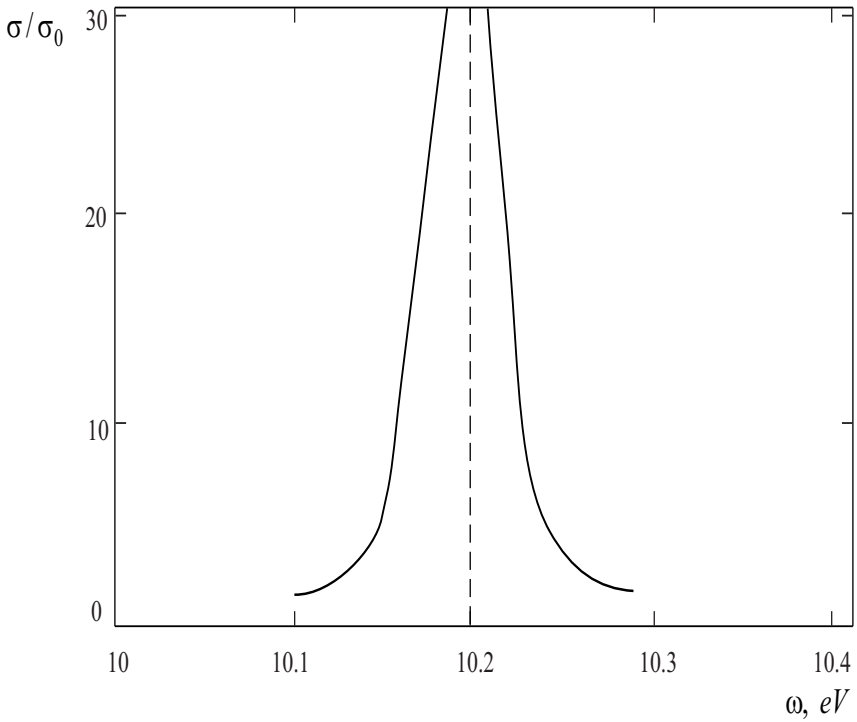


Рис. 4.9. Частотная зависимость отношения сечения возбуждения 3s состояния атома водорода в присутствии поля и без него при интенсивности $5 \cdot 10^7 \text{ В/см}$

Предположим, теперь лазерное поле таково, что параметр $\beta = \mathbf{qF}_0/\omega^2$ мал ($\beta \ll 1$) и функции Бесселя могут быть взяты в асимптотическом виде: $J_\nu(x) = x^\nu/\nu!$. При малых переданных импульсах $\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) \approx 1 + i\mathbf{q}\mathbf{r}$ и дифференциальное сечение рассеяния принимает вид

$$\frac{d\sigma^{(m)}}{d\omega_p} = \frac{4p}{p_0 q^4} \left| \sum_{n+\nu=m} \frac{[F_0(\mathbf{q}) - Z] + i\mathbf{q}\mathbf{P}_n}{\nu!} \left(\frac{qF_0 \text{sign}(\nu)}{\omega^2} \right)^{|\nu|} \right|^2 \quad (4.2.18)$$

с вектором поляризации мишени на частоте $n\omega$:

$$\mathbf{P}_n = \int \mathbf{r} \rho_n(r) dr, \quad \text{sign}(\nu) = \begin{cases} 1, \nu \geq 0 \\ -1, \nu < 0, \end{cases} \quad (4.2.19)$$

где $\rho_n(r)$ – фурье-компонента по времени от плотности заряда в мишени. Для основного состояния атома в силу правил отбора по четности величины \mathbf{P}_n отличны от нуля только при нечетных $|n| = 1, 3, 5, \dots$.

Проанализируем относительный вклад поляризаций \mathbf{P}_n на разных частотах. При рассеянии на атомах статическая часть форм-фактора $F_0(\mathbf{q}) - Z \rightarrow 0$ при $\mathbf{q} \rightarrow 0$. Поэтому в области малых переданных импульсов основной вклад в вынужденный тормозной эффект вносит рассеяние на осцилляциях электронного облака. Квадрат переданного импульса q равен $p^2 + p_0^2 - 2pp_0 \cos \theta$, где θ – угол между начальным импульсом \mathbf{p}_0 и конечным импульсом \mathbf{p} . Для вынужденного тормозного эффекта с поглощением (излучением) n фотонов атомом, интегрируя по направлениям движения рассеянного электрона, получим оценку

$$\sigma_n^{(m)} = \frac{P_n^2}{p^2} \begin{cases} \frac{1}{|\nu|!^2} \left(\frac{F_0 \kappa}{\omega^2} \right)^{2|\nu|} \frac{1}{2|\nu|}, \nu \neq 0 \\ \ln \frac{\kappa}{|p-p_0|}, \nu = 0, \end{cases} \quad (4.2.20)$$

где $\kappa = (2|\varepsilon_i|)^{1/2}$.

Как известно, гармоника вектора поляризации \mathbf{P} в рамках теории возмущений может быть выражена через тензор нелинейной восприимчивости $\hat{\chi}^{(n)}$:

$$\mathbf{P}_n = \hat{\chi}^{(n)} E_0^n. \quad (4.2.21)$$

Для нерезонансного значения величины $\hat{\chi}^{(n)}$ справедлива оценка

$$\hat{\chi}^{(n)} = d^{(n+1)} / \Delta \varepsilon^n,$$

где d – характерный размер атома, $\Delta \varepsilon$ – характерная энергия возбуждения, причем $d \sim 1/\kappa$, $\Delta \varepsilon \sim \kappa^2$. Пользуясь этим, нетрудно получить отношение сечения вынужденного тормозного эффекта с поглощением (излучением) ν и $\nu-1$ фотонов атомом: $\gamma = \left(\Delta \varepsilon / \omega |\nu|^{1/2} \right)^4$. В пределах малых частот эта величина значительно больше единицы при любом конечном ν . Поэтому при расчетах для таких частот достаточно ограничиться дипольной поляризуемостью. Это согласуется и с тем фактом, что в многофотонном отрыве электронов от отрицательных ионов, также наибольший вклад вносит дипольная поляризуемость атома. Дипольной поляризуемостью можно ограничиться и вблизи однофотонного резонанса.

В случае больших частот и большого числа поглощаемых (излучаемых) электроном фотонов имеем $|\nu| \gg 1$, $\beta \ll 1$, и более существенными оказываются процессы вынужденного тормозного эффекта, идущие через многофотонное возбуждение атома. В то время как в дифференциальном сечении рассеяния при малых углах доминирует поляризационный член ($q < \kappa$), при больших углах основной становится амплитуда статического вынужденного тормозного эффекта. Покажем, как вычисляется полное сечение вынужденного тормозного эффекта. Сечение тормозного эффекта с излучением m фотонов, идущим через возбуждение атома, логарифмически расходится при $q \rightarrow 0$. В то же время сечение статического вынужденного тормозного эффекта при рассеянии на нейтральном атоме в рассматриваемом пределе обращается в нуль. С другой стороны, при $q > \kappa$ вклад виртуального возбуждения мишени в вынужденный тормозной эффект становится экспоненциально малым из-за быстрых осцилляции множителя $\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})$ в подынтегральном выражении для сечений. В этой области переданных импульсов наибольший вклад вносит статическое рассеяние, поскольку с ростом переданных импульсов постепенно снимается экранировка ядра, а кулоновское сечение вынужденного тормозного эффекта убывает логарифмически с ростом q . Таким образом, сечение $\sigma^{(m)}$ можно представить в виде суммы прямого статического $\sigma_0^{(m)}$ и поляризационного $\sigma_{pol}^{(m)}$ сечений:

$$\sigma^{(m)} = \sigma_0^{(m)} + \sigma_{pol}^{(m)}. \quad (4.2.22)$$

В рассматриваемом случае,

$$\sigma_{pol}^{(m)} = \frac{4\pi P_m^2 \sin^2 \theta}{p^2} \ln \left(\frac{\kappa}{|p - p_0|} \right), \quad (4.2.23)$$

где θ – угол между векторами \mathbf{p} и \mathbf{P}_m . При $m > 1$ и выполнении условия $\beta \ll 1$ поляризационное сечение вынужденного тормозного эффекта можно выразить через единственную атомную характеристику – нелинейную восприимчивость атома $\hat{\chi}^{(n)}$.

Для численного расчета статической части сечения необходимо вычислить $V_0(\mathbf{q}) = 4\pi [-Z\delta_{n0} + F(\mathbf{q})]/q^2$. Мы ограничимся рассмотрением внешнего поля, слабо меняющего потенциал. Для тяжелых атомов воспользуемся аппроксимацией Тайтса для потенциала атома в

модели Томаса—Ферми:

$$V_0(r) = -Z / [r(1 + \mu r)^2], \quad \mu = (8 \cdot 2^{1/2} / 3\pi)^{2/3} Z^{1/3}. \quad (4.2.24)$$

Фурье-образ потенциала (4.2.24) выражается через функцию

$$g(u) = \int_0^\infty \frac{\cos(t)}{u+t} dt, \quad u > 0, \quad (4.2.25)$$

$$V_0(q) = -\frac{4\pi Z}{\mu^2} g\left(\frac{q}{\mu}\right). \quad (4.2.26)$$

С учетом этого

$$\sigma_0^{(m)} = \frac{4p}{\mu^2 p} \int g^2\left(\frac{q}{\mu}\right) J_m^2\left(\frac{\mathbf{q}\mathbf{F}_0}{\omega^2}\right) d\mathbf{o}_{\mathbf{p}}. \quad (4.2.27)$$

Расчет динамической части сечения $\sigma_{pol}^{(m)}$ в общем случае произвольных напряженностей внешнего поля довольно сложен. Если ограничиться не слишком сильными полями, для которых еще применима теория возмущений по взаимодействию атома с внешним полем ($dF_0/\Delta\varepsilon \ll 1$), то взаимодействие атома с полем можно учесть в наименьшем не исчезающем порядке теории возмущений. Метод расчета соответствующих матричных элементов, на основе модельного псевдопотенциала Фьюса и штурмовского разложения функции Грина изложен в [13].

В качестве примера на рис. 4.10 приведен результат расчета сечения двухфотонного излучения при рассеянии электронов с энергией 100 эВ на атоме ксенона в области напряженностей поля лазерного излучения $F_0 \ll \omega^2/\kappa$, в которой зависимость сечения от напряженности поля является степенной. Поляризация поля принята ортогональной направлению импульса налетающих электронов. Результаты расчетов приведены в виде зависимости ($\ln(\varepsilon^2/F_0^4)$) от частоты ω . Интервал изменения частоты внешнего поля выбран вблизи резонанса $5p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 5p^5 6s[3/2]_1^0$. Из рис. 4.10 видно, что поляризационный вклад наиболее велик вблизи резонанса и резко убывает с увеличением отстройки от него.

В предыдущем описании вынужденного тормозного эффекта мы не учитывали обменные эффекты. Вполне очевидно, что при боль-

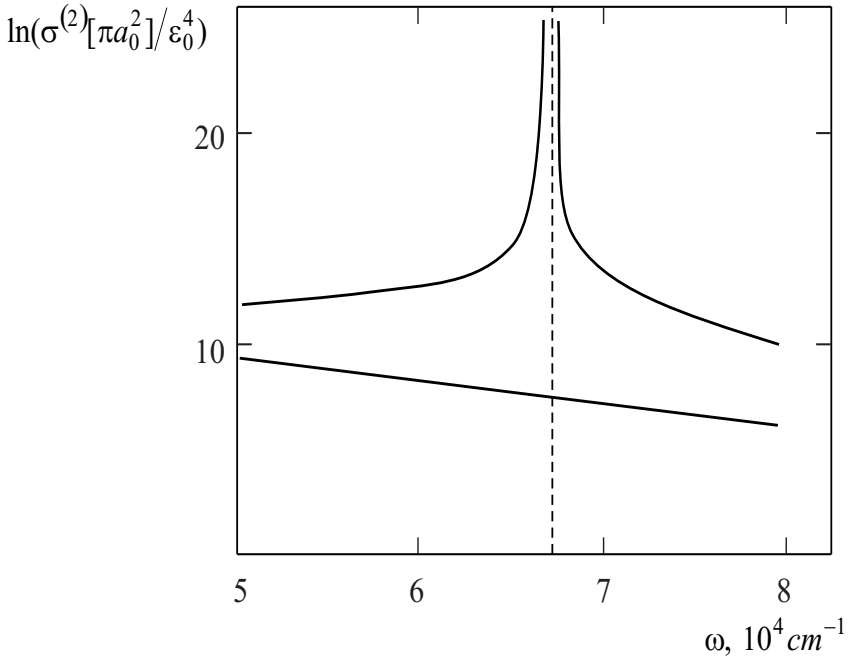


Рис. 4.10. Зависимость логарифма сечения двухфотонного тормозного излучения электронов $\ln(\sigma^{(2)}/\varepsilon_0^4)$ от частоты вблизи резонансного перехода для атома ксенона. Верхняя резонансная кривая соответствует учету поляризации атома внешним полем, нижняя кривая представляет результаты сечения в статическом приближении

ших скоростях налетающего электрона они малы. В то же время известен удобный способ учета обменных поправок в рамках приближения Очкура [14] в области умеренных энергий. Суть этого приближения заключается в вычислении обменной амплитуды с помощью ее разложения по обратным степеням параметра κ/p . Пользуясь им, можно получить выражение для сечения спонтанного тормозного излучения [15] с точностью до членов $\sim (\kappa/)^2$:

$$\frac{d\sigma_{sp}^{(-1)}}{d\omega} = \frac{4p^2}{3\pi\omega}(\sigma_t + \sigma_t') + \frac{16}{3\omega p^2} \times$$

$$\times \left\{ |Z - N - \omega^2 \alpha(\omega)|^2 \ln \frac{\gamma k}{p_0 - p} + \frac{(\gamma k)^2 + (p_0 - p)^2}{4p^2} \right\} \times \quad (4.2.28)$$

$$\times [(Z - N - \omega^2 \alpha(\omega)) (1 + \omega^2 \alpha^*(\omega)) + k.c.], \quad \gamma \sim 1,$$

где σ_t – транспортное сечение рассеяния электрона на атоме, σ'_t – поправка к транспортному сечению, учитывающая обменные эффекты. Для рассеяния на отрицательном ионе и рассеяния на валентном электроном при больших переданных импульсах она соизмерима с σ_t . Для атома эта поправка имеет вид

$$\sigma'_t = \frac{4\pi}{p^4} \int_{\vartheta}^{\pi} (Z - F(\mathbf{q})) f(\mathbf{q}) \sin \vartheta d\vartheta, \quad (4.2.29)$$

где $F(\mathbf{q})$ – форм-фактор внутренних электронов атома, $f(\mathbf{q})$ – форм-фактор внешнего валентного электрона. Эти общие соотношения можно проиллюстрировать на примере расчета сечения тормозного излучения при рассеянии электронов с энергией 20 эВ на атоме Li. Потенциал ионизации иона Li^+ равен 75.6 эВ, поэтому остов можно считать кулоновским центром с единичным положительным зарядом. В водородоподобном приближении волновая функция валентного электрона

$$\psi = (k^3/\pi)^{1/2} \cdot \exp(-kr), \quad (4.2.30)$$

а водородоподобный форм-фактор $f(\mathbf{q}) = [1 + (q/k)^2/4]^{-2}$.

Транспортное сечение, таким образом, равно

$$\sigma_t = \frac{2\pi}{k^2 p^4} (\ln u - 1/u + 1/2u^2 + 1/3u^2 + 1/6), \quad u = (p/k)^2 + 1. \quad (4.2.31)$$

Результаты расчета представлены на рис. 4.11. Сечение выражено в атомных единицах а₀² = 2.8 · 10⁻¹⁷ см². Обменная поправка к сечению тормозного излучения при рассеянии электронов на атомах Li не превышает 6% и мало меняется с изменением энергии налетающего электрона. Это меньше, чем в случае тормозного излучения на отрицательном ионе атома водорода, где обменная поправка достигает 25%.

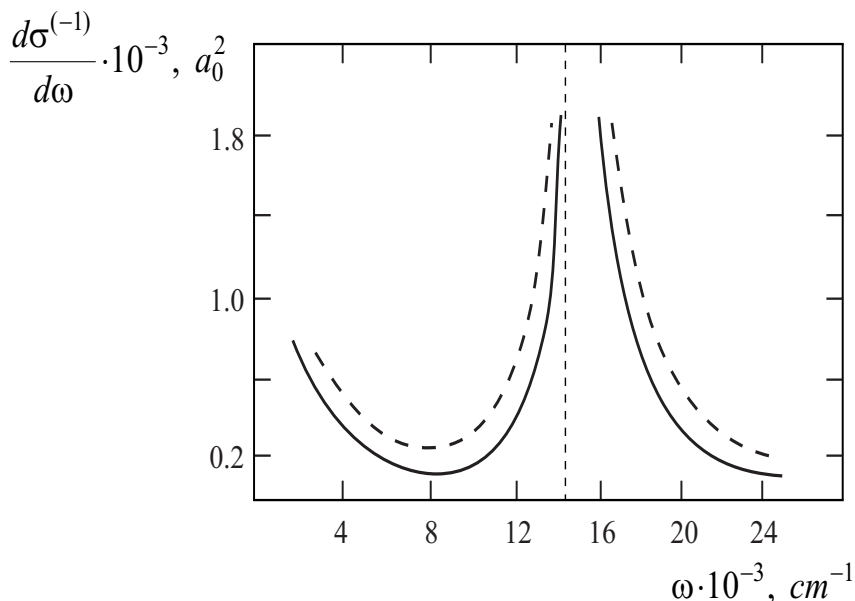


Рис. 4.11. Сечения тормозного излучения в зависимости от частоты без учета (сплошная кривая) и с учетом обменных эффектов (пунктир)

4.3. Тормозной эффект в плазме

Другой важной проблемой является учет влияния многочастичных эффектов на элементарные процессы в лазерной плазме. Выше мы рассмотрели процессы взаимодействия сильного лазерного излучения со свободными электронами и электронами, связанными в атомах и ионах. В то же время говорить о взаимодействии изолированных атомов и ионов с сильным световым полем можно только в том случае, когда расстояние между соседними частицами превышает дебаевский радиус $r_d = (T/4\pi n)^{1/2}$, где T – абсолютная температура по энергетической шкале, n – электронная концентрация. В реальных экспериментах это условие может легко нарушаться, т. е. может происходить плазмообразование. В сильном электромагнитном поле может оказаться важным эффект, связанный с многоэлектронной динамикой, проявляющейся в том числе и в динамической поляризации дебаевского

окружения иона, тогда как при рассеянии электронов на атомах экранировка осуществляется самими атомными электронами. Рассмотрим самосогласованный потенциал $\varphi(\mathbf{r}, t)$, возникающий в плазме вокруг иона при воздействии на нее сильного внешнего переменного электрического поля [16]. Гамильтониан отдельной частицы (электрона) в плазме

$$H = \tilde{H} + \varphi(\mathbf{r}, t), \quad (4.3.1)$$

$$\tilde{H} = \frac{1}{2} (\mathbf{p} + 1/c \mathbf{A}(t))^2,$$

$\mathbf{A} = (c/\omega) \mathbf{F}_0 \cos(\omega t)$ – вектор-потенциал внешнего поля, $\varphi(\mathbf{r}, t)$ – самосогласованный скалярный потенциал, создаваемый ионами и электронами в плазме.

До включения поля ($\mathbf{A} = 0$) равновесный одночастичный статистический оператор невозмущенной системы ($\varphi = 0$) обладает следующим свойством:

$$\hat{f}_0 |\mathbf{k}\rangle = f_0(\varepsilon_k) |\mathbf{k}\rangle. \quad (4.3.2)$$

Если включение поля происходит за время значительно меньшее времени релаксации (бесстолкновительная плазма), то равновесное распределение по состояниям свободной частицы перейдет в точно такое же распределение по квазиэнергетическим состояниям $|\mathbf{p}\rangle$, удовлетворяющим уравнению

$$(H - i\partial/\partial t) |\mathbf{p}\rangle = \tilde{\varepsilon}_p |\mathbf{p}\rangle, \quad (4.3.3)$$

где квазиэнергия $\tilde{\varepsilon}_p = \mathbf{p}^2/2 + F_0^2/4\omega^2$, \mathbf{p} – квазиимпульс.

Дальнейшая эволюция одночастичной матрицы плотности f описывается квантовым уравнением Лиувилля

$$i\dot{\hat{f}} = [\hat{H}, \hat{f}]. \quad (4.3.4)$$

Положим $f = f_0 + \delta f$. После линеаризации уравнения (4.3.4) по отклонению δf матрицы плотности от равновесного значения f получим следующее уравнение движения [16]:

$$i\delta\dot{\hat{f}} \approx [\hat{H}, \delta\hat{f}] + [\varphi, \hat{f}_0]. \quad (4.3.5)$$

Спроектируем уравнение (4.3.5) на полный базис плоских волн:

$$\langle \mathbf{k} | \delta f | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle = \langle \mathbf{k} | \left[\hat{H}_0, \delta \hat{f} \right] | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle + \langle \mathbf{k} | \left[\varphi, \hat{f}_0 \right] | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle. \quad (4.3.6)$$

Поскольку справедливо равенство

$$\langle \mathbf{k} | \left[\hat{N}, \delta \hat{f} \right] | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle = 1/2 \langle \mathbf{k} | \delta \hat{f} | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle, \quad (4.3.7)$$

то

$$\begin{aligned} i\partial/\partial t \langle \mathbf{k} | \delta \hat{f} | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle &= (\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \mathbf{q}\mathbf{A}/c) \langle \mathbf{k} | \delta \hat{f} | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle + \\ &+ [f_0(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}})] \varphi(\mathbf{q}, t). \end{aligned} \quad (4.3.8)$$

Здесь мы учли, что начальное распределение \hat{f}_0 сохраняет свой вид при включении поля. Вводя замену

$$\delta f = \delta f' \exp \left[-i(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})t - i/c \int_{-\infty}^t \mathbf{q}\mathbf{A} dt \right] = \delta \hat{f}' \xi(t), \quad (4.3.9)$$

получим

$$i\partial/\partial t \langle \mathbf{k} | \delta \hat{f}' | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle = \xi^{-1} [f_0(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}})] \varphi(\mathbf{q}, t). \quad (4.3.10)$$

Интегрируя (4.3.10) по времени и совершая преобразование обратное преобразованию (4.3.9), будем иметь

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | \delta \hat{f} | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle &= -i \int_{-\infty}^t dt' \varphi(\mathbf{q}, t') [f_0(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}})] \times \\ &\times \exp[-i(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})(t - t')] \times \\ &\times \exp\{i\mathbf{q}\mathbf{a}[\sin(\omega t) - \sin(\omega t')]\}, \end{aligned} \quad (4.3.11)$$

где $\mathbf{a} = \mathbf{F}_0/\omega^2$ – амплитуда колебаний свободного электрона в переменном поле. Воспользуемся фурье-преобразованием уравнения Пуассона:

$$\begin{aligned} q^2 \varphi(\mathbf{q}, t) &= 4\pi \rho(\mathbf{q}) - 4\pi \delta n(\mathbf{q}, t), \\ \delta n(\mathbf{q}, t) &= \sum \langle \mathbf{k} | \delta f | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle, \end{aligned} \quad (4.3.12)$$

где $\rho(\mathbf{q})$ – фурье-компонента статического заряда иона. Отсюда следует, что самосогласованный потенциал $\varphi(\mathbf{q}, t)$ удовлетворяет уравнению

$$\varphi(\mathbf{q}, t) = \frac{4\pi \rho(\mathbf{q})}{q^2} - \frac{4\pi i}{q^2} \int_{-\infty}^t dt' \varphi(\mathbf{q}, t') \sum_k \exp[-i(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})(t - t')] \times$$

$$\times \exp [i\mathbf{q}\mathbf{a}(\sin(\omega t) - \sin(\omega t'))] . \quad (4.3.13)$$

Решение уравнения позволяет определить фурье-компоненты величины $\varphi(\mathbf{q}, t)$ по времени [16]. Рассматривая полную задачу с учетом связанных электронов в ионе, например, в приближении локальной плотности (наипростейшим является приближение Хартри), можно ввести одночастичный гамильтониан

$$H = H_0 + U(\mathbf{r}, t) + \varphi(\mathbf{r}, t) , \quad (4.3.14)$$

в который в отличие от гамильтониана для полностью ионизованной плазмы добавлен потенциал $U(\mathbf{r}, t)$, создаваемый связанными электронами.

Обратимся теперь к вопросу о влиянии поляризационного потенциала, возникающего в плазме под действием внешнего лазерного излучения, на вынужденный тормозной эффект. Как известно, в идеальной плазме экранированный потенциал заряженной частицы (иона) с зарядом Z описывается выражением $\varphi = Z/r \cdot \exp(-r/r_d)$. Оно получается, если рассматривать поле заряда как возмущение, т. е. при $\varphi \ll T$. Очевидно, что это условие совпадает с условием идеальности плазмы. В то же время при $r < \bar{r} \approx T/Z$ стандартный подход, основанный на применении такого рода теории возмущений, становится неприменимым. Широко используемое распространение данного приближения на область расстояний основывается на том, что дебаевский потенциал имеет правильную асимптотику в окрестности атомного ядра. Это позволяет рассматривать дебаевский потенциал как результат сращивания асимптотик, справедливых порознь на больших и малых расстояниях.

Аналогичным образом может быть рассмотрено и дебаевское экранирование при наличии внешнего переменного электрического поля. Частицы самой плазмы, даже в условиях сильной неравновесности, участвуют в дебаевском экранировании других частиц. В то же время они являются зарядами, поле которых экранируется другими зарядами. Воспользуемся принципом разделения флуктуационного и среднего движений плазмы [17]. Объем плазмы с точки зрения рассеяния электронов заполнен классическими квазинейтральными атомами, у которых электронные оболочки создаются динамически свободными

плазменными электронами (дебаевское экранирование «шубы»). Ясно, что при этом реальный электрон выступает в двух ролях – как центр рассеяния и как элемент дебаевской оболочки. Так возникает картина «одетых» частиц. Сами "одетые" частицы описываются функцией распределения, усредненной по флуктуациям. Мы примем этот подход и в случае сильно неравновесной плазмы для учета воздействия сильных электромагнитных волн.

Будем полагать, что длина волны $\lambda > r_d$, а движение электрона является нерелятивистским, поэтому амплитуда колебаний свободного электрона в поле волны F_0/ω^2 . Включение переменного электрического поля может лишь улучшить идеальность плазмы, поскольку к средней тепловой энергии электронов $E_T = 3T/2$ добавляется средняя энергия осцилляции электрона в поле волны $E_{osc} = (F_0/2\omega)^2$. Соответственно условие идеальности плазмы приобретает вид

$$3T/2 + (F_0/2\omega)^2 \gg \varphi. \quad (4.3.15)$$

Самосогласованный потенциал иона с учетом его динамической экранировки электронной «шубой» в сильном переменном электрическом поле имеет следующий вид:

$$\varphi(\mathbf{q}, n\omega) = \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} \frac{4\pi\rho(\mathbf{q})}{q^2\varepsilon(\mathbf{q}, \mu\omega)} J_{n+\mu}(\mathbf{q}\mathbf{a}) J_{\mu}(\mathbf{q}\mathbf{a}), \quad (4.3.16)$$

где J_m – функции Бесселя с целым индексом, $\rho(\mathbf{q})$ – фурье-образ плотности заряда иона, $\varepsilon(\mathbf{q}, \mu\omega)$ – диэлектрическая проницаемость плазмы.

Диэлектрическая проницаемость плазмы, как известно, выражается через функцию распределения электронов по импульсам \mathbf{q} с помощью соотношения

$$\varepsilon = 1 + [1 + F(\mu x)] / (r_d q)^2, \quad x = \omega / (qv_T), \quad v_T = (3T)^{1/2}. \quad (4.3.17)$$

Для достаточно горячей плазмы, в которой электроны распределены по импульсам в соответствии с распределением Максвелла, функция

$$F(x) = x \exp(-x^2) \left(i\pi^{-1/2} - 2 \int_0^x \exp(-t^2) dt \right). \quad (4.3.18)$$

При рассмотрении взаимодействия лазерного излучения с холодной плазмой твердого тела необходимо заменить выражение для диэлектрической проницаемости соотношением, вытекающим из использования статистики Ферми—Дирака.

Поляризационный потенциал (4.3.16) позволяет определить сечения вынужденного тормозного эффекта при рассеянии электрона на ионе в полностью ионизованной плазме с учетом динамических поляризационных эффектов. Дифференциальное сечение вынужденного тормозного эффекта при рассеянии нерелятивистского электрона на мишени в телесный угол do с учетом поляризации мишени сильным лазерным полем имеет вид

$$\frac{d\sigma}{do} = \frac{p}{(2\pi)^2 p_0} \left| \sum_{n+\nu=m} \varphi(\mathbf{q}, n\omega) J_\nu(\mathbf{q}\mathbf{a}) \right|^2, \quad (4.3.19)$$

где \mathbf{p}_0 – импульс налетающего электрона, \mathbf{p} – импульс рассеянного электрона, $\mathbf{q} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}$ – переданный импульс. При учете только статического экранирования

$$\varphi(\mathbf{q}, 0) = -\frac{4\pi Z}{q^2 + r_D^2}, \quad (4.3.20)$$

$$\frac{d\sigma^{(m)}}{do} = \frac{4pZ^2}{p_0} \left(\frac{J_m(\mathbf{q}\mathbf{a})^2}{q^2 + r_D^2} \right). \quad (4.3.21)$$

Сечение (4.3.19) образуется в результате интерференции ряда квантово-механических амплитуд для процессов с различным числом фотонов n , поглощаемых (излучаемых) мишенью и числом фотонов ν , поглощаемых (излучаемых) рассеивающимся электроном. При этом полное число поглощенных (испущенных) при одном столкновении фотонов остается фиксированным и равным $m = n + \nu$. Для двух соседних членов суммы в выражении (4.3.19) при $qa \ll 1$ их относительный вклад в полное сечение может быть оценен как

$$C_{n,\nu}^m = \frac{\nu + 1}{n + 1}. \quad (4.3.22)$$

Соответствующий случаю $m=3$ график представлен на рис. 4.12: m – полное число поглощенных (излученных) фотонов, n – номер гармоники в динамическом потенциале Дебая (4.3.2). Как видно, преобладающими являются члены с малыми n , т. е. излучение (поглощение) происходит главным образом за счет рассеяния электронов на

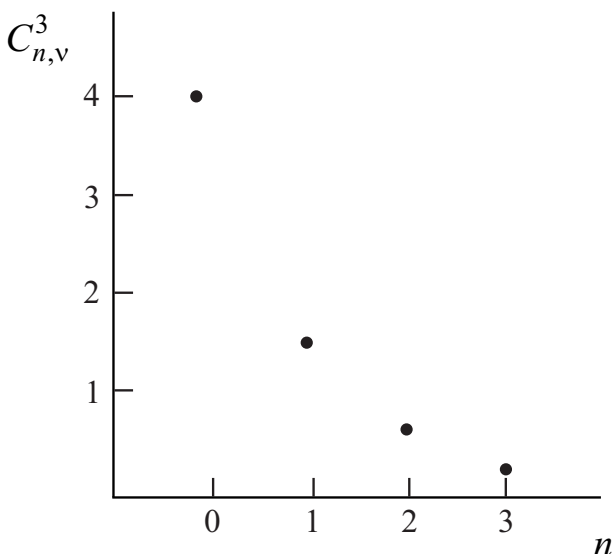


Рис. 4.12. Относительный вклад соседних членов в полное сечение трехфотонного ($m=3$) вынужденного тормозного эффекта: m – полное число поглощенных (излученных) фотонов, n – номер гармоники в динамическом потенциале Дебая

статической части потенциала, а также с поглощением (излучением) электронной «шубой» иона малого числа фотонов. С приближением аргумента функции Бесселя к величине $a/r_d \approx 1$ ситуация меняется и вклады от прямого статического и поляризационного механизма становятся соизмеримыми. Таким образом, поляризационные эффекты велики, когда амплитуда осцилляции электрона во внешнем поле лазерного излучения становится сравнимой с радиусом дебаевского экранирования r_d . При суммировании рядов функций Бесселя основной вклад в результат будут вносить функции с индексами $n \approx aq$. При больших значениях индекса функции Бесселя экспоненциально затухают.

Чтобы уменьшить трудности, связанные с суммированием большого числа функций Бесселя, в слабостолкновительной плазме, можно рассмотреть другое приближение, в котором предполагается, что электрон движется по заданной внешним полем и начальными условиями

классической траектории. Тогда энергия и импульс электрона в каждый момент времени определяется внешним полем и начальным импульсом. Если поле меняется со временем по закону

$$\mathbf{F}(t) = \mathbf{F}_0 \sin(\omega t + \varphi) , \quad (4.3.23)$$

то

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} - \frac{\mathbf{F}_0}{\omega} [\cos(\omega t + \varphi) - \cos \varphi] . \quad (4.3.24)$$

Поскольку время столкновения гораздо меньше периода внешнего поля, можно предположить, что изменение импульса за счет внешнего поля происходит адиабатически медленно. Тогда все процессы с небольшим изменением исходной энергии, стимулированные столкновением с электроном, могут быть найдены на основе приближения мгновенного удара и первого борновского приближения с учетом экранировки зарядов в плазме.

Динамическая экранировка кулоновского взаимодействия в плазме, как мы уже отмечали, описывается формулой (4.3.16). С учетом сделанных нами предположений формула (4.3.17) принимает следующий вид:

$$\frac{d\sigma^{(n)}(t)}{do} = \frac{P(t)}{(2\pi)^2 P_0(t)} |\varphi(\mathbf{q}, n\omega)|^2 , \quad (4.3.25)$$

$$P^2(t) = P_0^2(t) \pm 2n\omega .$$

При использовании формулы (4.3.25) следует иметь в виду, что импульс электрона, рассеивающегося на ионе, является периодической функцией времени с периодом внешнего поля. Полученное сечение также является периодической во времени функцией. Для нахождения наблюдаемых величин в окончательном результате необходимо произвести их усреднение по периоду. В момент рассеяния электрона на ионе мгновенный импульс электрона во внешнем поле претерпевает поворот на некоторый угол, а также меняется по величине за счет перекачки энергии от электронов "шубы". Мгновенное значение импульса сразу после рассеяния определяет среднее значение энергии электрона в конечном состоянии за вычетом колебательной энергии электрона во внешнем электромагнитном поле. Учет статического дебаевского экранирования соответствует сохранению в формуле (4.3.22) только одного члена с $n = 0$. При выключении внешнего поля ($F_0 = 0$) и

отсутствии плазменного окружения ($\varepsilon = 1$) формула (4.3.22) переходит в обычное выражение для сечения упругого рассеяния в первом борновском приближении.

Для проведения конкретных расчетов по полной формуле (4.3.16) ее удобно преобразовать к несколько иному виду. Для этого воспользуемся теоремой сложения для функций Бесселя [18], согласно которой

$$\sum_k J_{v-k}(\beta) J_k(\beta) = J_v(2\beta). \quad (4.3.26)$$

Тогда дифференциальное сечение вынужденного тормозного эффекта принимает вид

$$\frac{d\sigma^{(m)}}{d\omega} = \frac{4p\rho(q)}{p_0 q^4} |J_m(\mathbf{q}\mathbf{a}) + \Phi_m(\mathbf{q}, \omega)|^2, \quad (4.3.27)$$

$$\Phi_m(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mu} \frac{x(\mathbf{q}, \mu\omega) J_{m+\mu}(2\mathbf{q}\mathbf{a}) J_{\mu}(\mathbf{q}\mathbf{a})}{1 - x(\mathbf{q}, \mu\omega)}, \quad (4.3.28)$$

$$x(\mathbf{q}, \mu\omega) = [1 + F(\mu x)] / (r_D q)^2. \quad (4.3.29)$$

Результаты расчетов дифференциального сечения вынужденного 10-фотонного тормозного эффекта электрона с учетом и без учета поляризационного эффекта в плазме представлены на рис. 4.13. Приведена зависимость логарифма дифференциального сечения вынужденного 10-фотонного тормозного эффекта от энергии налетающего электрона при угле рассеяния электрона 0° ; 3 и 4 – то же для угла рассеяния электрона 20° .

Направление поляризации поля лазерного излучения выбрано вдоль направления движения налетающих на ион электронов. Расчеты проведены при напряженности поля $F_0 = 5 \cdot 10^7$ В/см и энергии лазерных фотонов $\omega = 1$ эВ. Температура плазмы взята равной 3000 К, а концентрация плазмы $n = 2 \cdot 10^{23}$ см $^{-3}$. Из представленных на рис. 4.13 зависимостей видно, что поляризационные эффекты велики в широком диапазоне энергий рассеивающегося электрона. Проинтегрированное по углам сечение без учета поляризационных эффектов равно $2.72 \cdot 10^{-2} a_0^2$, а с учетом поляризационных эффектов оно несколько больше и составляет $3.19 \cdot 10^{-2} a_0^2$, где a_0 – боровский радиус.

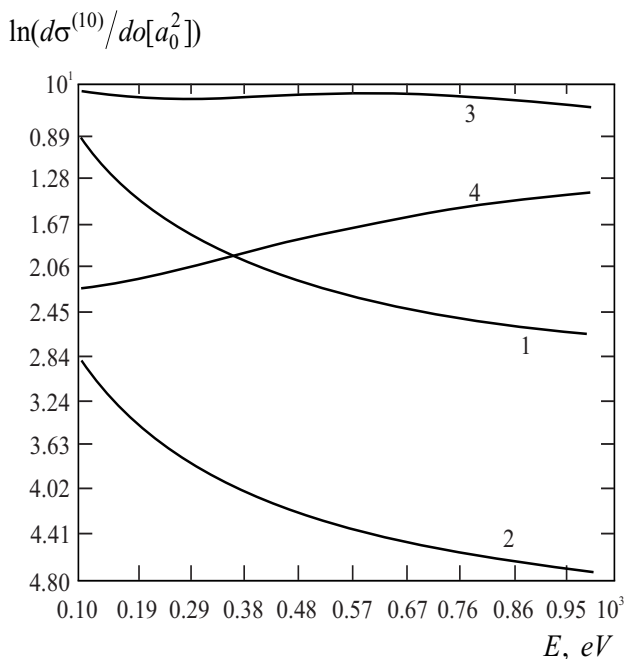


Рис. 4.13. Зависимость логарифма дифференциального сечения вынужденного 10-фотонного тормозного эффекта от энергии налетающего электрона с учетом 1 и без учета 2 поляризационного эффекта в плазме при угле рассеяния электрона 0° ; 3 и 4 – то же для угла рассеяния электрона 20°

На рис. 4.14 приведены результаты расчета зависимости логарифма дифференциального сечения 10-фотонного тормозного эффекта от угла рассеяния налетающего на ион электрона при начальной энергии электрона 50 эВ. Параметры лазерного излучения и плазмы соответствуют данным рис. 4.13. Рассчитанные в этих условиях сечения тормозного эффекта с учетом и без учета мнимой части поляризационной поправки (4.3.26) мало отличаются друг от друга за исключением области углов θ вблизи минимума сечения. Это отличие практически не сказывается на величине проинтегрированного по углам сечения тормозного излучения.

$$\ln(d\sigma^{(10)}/do[a_0^2])$$

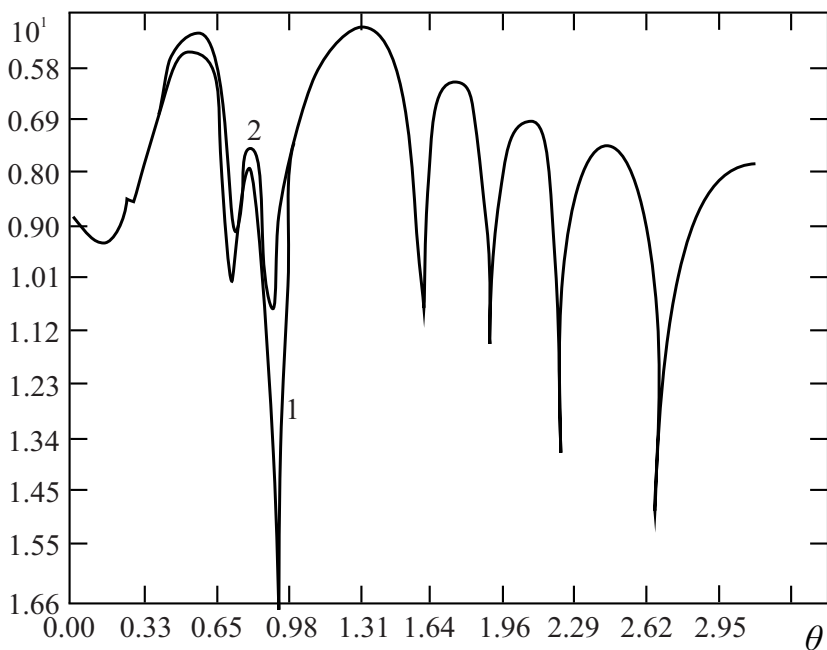


Рис. 4.14. Зависимость логарифма дифференциального сечения 10-фотонного тормозного эффекта от угла рассеяния налетающего на ион электрона: 1 – расчет без учета мнимой части поляризационной поправки, 2 – расчет с учетом мнимой части

На рис. 4.15 при тех же параметрах плазмы и поля показана зависимость сечения рассеяния на фиксированный угол от фотонности процесса: без учета (1) и с учетом (2) поляризационного излучения. Видно, что поляризационный эффект сильно замедляет скорость убывания сечения с ростом фотонности. При больших номерах гармоник поляризационный вынужденный тормозной эффект становится доминирующим.

Благодаря нелинейной поляризации дебаевской «шубы» можно ожидать эффективной генерации высоких гармоник в плотной, но прозрачной плазме под действием лазерных импульсов пикосекундной и

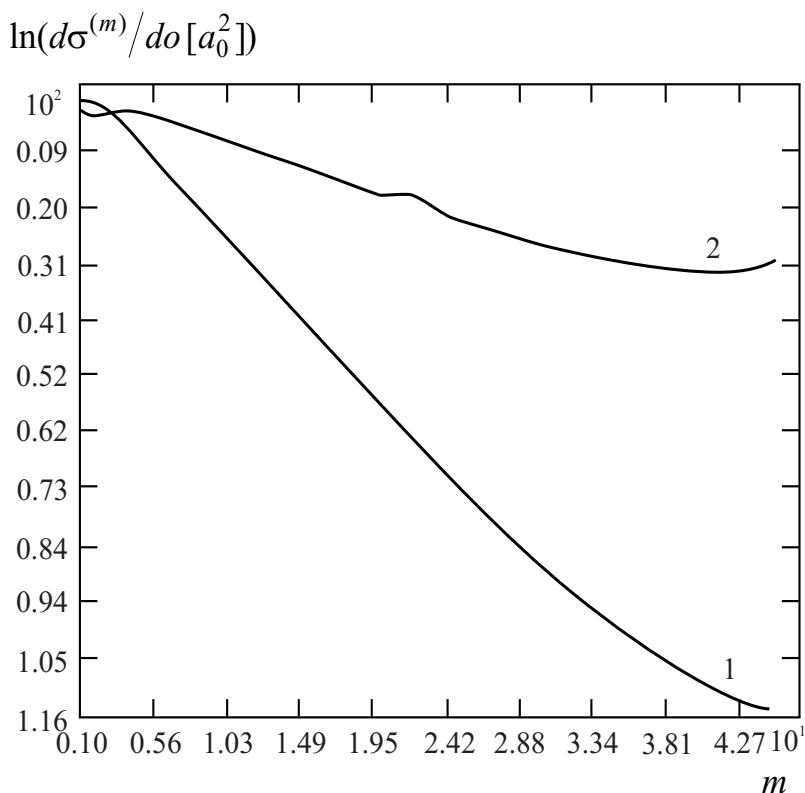


Рис. 4.15. Зависимость сечения рассеяния на угол 20° от количества m вынужденных фотонов в процессе

фемтосекундной длительности. При таких временах не успевают развиться параметрические и гидродинамические процессы, способные существенно изменить картину взаимодействия лазерного излучения с плазмой. Динамическая экранировка заряда должна сказаться и на межэлектронном взаимодействии, в частности, на сечении возбуждения и ионизации многозарядного иона в плазме при столкновении с электронами. Описанные нами методы и расчетные формулы позволяют рассчитать вынужденный тормозной эффект в плазме с учетом поляризации электронного окружения иона. При этом мы существенно использовали тот факт, что плазма является бесстолкновительной,

и за время действия на плазму лазерного излучения разогрева плазмы не происходит. Поляризационные эффекты в плотной, но оптически прозрачной плазме оказываются доминирующими в многофотонной области. Они значительно увеличивают сечения многофотонного тормозного эффекта в области углов рассеяния $0 < \arccos(r_d/a)$ и замедляют их убывание с ростом фотонности процесса. Полученные результаты можно применить и к электронной плазме твердого тела. В этом случае, однако, следует использовать в качестве исходного распределение, описывающее электроны в металле или полупроводнике, т. е. распределение Ферми—Дирака. Иной будет и диэлектрическая проницаемость электронного газа в твердом теле по сравнению с классической плазмой.

4. 4. Поляризационная рекомбинация на атомах и кластерах

Далее исследуется вклад поляризационного канала в однофотонные процессы излучения и рекомбинации электронов в плазме с ионами, обладающими многоэлектронным остовом. Рассмотрение проводится на основе квазиклассического приближения для рассеяния электронов и статистической модели ионов, позволяющей получить универсальное описание спектров различных элементов в широком диапазоне температур. В рамках этой модели плотность электронного распределения в остова иона дается формулами (2. 1.1)–(2. 1.13).

В рассматриваемом приближении потенциал электрон-ионного взаимодействия имеет вид:

$$U(r = x r_{TF}) = \frac{Z^{4/3}}{b} \times \left\{ \theta(x_0 - x) \left[\frac{\chi(x, q)}{x} + \frac{q}{x_0} \right] + \theta(x - x_0) \frac{q}{x} \right\}, \quad (4. 4.1)$$

где $\theta(x)$ – ступенчатая функция Хэвисайда.

Для расчета эффективного излучения по статическому и поляризационному каналам в области достаточно высоких частот можно пользоваться вращательным приближением (2. 7.11), (4. 1.43). Ранее было

показано, что результат (4.1.43) можно распространить на весь спектральный диапазон излучаемых фотонов, поскольку поляризационное тормозное излучение слабо зависит от траектории налетающей частицы. Напротив, интерполяция статического тормозного излучения (2.7.11) в область низких частот представляет собой определенную задачу, решаемую по-разному для нейтрального атома и для иона-мишени. В случае нейтрального атома достаточным оказывается линейная интерполяция (2.7.11) к транспортному пределу (2.7.22). Эта процедура несправедлива для иона, поскольку транспортное сечение рассеяния электрона в кулоновском поле расходится в пределе нулевых энергий налетающей частицы. Мы будем использовать для статического тормозного излучения в этом случае сопряжение высокочастотного и низкочастотного пределов. Соответствующий фактор Гаунта для статического канала имеет вид:

$$g_{st} = \frac{\sqrt{6}}{\pi} q^{\mu(\varepsilon)} \ln \left\{ \exp \left[\frac{\pi \max(q^2, g_{st}^a(\nu, \varepsilon))}{\sqrt{6} q^{\mu(\varepsilon)}} \right] + \left[\frac{4 \varepsilon^{3/2}}{1.78 \sqrt{\frac{b^3}{2}} \nu q} \right]^{\frac{q^2 - \mu(\varepsilon)}{\sqrt{2}}} \right\}, \quad (4.4.2)$$

где $\nu = \omega/Z$, $\varepsilon = Eb/Z^{4/3}$ – приведенные частота и энергия, $\mu(\varepsilon) = (1 - \ln \sqrt{\varepsilon})/2$, $g_{st}^a(\nu, \varepsilon)$ – гаунт-фактор для статического тормозного излучения на нейтральном атоме Томаса–Ферми. Сравнение результатов расчетов сечений тормозного излучения с использованием формулы (4.4.2) с результатами последовательных квантово-механических расчетов свидетельствует о хорошей точности интерполяции (4.4.2) лежащей, как правило, в пределах 10%.

Существенно, что в рассматриваемом приближении тормозное и рекомбинационное излучение плавно переходят друг в друга при значениях излучаемой частоты, равной высокочастотной границе спектра: $\omega^h = E + I(Z_i, Z)$, где $I(Z_i, Z)$ – потенциал ионизации иона-мишени. Рассмотрим сначала эффективное излучение по обоим каналам без температурного усреднения. Представляет интерес оценить вклад поляризационного излучения для случая низких энергий налетающих электронов $E \ll I(Z_i, Z)$ при их рассеянии на многозарядных ионах, когда доминирует рекомбинационное излучение. Эта ситуация имеет

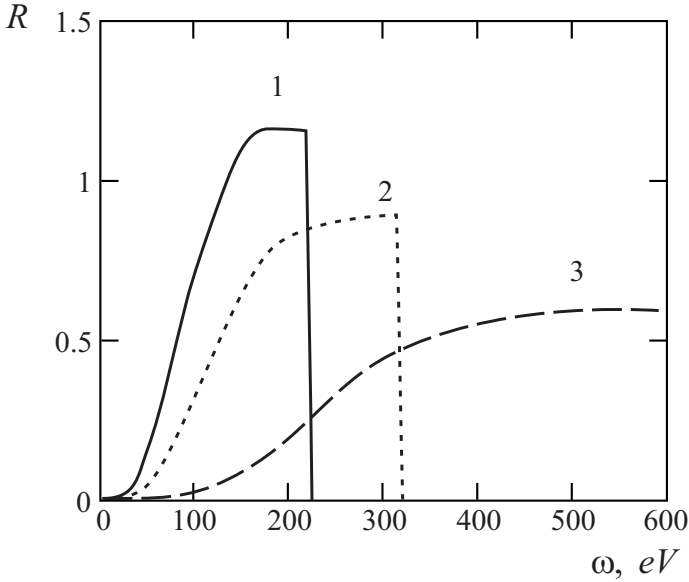


Рис. 4.16. Спектральный R -фактор для рекомбинационного излучения электронов с энергией 0.1 а.е., рассеивающихся на ионах урана ($Z=92$) различной степени ионизации: 1 – $Z_i = 12$, 2 – $Z_i = 15$, 3 – $Z_i = 28$

место, в частности, в экспериментах на накопительных кольцах. Для потенциала ионизации иона $I(Z_i, Z)$, определяющего высокочастотную границу излучения в этом случае, воспользуемся аппроксимацией

$$I(Z_i, Z) = \frac{3(1 + Z_i)^{4/3}}{1 - 0.96 \left(\frac{1 + Z_i}{Z} \right)^{0.257}}, \text{ эВ.} \quad (4.4.3)$$

Определим R -фактор как величину, характеризующую относительный вклад поляризационного канала в излучение, согласно равенству

$$R(\omega, Q) = \frac{d\kappa_{pol}(\omega, Q)}{d\kappa_{st}(\omega, Q)}. \quad (4.4.4)$$

Здесь в явном виде введена зависимость всех величин от степени ионизации мишени, являющаяся существенным новым моментом, отличающим настоящее рассмотрение от случая излучения на нейтральном атоме.

Спектральная зависимость R -фактора для рекомбинационного излучения медленных моноэнергетических электронов ($E = 0.1$ а.е.) на ионах с различной степенью ионизации представлена на рис. 4.16 для урана ($Z=92$) как элемента, обладающего наибольшим ионным остовом. Естественно, что максимальная величина R -фактора реализуется для минимальной степени ионизации (в данном случае $Z_i = 12$), когда относительно велик поляризационный заряд (4.1.41). В этом случае вклад поляризационного канала в рекомбинационное излучение превышает вклад статического для достаточно больших частот. Для данных значений параметров, как видно из рис. 4.16, существует оптимальная частота излучения, на которой величина R -фактора максимальна. Для больших частот относительный вклад поляризационного канала в процесс падает вследствие эффектов проникновения налетающей частицы в электронный остов мишени, сопровождающихся уменьшением поляризационного заряда N_{pol} . Значение оптимальной частоты возрастает с ростом заряда иона. При этом R -фактор уменьшается, а высокочастотная граница смещается в области больших частот.

Перейдем к расчетам интенсивности статического излучения и поляризационного излучения в высокотемпературной плазме, находящейся в состоянии коронального равновесия. Для температурной зависимости средней степени ионизации иона с заданным зарядом ядра будем использовать следующее аппроксимационное выражение:

$$\bar{Q}(T, Z) = \frac{26}{Z} \sqrt{\frac{0.0272 \cdot T}{1 + 0.015 \cdot T (26/Z)^2}}. \quad (4.4.5)$$

Приближение (4.4.5) позволяет легко рассчитать интенсивности излучения по каждому из каналов (в пересчете на одно электрон-ионное столкновение), включая тормозные и рекомбинационные процессы с учетом температурного фактора:

$$k(\omega, T, Z) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} T^{-3/2} \int_{E_{\min}(\omega, T)}^{\infty} \frac{d\kappa}{d\omega}(\omega, E, \bar{Q}(T, Z), Z) \exp\left(-\frac{E}{T}\right) E dE. \quad (4.4.6)$$

В формуле (4.4.6) нижний предел интегрирования определяется очевидным равенством:

$$E_{\min}(\omega, T, Z) = \max \{0, \omega - I(Z \bar{Q}(T, Z), Z)\} . \quad (4.4.7)$$

Для R -фактора, описывающего отношение температурно-усредненных интенсивностей излучения по поляризационному и статическому каналам, аналогично (4.4.4) можно записать:

$$\bar{R}_T(\omega, T, Z) = \frac{k_{pol}(\omega, T, Z)}{k_{st}(\omega, T, Z)} . \quad (4.4.8)$$

Спектральные зависимости усредненного по состоянию коронального равновесия плазмы R -фактора для рассеяния электронов на ионах различных элементов (Fe, Mo, W) и $T = 500$ эВ представлены на рис. 4.17. Видно, что вклад поляризационного излучения при заданной температуре возрастает с ростом заряда ядра: от 0.1 (в максимуме частотной зависимости) для железа до 0.6 для вольфрама. Это возрастание является следствием уменьшения среднетемпературной степени ионизации мишени с ростом заряда ядра, в результате чего увеличивается эффективный заряд электронного остова, обуславливающий излучение по поляризационному каналу. Отметим, что средний заряд иона при этом изменяется весьма слабо: 16.3 у железа и 18 у вольфрама. Положение максимума R -фактора несколько сдвигается в область высоких частот при переходе от вольфрама к железу. С повышением температуры плазмы вклад поляризационного излучения в процесс уменьшается, что связано с ростом средней степени ионизации мишени, оптимальная частота при этом также растет. Так, для $T = 1000$ эВ и вольфрамовой мишени, когда $\bar{Q}_T = 0.34$ ($\bar{Z}_i = 25$), расчет дает: $\bar{R}_T^{\max} \approx 0.43$ и $\omega_{\max} \approx 900$ эВ.

Анализ роли поляризационного излучения, проведенный в рамках предложенного подхода, показывает, что вклад поляризационного канала может быть существенным также и в случае легких атомов, если температура плазмы достаточно низка. Так, для ионов углерода и $T = 10$ эВ ($\bar{Q}_T = 0.32$), максимальное значение усредненного R -фактора составляет примерно 0.46. При этом оптимальная (для проявления поляризационных эффектов) частота смещена в высокочастотный диапазон $\omega_{\max} \approx 80$ эВ по сравнению со случаем тяжелых

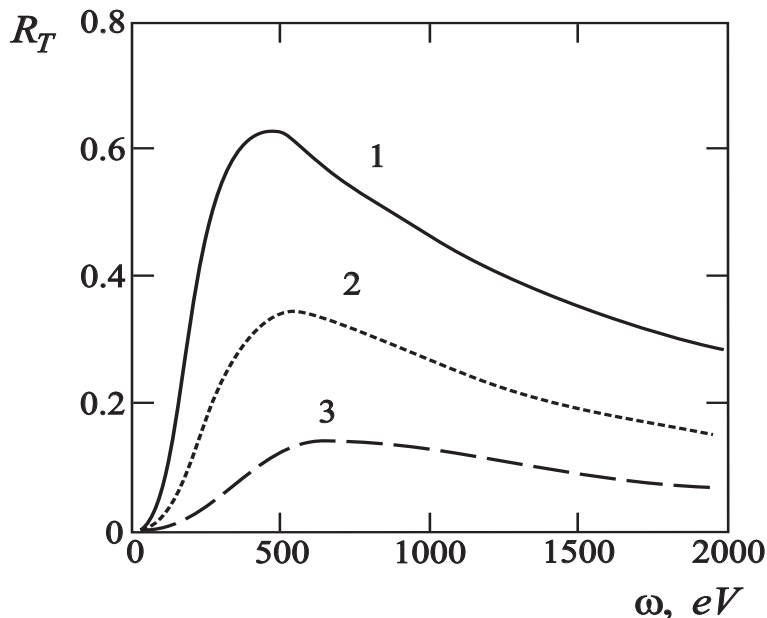


Рис. 4.17. R -фактор, усредненный по состоянию коронального равновесия при температуре 500 эВ, для различных мишеней: 1 – W, 2 – Mo, 3 – Fe

элементов, когда $\omega_{\max} \approx T$. Конечно, использование статистической модели в этом случае является весьма грубым приближением.

Развитый выше подход позволяет выразить сечение фоторекомбинации квазиклассического электрона с начальной энергией E через спектральное эффективное излучение в соответствии с равенством

$$\sigma_r(E, q, Z) = \int_E^{E+I} \frac{d\kappa}{d\omega} \frac{d\omega}{\omega}. \quad (4.4.9)$$

При выводе (4.4.9) была учтена связь между эффективным излучением и сечением процесса: $\kappa = \omega \sigma$. Формула (4.4.9) описывает как статический, так и поляризационный канал, если под $d\kappa/d\omega$ понимать соответствующее эффективное излучение.

Следует иметь в виду, что используемый классический подход не учитывает, естественно, виртуальных возбуждений электронного остова иона в дискретном спектре. Таким образом, его точность зависит от вклада дискретного спектра в поляризуемость мишени: чем меньше этот вклад, тем точнее результаты настоящего рассмотрения. Роль дискретного спектра мала для атомов (ионов) с замкнутыми электронными оболочками, поэтому используемый метод наиболее адекватен для такого рода мишеней. В противоположном случае он дает, как правило, оценку снизу для вклада поляризационных эффектов в рассматриваемые процессы. Эффекты поляризации остова в фоторекомбинации можно также охарактеризовать R -фактором:

$$R_r(E) = \frac{d\sigma_r^{pol}(E)}{d\sigma_r^{st}(E)}, \quad (4.4.10)$$

описывающим относительный вклад поляризационного канала в сечение процесса аналогично (4.4.4). Для рекомбинационных процессов в плазме представляет интерес скорость фоторекомбинации, усредненная по состоянию коронального равновесия, выражение для которой через соответствующее сечение имеет вид:

$$\alpha_r(T, Z) = 2 \sqrt{\frac{2T}{\pi}} \int_0^\infty \sigma_r(xT, \bar{Q}(T, Z), Z) e^{-x} x dx. \quad (4.4.11)$$

Здесь использована средняя степень ионизации (4.4.5), зависящая от температуры и заряда ядра. В частности, для скорости фоторекомбинации по статическому каналу в приближении Крамерса с использованием формулы (4.4.9) можно получить:

$$\begin{aligned} \alpha_r^{(Kr)}(T, I) = & \left(\frac{2}{3}\right)^{3/2} \frac{8\sqrt{\pi}}{c^3} \frac{1}{\sqrt{T}} \times \\ & \times \int_0^\infty Z_{ef}^2(x) e^{-x} \ln\left(1 + \frac{I}{xT}\right) dx. \end{aligned} \quad (4.4.12)$$

Здесь $Z_{ef}(x)$ – эффективный заряд иона, зависящий, вообще говоря, от энергии налетающей частицы. Для достаточно низких температур, когда мало проникновение рекомбинирующего электрона в остов иона,

эффективный заряд можно положить равным заряду иона и вынести за знак интеграла в правой части равенства (4. 4.12).

Рассчитанные в рамках настоящего подхода скорости фоторекомбинации квазиклассических электронов на ионе урана по поляризационному и статическому каналам представлены на рис. 4.18. Видно, что температурная зависимость рассматриваемых механизмов фоторекомбинации носит различный характер. Скорость рекомбинации по статическому каналу монотонно возрастает, для поляризационного же канала существует оптимальное значение температуры, равное в данном случае примерно 100 эВ. При интерпретации рассчитанных по формуле (4. 4.11) зависимостей нужно иметь в виду, что с ростом температуры возрастает также и средняя степень ионизации мишени. Это приводит, с одной стороны, к росту эффективного заряда иона, с другой стороны, к росту характерной частоты фоторекомбинационного излучения. Первое обстоятельство увеличивает скорость статического и уменьшает скорость поляризационного канала, а второй фактор, напротив, увеличивает скорость поляризационной фоторекомбинации. В результате температурная зависимость последней описывается кривой с максимумом, в котором поляризационный канал для данного элемента оказывается доминирующим над статическим.

Из результатов настоящих расчетов следует, что существует достаточно широкая область значений параметров, в которой поляризационная рекомбинация электронов на многозарядных ионах сравнима или даже преобладает над статической. В то же время нужно иметь в виду, что энергии налетающей частицы, для которых реализуется такое преобладание, относительно велики и сравнимы с энергией возбуждения дискретных электронных состояний в остоле мишени. В этом случае основной вклад в рекомбинацию дает, как правило, диэлектронная рекомбинация. Таким образом, вклад поляризационного канала может оказаться существенным лишь в промежуточном энергетическом интервале между областью низких энергий, где преобладает статическая фоторекомбинация и областью относительно высоких энергий, где преобладает диэлектронная рекомбинация. Примером такой ситуации может служить случай рекомбинации электрона на ионе FeIII, играющий важную роль в астрофизических приложениях. Расчеты, основанные на методе R-матрицы, с учетом вклада 83 состояний иона FeIII, весьма трудоемки (число учитываемых со-

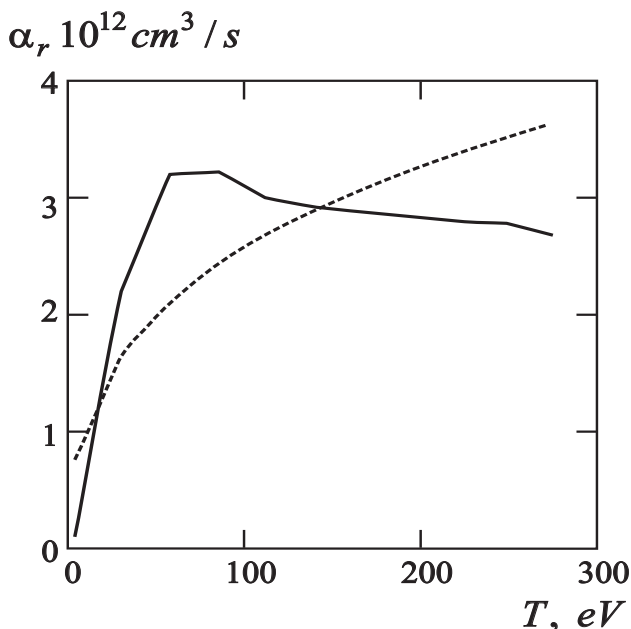


Рис. 4.18. Скорость рекомбинации на ионе урана с температурно-зависимой степенью ионизации: сплошная кривая – поляризационный канал, пунктир – статический канал

стояний ограничивалось из-за ограничения времени счета на Cray) и демонстрируют чувствительность результатов к выбору базиса. Важно отметить, что в этих расчетах не проводится разделения каналов рекомбинации на статический, поляризационный и диэлектронный, а рассчитывается излучение всей взаимодействующей системы «налетающий электрон+рекомбинирующий ион».

Из сравнения результатов численных расчетов с расчетами радиационной и диэлектронной рекомбинации, представленных на рис. 4.19, видно, что существует весьма широкая область температур 0.2 – 2 эВ, в которой величина рассчитанной скорости рекомбинации в несколько (до пяти) раз превосходит суммарный вклад статического и диэлектронного каналов. Видно также заметное расхождение с предыдущими расчетами диэлектронной рекомбинации, обусловленное отмечавшимися различиями в выборе базиса. Интересно сравнить результа-

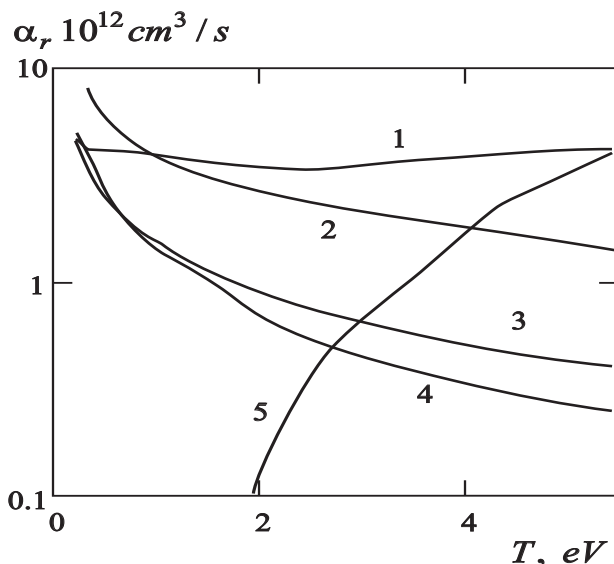


Рис. 4.19. Температурная зависимость скорости рекомбинации иона Fe^{2+} : 1 – полная скорость рекомбинации, рассчитанная с учетом вклада 83 состояний; 2 – полная скорость фоторекомбинации без учета интерференции; 3 – скорость фоторекомбинации, рассчитанная в приближении Крамерса по формуле (4. 4.17); 4 – скорость фоторекомбинации по статическому каналу; 5 – скорость диэлектронной рекомбинации по результатам более ранних работ

ты детальных численных расчетов с данными классического подхода. Эти данные, получаемые путем усреднения формул (4. 4.9), (4. 4.10) по максвелловскому распределению электронов по скоростям в предположении конструктивной интерференции между каналами, также представлены на рис. 4.19. Соответствие между обоими результатами оказывается весьма удовлетворительным, особенно принимая во внимание тот факт, что используемая нами статистическая модель атома вообще не учитывает специфики электронной структуры иона Fe^{2+} . Это свидетельствует о физической адекватности выделения поляризационного канала как самостоятельного механизма излучения и рекомбинации. Более того, поскольку наша модель использует представление о локальной плазменной частоте атома, то соответствие ее результатов для поляризационного излучения более точным расчетам

позволяет в определенной мере говорить о проявлении коллективных свойств атома в этих процессах. Интересно отметить, кроме того, что из сравнения кривых, описывающих статическую фоторекомбинацию, следует вывод о хорошей точности приближения Крамерса в рассматриваемом температурном диапазоне.

Приведенные выше результаты следует принимать во внимание, в частности, для корректировки методов диагностики плазмы. Действительно, учет поляризационного канала изменяет соотношение между интенсивностью экспериментально наблюдаемого непрерывного спектра излучения и средним зарядом иона, используемое для определения эффективного заряда Z_{ef} плазмы. В это соотношение, традиционно рассчитывавшееся в статическом приближении, следует внести поправочный множитель $1 + R$. В результате действительный средний ионный заряд оказывается, вообще говоря, меньшим своего значения, определенного в статическом приближении.

Рассмотрим теперь радиационные процессы на кластерах с учетом поляризационного канала. Отличительной чертой кластера, существенной для поляризационного излучения, является большая величина его поляризуемости $\alpha(\omega)$. Действительно, вблизи так называемого гигантского резонанса в фотопоглощении, величина $\alpha(\omega)$ может достигать 10^4 а.е., намного превосходя характерные атомные значения. Поскольку сечение поляризационного излучения пропорционально квадрату модуля поляризуемости, то естественно ожидать возрастание роли поляризационного канала в излучательных процессах на кластерах.

Вклад поляризационного канала в радиационный захват электронов, рассеивающихся на заряженных кластерах типа Na_{20}^+ и Ag_{11}^+ , может быть рассчитан с помощью разложения волновой функции налетающего электрона по парциальным волнам с фиксированным значением углового момента. Интегральное сечение процесса имеет вид (в атомных единицах):

$$\sigma = \frac{4\omega^3}{3p^2 c^3} \left| \langle n_f; 0 | r | p; 1 \rangle + \right.$$

$$+ \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \alpha(\omega, q) \langle n_f; 0 | j_1(qr) | p; 1 \rangle q dq \quad (4.4.13)$$

где p – начальный импульс электрона, $j_1(x)$ – сферическая функция Бесселя, n_f – квантовое число конечного (связанного) состояния электрона. Первое слагаемое под знаком модуля в формуле (4.4.13) описывает обычный (статический) канал фоторекомбинации, второе – поляризационный канал. Зависимость обобщенной поляризуемости $\alpha(\omega, q)$ от переданного импульса q может быть учтена с помощью кластерного форм-фактора, а от частоты – с помощью оптической теоремы через сечение фотопоглощения, известное из эксперимента. Заметим, что максимум сечения фотопоглощения рассматриваемых кластеров соответствует энергии фотона, примерно равной 3 эВ, что соответствует коллективному движению делокализованных электронов кластера.

Для оценки относительного вклада поляризационного излучения в радиационный захват рассчитаем отношение полного сечения процесса к своему статическому значению, т. е. величину, аналогичную R -фактору (4.1.44). В данном отношении выпадает зависимость от волновых функций налетающего электрона, если учесть, что основной вклад в процесс дает первый член разложения сферической функции в формуле (4.4.13). Тогда можно получить простое выражение:

$$R = \left| 1 + \frac{2}{3\pi} \int_0^{\infty} \alpha(\omega, q) q^2 dq \right|^2. \quad (4.4.14)$$

Расчет по формуле (4.4.14) показывает, что данное отношение для Na_{20}^+ кластера в максимуме частотной зависимости составляет 140 единиц, а для кластера Ag_{11}^+ – 1400. Из проведенной оценки следует доминирующая роль поляризационного канала в излучательном захвате электронов металлическими кластерами.

Сечение тормозного излучения электронов, рассеивающихся на металлических кластерах, с учетом поляризационного канала имеет вид:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega dq} = \frac{16}{3c^3 p^2 \omega q} |W_+(q) - W_-(q) + \omega^2 \alpha(\omega, q)|^2, \quad (4.4.15)$$

где $W_+(q)$ и $W_-(q)$ – форм-факторы ионной и электронной компонент кластера. Формула (4.4.13) получена в борновском приближении по налетающей частице, которое хорошо описывает поляризационный канал даже для относительно небольших скоростей рассеивающегося электрона. Как и в формуле (4.4.13), последнее слагаемое в (4.4.15) представляет собой поляризационный член, а два первых – статический. Вычисление вкладов этих трех слагаемых в частотном интервале вблизи гигантского резонанса $\omega \approx \omega_0$ для случая нейтральных и заряженных кластеров показывает сильное доминирование поляризационного канала над статическим каналом. Это доминирование для заряженных кластеров характеризуется фактором, порядка 10^2 и выше, а для нейтральных кластеров – $10^3 - 10^4$. Столь сильное превышение, не имеющее места в тормозном излучении на атомах, связано с когерентным вкладом делокализованных электронов кластера в сечение поляризационного излучения ($\sigma \propto N_-^2$) и большой величиной числа N_- в случае многоатомных кластеров.

Из выражения для сечения (4.4.15) следует новая отличительная черта тормозного излучения на кластере, отсутствующая в случае атома. Она связана с возможностью выполнения равенства:

$$W_+(q) = W_-(q), \quad (4.4.16)$$

когда исчезает обычное статическое тормозного излучения и остается только вклад поляризационного излучения в процесс. Заметим, что условие (4.4.16) выполняется при всех значениях переданного импульса в рамках так называемой оптимизированной гелевой модели кластера. В рамках других моделей (4.4.16) выполняется для некоторых значений параметра q , и тогда резко возрастает важность поляризационного канала в дифференциальном сечении тормозного излучения.

В случае больших частот $\omega \gg \omega_0$, когда справедлива высокочастотная асимптотика для обобщенной поляризуемости:

$$\alpha(\omega, q) \approx -\frac{W_-(q)}{\omega^2}, \quad (4.4.17)$$

второе и третье слагаемое в формуле (4.4.15) взаимно уничтожаются, и выражение для сечения принимает вид:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega dq} = \frac{16}{3c^3 p^2 \omega q} |W_+(q)|^2, \quad (4.4.18)$$

т. е. тормозное излучения происходит как бы на «голой» ионной компоненте кластера. Это явление аналогично «раздеванию» атома в высокочастотном пределе, но в отличие от атомного случая из (4.4.18) следует возможность зануления сечения тормозного излучения при определенных значениях переданного импульса, когда $W_+(q) = 0$. В случае справедливости гелевой модели для ионной компоненты кластера из (4.4.18) вытекает осциллирующая зависимость дифференциального сечения тормозного излучения как функции переданного импульса. Это явление связано с дифракцией излучающего электрона на краях кластера. Оно может быть использовано в качестве метода экспериментального определения размера кластера и для верификации различных моделей кластера.

Литература

1. *Astapenko V.A., Bureyeva L.A., Lisitsa V.S.* Polarization radiation phenomena in plasmas with heavy ions // *Physica Scripta*. 2000. V. 86. P. 62–67.
2. *Астапенко В.А., Буреева Л.А., Лисица В.С.* Классическая и квантовая теория поляризационного тормозного излучения в модели локальной электронной плотности // *ЖЭТФ*. 2000. Т. 117. С. 496–510.
3. *Астапенко В.А., Буреева Л.А., Лисица В.С.* Поляризационное тормозное излучение быстрой заряженной частицы на томас-фермиевском атоме // *ЖЭТФ*. 2000. Т. 117. С. 906–912.
4. *Астапенко В.А.* Поляризационные и интерференционные явления в тормозном излучении заряженных частиц на атомах // *Химическая физика*. 2000. Т. 19. С. 17–77.
5. *Астапенко В.А., Буреева Л.А., Лисица В.С.* Радиационные потери электронов при рассеянии на томас-фермиевском атоме // *ЖЭТФ*. 2002. Т. 121. С. 19–30.
6. *Астапенко В.А., Буреева Л.А., Лисица В.С.* Поляризационные эффекты в атомных переходах // *УФН*. 2002. Т. 172. С. 155–192.

7. 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. С. 337–345.
8. Федоров М.В., Юдин Г.Л. Вынужденный тормозной эффект // ЖЭТФ. 1981. Т. 46. С. 2013–2018.
9. Бейгман И.Л., Чичков Б.Н. Допороговое возбуждение атомов электронами в сильном световом поле // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. С. 314–316.
10. Головинский П.А. Возбуждение атомов электронами в сильном световом поле // ЖЭТФ. 1993. Т. 1003. С. 1947–1958.
11. Franken P., Joachin C.J. Electron-impact of atoms in the presence of nearly resonant laser field // Phys. Rev. A. 1990. V. 41. P. 3770–3774.
12. Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.П. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. – М.: Наука, 1979.
13. Головинский П.А. Вынужденный тормозной эффект при рассеянии электронов на атомах с учетом поляризации мишени // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. С. 87–94.
14. Очкур В.И. О методе Борна–Оппенгеймера в теории атомных столкновений // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. С. 734–741.
15. Головинский П.А. О роли эффектов обмена в тормозном излучении при рассеянии на атомах и отрицательных ионах // Оптика и спектр. 1982. Т. 53. С. 614–618.
16. Головинский П.А., Долгополов М.А., Хлебостроев В.Г. Вынужденный поляризационный тормозной эффект в плазме // Физика плазмы. 1994. Т. 20. С. 558–563.
17. Цытович В.Н. Об описании коллективных процессов и флуктуаций в классической плазме // УФН. 1989. Т. 159. С. 335–337.
18. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. – М.: Наука, 1979.

Глава 5

Резонансные процессы и интерференционные эффекты

5. 1. Резонансный вынужденный тормозной эффект

В данном разделе рассматривается вынужденный тормозной эффект при рассеянии электронов на ионах с остовом в сильном электромагнитном поле. Предполагается, что отстройка $\Delta = \omega - \omega_0$ частоты внешнего поля ω от собственной частоты остова ω_0 по модулю много меньше самой частоты: $|\Delta| \ll \omega$. Тогда можно пренебречь вкладом других электронных переходов в процесс (резонансное приближение). В то же время считаем, что $|\Delta|$ существенно превосходит ширину линии резонансного перехода $|\Delta| \gg \Gamma$. Последнее неравенство позволяет пренебречь его реальным возбуждением.

Как известно, вынужденный тормозной эффект в сильном поле носит, вообще говоря, многофотонный характер, т. е. рассеивающийся электрон может поглотить/ испустить сразу несколько фотонов внешнего поля. Статическое приближение, широко использовавшееся в тео-

рии тормозного излучения на протяжении многих лет, адекватно физике процесса при рассеянии электрона на кулоновском центре. Оно также применимо в тех случаях, когда поляризуемость мишени пренебрежимо мала. В рассматриваемом здесь резонансном тормозном эффекте, напротив, поляризуемость мишени велика. Поэтому необходимо учитывать вклад в поглощение/излучение связанных электронов мишени – поляризационный канал. В данном разделе мы произведем учет этого вклада в рамках дипольного приближения по взаимодействию налетающей частицы с электронным остовом мишени, т. е. пренебрежем эффектами проникновения рассеивающегося электрона в остов. Такое приближение справедливо, если эффективное расстояние, на котором происходит поглощение/излучение фотона, превосходит радиус электронного остова. Такая ситуация реализуется, например, в условиях применимости крамеровской электродинамики, когда имеет место локализация пространственной области, ответственной за поглощение или излучение фотонов. Соответствующее эффективное расстояние r_ω в случае многозарядного иона и квазиклассического рассеивающегося электрона может быть оценено по формуле (используем атомные единицы):

$$r_\omega \approx \left(\frac{Z_i}{\omega^2} \right)^{-1/3}, \quad (5.1.1)$$

где Z_i – заряд иона. Выражение (5.1.1) представляет собой решение уравнения (2.7.12) при выполнении неравенства $|U(r_\omega)| \gg E$, где E – начальная энергия электрона, $U(r)$ – его потенциальная энергия. Таким образом, условие применимости дипольного приближения в рассматриваемом случае имеет вид $r_\omega > R_0$, R_0 – радиус иона.

Вероятность вынужденного тормозного эффекта с учетом поляризационного канала проще всего получить в рамках так называемого метода заданного тока [1]. В резонансном приближении выражение для полного тока, вызывающего процесс, дается следующим равенством [2]

$$\mathbf{j}_\omega^{total} = \mathbf{j}_\omega^{projectile} + \mathbf{j}_\omega^{polariz} = \left[1 - \left[\frac{\omega^2}{Z_i} \right] \alpha(\omega, \mathbf{F}_0) \right] \mathbf{j}_\omega^{projectile}, \quad (5.1.2)$$

где $\alpha(\omega, \mathbf{F}_0)$ – поляризуемость мишени первого порядка на частоте ω , определенная с учетом возмущения мишени лазерным полем амплитуды \mathbf{F}_0 . Первое слагаемое в правой части (5.1.2) представляет

собой ток налетающей частицы, ответственный за статический канал, второе – поляризационный ток, обуславливающий процесс по поляризационному каналу. Как видно из второго равенства (5.1.2), поляризационный ток может быть выражен через ток налетающей частицы с помощью динамической поляризуемости остова мишени. Резонансная поляризуемость ионного остова $\alpha(\omega, \mathbf{F}_0)$ для частотных отстройек $|\Delta| \gg \Gamma$ равна:

$$\alpha(\omega, \mathbf{F}_0) = d_0^2 \operatorname{sign}(\omega_0 - \omega) / \Omega_R, \quad (5.1.3)$$

где d_0 – матричный элемент дипольного момента перехода, Ω_R – обобщенная частота Раби $\Omega_R = \sqrt{(\mathbf{d}_0 \mathbf{F}_0)^2 + (\omega - \omega_0)^2}$. Существенно, что благодаря наличию функции $\operatorname{sign}(-\Delta)$ знак поляризуемости меняется при переходе частоты через резонанс.

Уравнение для волновой функции χ одной моды внешнего электромагнитного поля в представлении взаимодействия имеет вид:

$$i \frac{\partial \chi}{\partial t} = - \left(\frac{2\pi}{\omega V} \right)^{1/2} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{j}_\omega^{total})(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+) \chi. \quad (5.1.4)$$

Здесь $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$, $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+$ – зависящие от времени операторы уничтожения и рождения фотонов в фотонной моде, $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$ – единичный вектор поляризации напряженности электрической компоненты электромагнитного излучения (которое в дальнейшем будем предполагать лазерным), V – объем квантования. Оператор рассеяния для уравнения (5.1.4) равен:

$$\hat{S} = \exp \left(\frac{i}{c} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\mathbf{A}} \mathbf{j}(t) dt \right), \quad (5.1.5)$$

где

$$\hat{\mathbf{A}} = c \left(\frac{2\pi}{\omega V} \right) \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda} + \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda}^+ \right) \quad (5.1.6)$$

– вторично-квантованный векторный потенциал поля.

Следствием уравнений (5.1.2), (5.1.4) является следующее уравнение для полной вероятности n -фотонного процесса излучения/поглощения $W_\Sigma(n)$ в случае $n_{Las} \gg 1$ (n_{Las} – число заполнения фотонов в лазерной моде), включающее статический и поляризационный каналы:

$$W_\Sigma(n) = J_n^2 \left\{ 2 \left(n_{\mathbf{k}\lambda}^{Las} n_{\mathbf{k}\lambda}^{stat} \right)^{1/2} [1 + \delta] \right\}. \quad (5.1.7)$$

Здесь J_n – функция Бесселя порядка n , а

$$\delta = \frac{\omega^2 \alpha(\omega, \mathbf{F}_0)}{Z_i}, \quad (5.1.8)$$

– слагаемое, описывающее вклад поляризационного механизма излучения в амплитуду процесса. В формуле (5.1.7) $n_{\mathbf{k}\lambda}^{stat}$ – число заполнения фотонов, спонтанно излучаемых налетающей частицей в статическом поле иона в лазерную моду $\{\mathbf{k}, \lambda\}$ с волновым вектором \mathbf{k} и поляризацией в режиме статического однофотонного тормозного излучения. Выражение для $n_{\mathbf{k}\lambda}^{stat}$ в случае квазиклассического рассеивающегося электрона имеет вид

$$n_{\mathbf{k}\lambda}^{stat} = 2\pi \frac{|\omega(\mathbf{e}\mathbf{d}_{if})|^2}{V d\sigma_{scatt}/d\Omega_f}, \quad (5.1.9)$$

где \mathbf{d}_{if} – матричный элемент для излучающего дипольного момента налетающего электрона между состояниями $|i\rangle$ и $|f\rangle$, V – объем квантования,

$$\begin{aligned} |i\rangle &\equiv |\mathbf{p}_i\rangle = |E = p_i^2/2, \mathbf{n}_i \equiv \mathbf{p}_i/|\mathbf{p}_i\rangle\rangle, \\ |f\rangle &\equiv |E - \omega, \mathbf{n}_f \equiv \mathbf{p}_f/|\mathbf{p}_f\rangle\rangle, \end{aligned} \quad (5.1.10)$$

где $d\sigma_{scatt}/d\Omega_f$ – сечение упругого рассеяния налетающей частицы в поле иона из состояния $|i\rangle$ в состояние $|E, \mathbf{n}_f \equiv \mathbf{p}_f/|\mathbf{p}_f\rangle\rangle$. Заметим, что выражение (5.1.8) с учетом (5.1.3) преобразуется к виду

$$\delta = \left(\frac{\omega^2}{Z_i} \right) \frac{d_0^2 \operatorname{sign}(\omega - \omega_0)}{\Omega_R}. \quad (5.1.11)$$

Итак, формулы (5.1.7) – (5.1.11) дают представление для вероятности вынужденного многофотонного тормозного эффекта с учетом поляризационного канала в дипольном приближении по взаимодействию налетающей частицы с остовом мишени. В отсутствии поляризационного канала ($\delta = 0$) формула (5.1.7) обобщает результат Бункина и Федорова, справедливый для быстрых электронов, на случай произвольной скорости налетающей частицы. Если же $\delta = 1$, то, как это следует из формулы (5.1.7), вероятность процесса обращается в ноль из-за деструктивной интерференции статического и поляризационного каналов. Для отрицательных значений параметра δ интерференция каналов носит конструктивный характер, и полная вероятность

процесса превышает свое статическое значение. С учетом явного выражения для δ в резонансном случае (5.1.11) можно заключить, что деструктивная интерференция каналов имеет место в низкочастотном крыле линии $\omega < \omega_0$, а конструктивная интерференция – в высокочастотном крыле $\omega > \omega_0$.

Исходя из вышеприведенных формул, можно выписать условие преобладания поляризационного канала над статическим каналом в поле иона ($Z_i > 0$):

$$\Delta^2 + \frac{f_0}{\omega} F_0^2 < \left(\frac{f_0 \omega}{Z_i} \right)^2, \quad (5.1.12)$$

где f_0 – сила осциллятора резонансного перехода. Из (5.1.12) вытекает следующее выражение для насыщающего значения амплитуды внешнего поля:

$$F_{sat} = \sqrt{\frac{\omega}{f_0}} |\Delta|. \quad (5.1.13)$$

Для $F_0 > F_{sat}$ внешнее поле уменьшает амплитуду поляризационного канала. В противоположном пределе $F_0 < F_{sat}$ условие превосходства поляризационного канала (5.1.12) переписывается в виде

$$|\Delta| < \frac{f_0}{Z_i} \omega, \quad (5.1.14)$$

откуда следует, что доминирование поляризационного канала над статическим имеет место в весьма широком спектральном диапазоне, если только сила осциллятора резонансного перехода не слишком мала.

Формула для сечения вынужденного тормозного эффекта получается из (5.1.7) суммированием по статистическим весам конечного состояния налетающей частицы, что соответствует умножению вероятности w излучения на сечение $d\sigma_{Coul}$ кулоновского рассеяния электрона в поле мишени:

$$d\sigma_n = w(n) d\sigma_{Coul}. \quad (5.1.15)$$

На основании проведенного рассмотрения можно сделать вывод о существенности поляризационного канала в многофотонном тормозном эффекте, вызванном резонансным электромагнитным полем. Существует достаточно широкая область изменения параметров, в которой поляризационный канал доминирует над статическим каналом.

Кроме того, межканальная интерференция, характер которой определяется знаком частотной отстройки Δ , существенно влияет на вероятность процесса, если амплитуды каналов близки по величине. Здесь следует отметить, что использованное выше дипольное приближение по взаимодействию налетающей частицы с остовом мишени, передавая основные закономерности процесса, не улавливает более тонких эффектов, связанных с проникновением налетающей частицы в остов.

5.2. Резонансное усиление поля в атомах

Под действием сильного внешнего электромагнитного поля происходит возбуждение атомных электронов, которое может быть снято различными способами. Одним из них является радиационный канал, который приводит к явлениям рассеяния света и генерации гармоник. В многоэлектронных атомах существует и другой безрадиационный канал, в котором возбужденные внешним переменным полем валентные электроны атома передают энергию внутренним электронам остова за счет кулоновского взаимодействия. Многократное повторение такого обмена энергией может приводить к ионизации внутренних электронов в атомах и ионах.

С кантовомеханической точки зрения суть явления заключается в том, что при приближении к многофотонному резонансу вес соответствующей ему квазиэнергетической гармоники на частоте $k\omega$ резко увеличивается. Следуя этому, должны резко увеличиваться и поляризационные эффекты. Такой механизм резонансного усиления эффективного поля в атомах был предложен и качественно рассмотрен на основе теории возмущений в [3]. В то же время величина эффекта чувствительна к ширине резонанса, которая определяется как действием внешнего поля, так и релаксационными процессами в самой квантовой системе. Это требует более последовательного описания явления с использованием аппарата матрицы плотности [4].

Пусть для определенности осуществлен k -фотонный резонанс между состояниями $|n\rangle$ и $|m\rangle$. Тогда резонансный поляриза-

ционный потенциал будет иметь вид

$$V_{eff}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{\delta\rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (5.2.1)$$

где изменение электронной плотности $\delta\rho(\mathbf{r}, t)$ определяется временной эволюцией резонансной двухуровневой системы. Аналогично тому, как это делается при расчете среднего дипольного момента в резонансном приближении, получим, что

$$V_{eff}(\mathbf{r}, t) = a \exp(ik\omega t) \langle n | |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} | m \rangle + c.c., \quad (5.2.2)$$

где

$$a = - \frac{\omega_{mn} - \omega k - i\gamma_m/2}{(\omega - k\omega)^2 + 2 \left| x_{mn}^{(k)} E^k \right|^2 + \gamma_m^2}, \quad (5.2.3)$$

ω_{mn} – частота резонансного перехода, γ_m – ширина резонирующего уровня, $x_{mn}^{(k)}$ – k -фотонный дипольный матричный элемент.

При рассмотрении взаимодействия пространственно разделенных оболочек можно ограничиться дипольным членом разложения, и с помощью соотношений классической механики, справедливых для матричных элементов, будем иметь

$$r_{12}^{-1} \cong \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}{r_2^3} = \frac{\omega_{mn}^2}{Z} (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2). \quad (5.2.4)$$

Индекс 2 относится к электрону резонирующих состояний из внешней оболочки, Z – эффективный заряд остова. Подставляя (5.2.4) и (5.2.3) в (5.2.2), получим

$$V_{eff} = -2 \frac{(\mathbf{r} \mathbf{r}_{mn})(x_{mn}^{(k)} F^k) \omega_{mn}^2 [\omega_{mn} - \omega - (i_m \gamma/2)] e^{ik\omega t}}{z \left[(\omega_{mn} - \omega)^2 + 2 \left(x_{mn}^{(k)} F^k \right) + \gamma_m^2 \right]} + c.c. \quad (5.2.5)$$

Произведем оценку поляризационного потенциала в условиях точного однофотонного резонанса $\omega_{mn} - \omega = 0$, полагая $r_{mn} \sim 1$ и $z \sim 1$:

$$V_{eff} \sim \frac{i\gamma_m \mathbf{r} \mathbf{F} e^{i\omega t}}{2F^2 + \gamma_m^2} + c.c. \quad (5.2.6)$$

При малых напряженностях внешнего лазерного поля величина потенциала определяется спонтанной шириной резонирующего уровня и

$$V_{eff} \sim \frac{i\mathbf{r} \mathbf{F} e^{i\omega t}}{\gamma_m} + c.c. \quad (5.2.7)$$

Отметим, что если естественная ширина уровня $\gamma_m \sim 10^{-7}$ а.е., то в реальных ситуациях она бывает многократно увеличена доплеровским и ионизационным уширением, а также шириной линии лазерного излучения. Для обеспечения необходимых условий экспериментальное наблюдение должно проводиться в хорошо коллимированном атомном пучке с поперечным к атомному пучку направлением распространения действующего лазерного излучения. Поскольку при этом $\gamma_m \ll 1$, то произойдет увеличение эффективной напряженности поля, действующей на электрон, по отношению к напряженности внешнего поля.

Если воспользоваться концепцией эффективного поля в высших порядках теории возмущений, можно получить выражение для амплитуды вероятности перехода, совпадающей с формулой Келдыша [5]. Тогда для оценки вероятности ионизации внутренних электронов эффективным полем получается выражение [6]

$$w \approx A\omega (I_0/\omega)^{3/2} \exp[2 \langle I_0/\omega + 1 \rangle - I_0/\omega] \cdot (1/2\bar{\gamma})^{2(I_0/\omega+1)}, \quad (5.2.8)$$

где A – численный фактор порядка единицы; $\langle x \rangle$ означает целую часть величины x , а параметр

$$\bar{\gamma} = \frac{2(2I_0)^{1/2}}{\omega x_{mn} r_0 T / [1 + (r_0 T)^2]} \quad (5.2.9)$$

аналогичен параметру адиабатичности Келдыша. Здесь величина $r_0 = x_{mn} F$, а время поперечной релаксации T принято равным времени продольной релаксации.

В работе [6] проведены конкретные оценки усиления поля для атома калия. Рассмотрен резонансный переход $5P_{1/2} \rightarrow 4S_{1/2}$ с энергией 3.07 эВ. Естественная ширина уровня $5P_{1/2}$ составляет $\gamma_s = 1.1 \cdot 10^{-7}$ эВ и становится порядка полевой уже при напряженности поля лазерного излучения $F = 17$ В/см. При малых углах расходимости пучка $\theta = d/2l$ (d – диаметр канала, l – его длина) поперечная температура атомов T_{\perp} связана с продольной $T_{\parallel} \approx T$ соотношением $T_{\perp} \approx T\theta^2$. При $T = 10^3$ К, $l = 1$ м и $d = 1$ см доплеровская ширина составит $\gamma_D \approx 5 \cdot 10^{-8}$ эВ, и, таким образом, не приведет к подавлению эффекта резонансного усиления поля. В этих условиях вероятность прямой шестифотонной ионизации из верхнего $4S$ состояния сравнивается с вероятностью вырывания внутреннего $3p$ электрона: $w(3p) \cong w(4s) \cong 20$

с^{-1} . Из полученных оценок следует, что скорость выхода ионов K^+ под действием лазерной волны с напряженностью электрического поля $F = 17 \text{ В/см}$ достигает значения $10^{11} \text{ ион/см}^3 \cdot \text{с}$ (при плотности пучка 10^{10} см^{-3}). Оценки сделаны в пренебрежении взаимодействием электрона в непрерывном спектре с дыркой во внутренней оболочке ионного остатка, которое приводит к увеличению вероятности ионизации в единицу времени. С увеличением напряженности поля вероятность ионизации электрона из внутренней оболочки за счет резонансного усиления поля будет падать из-за роста ширины уровня, в то время как вероятность ионизации валентного электрона монотонно возрастает с увеличением F .

5.3. Управляемый коллапс волновых функций

Атомные состояния электронов d и f с большим орбитальным моментом оказываются весьма чувствительными к относительно небольшим изменениям потенциала. Особенно ярко это проявляется при изменении атомного номера, степени ионизации или многоэлектронного состояния атома. Это явление получило название коллапса волновой функции электрона или просто коллапса электрона [7]. Коллапс может быть причиной различных аномалий в рентгеновских и электронных спектрах. Впервые внимание на это явление было обращено Э. Ферми [8] в рамках использования статистического потенциала Томаса–Ферми.

В приближении самосогласованного поля электрон движется в суммарном потенциале ядра и других электронов. Кроме того при определении радиальной составляющей волновой функции следует учитывать положительную орбитальную центробежную энергию электрона, и эффективный потенциал имеет вид

$$V_{nl}^{eff} = V_{ne}(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2}. \quad (5.3.1)$$

Второе слагаемое быстро возрастает с увеличением l и для $l \geq 2$ становится больше V_{nl} не только при малых r , но во многих ато-

мах и на расстояния порядка (0,5–5) а.е., где притяжение ядра быстро уменьшается из-за экранировки его электронами.

В результате эффективный потенциал принимает вид двух потенциальных ям, отделенных положительным потенциальным барьером (рис. 5.1). В случаях возбужденного электрона потенциал V_{nl}^{eff} слабо зависит от n , поэтому его можно считать одинаковым для всей серии Ридберга. Внутренняя яма содержит лишь несколько уровней, а для некоторых атомов – ни одного. В последнем случае все максимумы радиальной волновой функции с данным l локализованы вдали от ядра в области внешней ямы, которая имеет водородоподобный характер. При возрастании заряда ядра или эффективного заряда иона внутренняя яма углубляется и расширяется. Когда в ней появляется дискретный уровень энергии, и он становится ниже основного уровня энергии во внешней яме, радиальная волновая функция коллапсирует, т. е. основной максимум функции первого состояния перемещается в область внутренней ямы. Далее коллапсируют и следующие состояния. Столь резкое изменение волновых функций в ряде атомов (в первую очередь группы лантаноидов и актиноидов) проявляется в особенностях рентгеновских спектров этих атомов, а также в явлениях промежуточной валентности в твердом теле.

В работе Кеннерейда [9] была показана возможность контролируемого коллапса волновой функции в сложном атоме. Его идея основана на возможной чувствительности волновой функции к форме потенциала при наличии в нем двух ям. Это позволяет предложить схему управления коллапсом d или f электрона за счет возбуждения валентного электрона. В качестве примера Кеннерейдом рассмотрен коллапс 4f волновой функции в $4d^9 4fns$ Cs при возбуждении ns электрона. Предлагаемые им в этой работе схемы экспериментального наблюдения контролируемого коллапса предполагают использование относительно маломощных источников как когерентного, так и некогерентного излучения. В то же время возбуждение внешнего электрона можно осуществить и при помощи резонансно настроенного сильного лазерного излучения. Резонанс в общем случае может быть многофотонным. При этом, как известно, волновая функция будет осциллировать с частотой Раби.

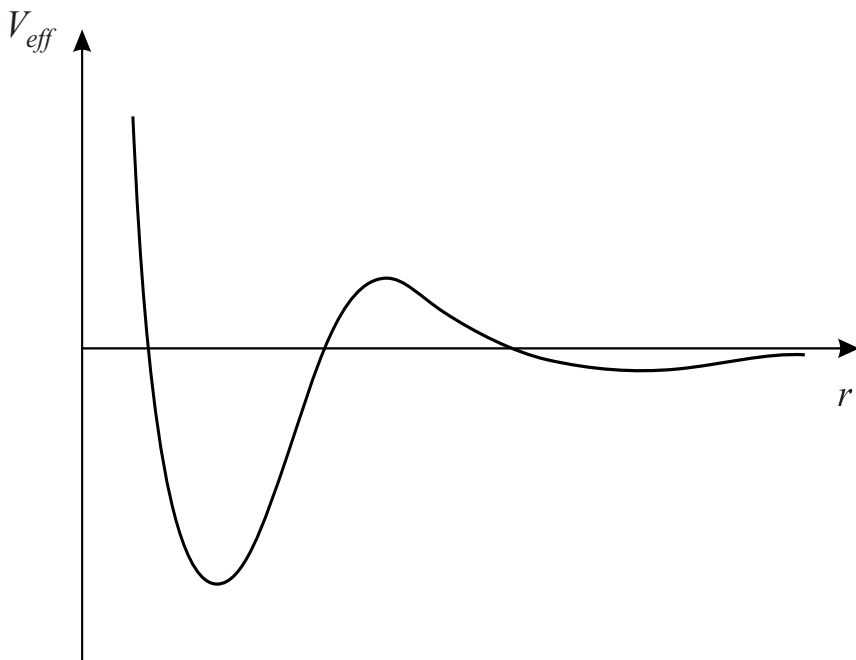


Рис. 5.1. Эффективный потенциал в виде двух потенциальных ям, отделенных потенциальным барьером

Основная идея контролируемого лазерным излучением коллапса волновых функций [10] основана на использовании того факта, что энергии оптических переходов, индуцируемых лазерным излучением, намного меньше энергий коллапсирующих состояний и энергий более глубоких внутренних состояний в сложном атоме. Именно на этом основана возможность самого построения потенциала для коллапсирующего электрона при заданном состоянии валентного электрона. Таким образом, имеет место адиабатическое разделение движений электрона. Изменения в электронных плотностях внешних электронов являются адиабатически медленными по отношению к внутренним. При точном резонансе волновая функция системы, зависящая от времени, может быть записана в виде

$$\psi = \psi_1 \Phi_1 + \psi_2 \Phi_2 \exp(-i\varepsilon t), \quad (5.3.2)$$

где $\psi_1(\xi_{int}, \xi_{ext})$ – волновая функция нижнего стационарного состояния, $\psi_2(\xi_{int}, \xi_{ext})$ – волновая функция верхнего стационарного состояния, ε – энергия верхнего состояния ($\varepsilon_1 = 0$), ξ_{int} – координата внутреннего электрона, ξ_{ext} – координата оптического электрона,

$$\psi_1 = \cos \left(\int_0^t V^{(k)}(t) dt \right), \quad (5.3.3)$$

$$\psi_2 = \sin \left(\int_0^t V^{(k)}(t) dt \right),$$

где $V^{(k)}(t)$ – плавно меняющийся со временем k – фотонный матричный элемент, связывающий нижнее и верхнее состояние.

Определим, как будет вести себя при этом плотность коллапсирующей волновой функции. Интегрируя по координатам внешнего электрона, получим

$$\rho(\xi_{int}) = [|\psi_1|^2 R_1^2(r) + |\psi_2|^2 R_2^2(r)] |Y_{lm}|^2, \quad (5.3.4)$$

где $R_1(r)$ – радиальная волновая функция внутреннего электрона при нижнем состоянии валентного электрона, $R_2(r)$ – радиальная волновая функция внутреннего электрона при возбужденном внешнем электроном, Y_{lm} – сферическая функция. Если $V^{(k)}(t) = \text{const}$, то $\psi_1 = \cos(V^{(k)}t)$, $\psi_2 = \sin(V^{(k)}t)$ и

$$\rho(\xi_{int}) = [\cos^2(V^{(k)}t) R_1^2(r) + \sin^2(V^{(k)}t) R_2^2(r)] |Y_{lm}|^2. \quad (5.3.5)$$

Осцилляции с частотой Раби электронной плотности (5.3.5) могут быть обнаружены, например, по осцилляциям в глубоком рассеянии электронов на атоме, поскольку для форм-факторов упругого рассеяния будем иметь

$$F_m(\mathbf{q}) = \cos^2(V^{(k)}t) F_{1m}(\mathbf{q}) + \sin^2(V^{(k)}t) F_{2m}(\mathbf{q}). \quad (5.3.6)$$

Динамический коллапс с частотой Раби можно наблюдать и по упругому рассеянию рентгеновского излучения с достаточно высокой частотой, когда дипольное приближение для коллапсирующего электрона уже не применимо.

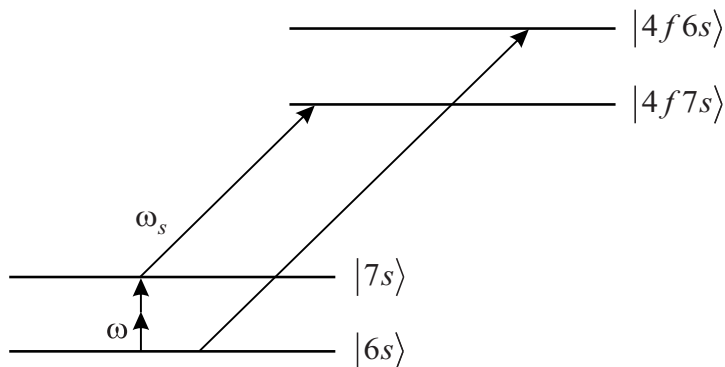


Рис. 5.2. Схема перемешиваемых уровней и уровней, поглощающих рентгеновское излучение.

Другим способом наблюдения управляемого коллапса является измерение поглощения мягкого рентгеновского излучения с энергией фотонов ~ 80 эВ. Частота излучения ω_s должна перестраиваться вблизи частоты возбуждения $4f$ при переходе электрона из внутренней заполненной $4d$ – оболочки. Источником излучения может служить синхротрон или лазерная плазма. При этом в облучаемых парах атомов Cs предварительно обеспечивается резонансное перемешивание состояний валентных электронов полем линейно поляризованного лазерного излучения с частотой ω . Схема эксперимента показана на рис. 5.2 для случая двухфотонного резонанса состояний $6s$ – $7s$ при поглощении рентгеновского излучения с переходом в состояния $Cs4fns$.

Исходное по отношению к слабому рентгеновскому излучению состояние $\psi(t)$ является суперпозицией (5.3.2) состояний $6s$ и $7s$. Определим частоту Раби для двухфотонного резонанса $6s$ – $7s$ в Cs. Исходя из водородоподобного приближения, нетрудно получить следующую оценку:

$$V^{(2)} = (1.2/(3\varepsilon/16)^3)^{1/2} F_0^2, \quad (5.3.7)$$

где разность энергий ε верхнего и нижнего резонирующих состояний определялась нами из расчетов методом локальной электронной плотности [11], F_0 – напряженность электрического поля лазерного излучения. При точном двухфотонном резонансе на частоте $\omega = 9264.705 \text{ см}^{-1}$ и напряженности лазерного поля $F_0 = 5 \cdot 10^6 \text{ В/см}$

частота Раби $\Omega = 120.26 \text{ см}^{-1}$. Спонтанным уширением можно пренебречь. Матричные элементы перехода из состояния ψ в состояния $4f6s$ и $4f7s$ соответственно имеют вид:

$$A_6 = \frac{1}{2} < 4f6s | \mathbf{de} | 4d6s > , \quad (5.3.8)$$



$$A_7 = \frac{1}{2} < 4f7s | \mathbf{de} | 4d7s > ,$$

где \mathbf{d} – дипольный момент атома, \mathbf{e} – вектор поляризации рентгеновского излучения.

Расчет вероятности поглощения w , отнесенной к спектральной интенсивности N_ω падающего неполяризованного рентгеновского излучения приводит к значениям $w_6/N_\omega = 1.7 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2/\text{с}$, $w_7/N_\omega = 1.1 \cdot 10^{-2} \text{ см}^2/\text{с}$. Значение для линейной или циркулярной поляризации рентгеновского излучения получаются умножением на $1/3$. Как видно, поглощение на частоте перехода ω_s значительно больше, чем на частоте ω'_s . Это связано с коллапсом волновой функции $4f$ при переходе валентного электрона $6s$ в возбужденное состояние $7s$. В результате этого перекрытие волновых функций $4d$ и $4f$ увеличивается и растет вероятность перехода.

Путем перестройки лазерного излучения по интенсивности и частоте можно изменять соотношение между амплитудами и расстройками и менять долю примеси возбужденного состояния в ψ . Одновременно также меняются квазиэнергии. Тем самым изменится величина поглощения и резонансные частоты. Описанный метод наблюдения позволяет проследить искажение волновых функций d и f электронов при плавном изменении формы потенциала этих электронов в атоме и экспериментально определить условия их коллапса.

5. 4. Интерференционные эффекты в тормозном излучении с учетом проникновения налетающей частицы в остов мишени

В настоящем разделе анализируются интерференционно-поляризационные эффекты в вынужденном тормозном излучении при рассеянии электронов на ионах в резонансном электромагнитном поле с учетом влияния проникновения налетающей частицы в остов мишени на сечение процесса [12, 13]. Это проникновение обуславливает ряд новых интересных особенностей вынужденного тормозного излучения, которые отсутствуют при описании данного явления в рамках дипольного приближения.

Вычислим сечение вынужденного тормозного излучения сначала в квазиклассическом приближении по движению налетающего электрона, что адекватно физике процесса в большинстве плазменных приложений, когда борновский параметр больше или порядка единицы. Спектральная амплитуда вынужденного тормозного излучения для угла рассеяния налетающей частицы ϑ (или эксцентриситета орбиты $\varepsilon = \sin^{-1}(\vartheta/2)$) представляет собой сумму двух слагаемых. Одно из них пропорционально фурье-образу дипольного момента налетающей частицы $\mathbf{D}^{st}(\omega, \varepsilon)$, вызывающего излучение/поглощение по статическому каналу. Другое слагаемое пропорционально фурье-образу дипольного момента, наведенного налетающей частицы в ионном остова $\mathbf{D}^{pol}(\omega, \varepsilon)$, который обуславливает вынужденное тормозное излучение по поляризационному каналу. Далее, так же как в разделе 5.1, будем рассматривать вынужденное тормозное излучение на частоте внешнего излучения ω , близкой к собственной частоте ω_0 перехода в электронном остова иона типа $ns \rightarrow n'p$. При этом предполагается, что частотная отстройка $\Delta = \omega - \omega_0$ превышает ширину линии перехода, так что реальным возбуждением ионного остова можно пренебречь. Формула для сечения вынужденного тормозного излучения с учетом статического и поляризационного каналов имеет вид

$$d\sigma^{tot}(\omega, \varepsilon) = \frac{2\pi}{3} \frac{Z_i^2}{v^4} |\mathbf{F}_0 \mathbf{D}^{tot}(\omega, \varepsilon)|^2 \varepsilon d\varepsilon, \quad (5.4.1)$$

где полный дипольный момент системы сталкивающихся частиц \mathbf{D}^{tot} равен сумме статического и поляризационного вкладов

$$\mathbf{D}^{tot}(\omega, \varepsilon) = \mathbf{D}^{st}(\omega, \varepsilon) + \mathbf{D}^{pol}(\omega, \varepsilon). \quad (5.4.2)$$

Декартова проекция дипольного момента, наведенного в остове мишени (поляризационного слагаемого), дается равенствами:

$$\begin{aligned} D_j^{pol}(\omega, \varepsilon) &= \frac{1}{6\pi\Omega_R} \langle n_i, l=0 \| d \| n, l=1 \rangle \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \frac{R_j(t, \varepsilon)}{R(t, \varepsilon)} \langle |n, l=1 \rangle a_1(r_{core}, R(t, \varepsilon)) \| n_i, l=0 \rangle, \\ a_1(r, R) &= \theta(R-r) \frac{r}{R^2} + \theta(r-R) \frac{R}{r^2}, \end{aligned} \quad (5.4.3)$$

где $R_j(t, \varepsilon)$ – j -я проекция радиус-вектора налетающей частицы для данного эксцентриситета орбиты как функция времени, r_{core} – модуль радиус-вектора электронов остова мишени. При получении формулы (5.4.3) произведено суммирование по магнитным квантовым числам и интегрирование по угловым переменным ионного остова, а также разложение обратного расстояния между налетающей частицей и остовом по шаровым функциям. Это привело к появлению приведенных матричных элементов дипольного момента резонансного перехода d и модуля обратного расстояния между налетающей частицей и электронами остова $a_1(r_{core}, R)$.

Отметим, что операция взятия фурье-образа в вышеприведенных формулах в рамках используемого полуклассического приближения эквивалентна вычислению матричного элемента от соответствующего оператора в последовательном квантово-механическом подходе. Описанная процедура есть выражение принципа соответствия для матричного элемента произвольного неупругого процесса, вычисленного между волновыми функциями непрерывного спектра налетающей частицы, для многоквантового случая.

В дипольном приближении по взаимодействию налетающей частицы с остовом иона формула (5.4.3) сводится к виду

$$D_j^{pol, dip}(\omega, \varepsilon) = \frac{1}{3} \frac{\langle n_i, l=0 \| d \| n, l=1 \rangle}{\Omega} \frac{\omega^2}{Z_i} R_j(\omega, \varepsilon). \quad (5.4.5)$$

Выражение (5. 4.5) может быть получено из (5. 4.3) в пределе нулевого радиуса ионного остова с использованием формулы

$$\frac{-\omega^2 R_j(\omega, \varepsilon)}{Z_i} = \left(\frac{R_j(t, \varepsilon)}{R^3(t, \varepsilon)} \right)_{\omega}, \quad (5. 4.6)$$

вытекающей из уравнения движения налетающей частицы в поле точечного иона. Из формулы (5. 4.5) следует важный вывод о том, что временной фурье-образ дипольного момента, наведенного полем налетающей частицы в ионном остове пропорционален фурье-образу дипольного момента, создаваемого рассеивающейся частицей.

Выражение для интегрального по углу рассеяния налетающей частицы сечения вынужденного тормозного излучения эквивалентно интегрированию по эксцентриситету орбиты ε и имеет вид

$$d\sigma^{tot}(\omega, \alpha) = \frac{2\pi}{3} \frac{Z_i^2}{v^4} \mathbf{F}_0^2 \int_1^{\infty} \left[|D_x^{tot}(\omega, \varepsilon)|^2 f_x(\alpha, \varepsilon) + \right. \\ \left. + |D_y^{tot}(\omega, \varepsilon)|^2 f_y(\alpha, \varepsilon) \right] \varepsilon^{-1} d\varepsilon, \quad (5. 4.7)$$

$$f_x(\alpha, \varepsilon) = \cos^2 \alpha + \frac{\varepsilon^2 - 1}{2} \sin^2 \alpha;$$

$$f_y(\alpha, \varepsilon) = (\varepsilon^2 - 1) \cos^2 \alpha + \frac{1}{2} \sin^2 \alpha.$$

В этой формуле x , y есть оси фокальной системы координат, задаваемой вектором начальной скорости налетающей частицы, α – угол между вектором начальной скорости налетающей частицы и вектором электрического поля внешнего излучения. При выводе выражения (5. 4.7) из формулы (5. 4.1) было произведено интегрирование по азимутальному углу рассеяния.

Имея в виду расчет вынужденного тормозного излучения для литиеподобных ионов, используем кулоновское приближение для тока налетающей частицы, в котором траектория движения налетающей частицы задается известными классическими выражениями [14] движения заряженной частицы в кулоновом поле притяжения с эффективным зарядом, равным $Z_{eff} = Z_i + 1/2$. Расчет зависимостей фокальных компонент наведенного дипольного момента ионного остова от эксцентриситета орбиты налетающей частицы – $D_{x,y}(\varepsilon)$ показывает,

что для переходов связанных электронов иона без изменения главного квантового числа y -проекция дипольного момента близка к своему дипольному аналогу. В то же время x -проекция дипольного момента для эксцентриситетов, достаточно близких к 1, сильно отличается от вычисленной в дипольном приближении. В частности, для некоторого эксцентриситета орбиты налетающей частицы она обращается в нуль и вблизи $\varepsilon = 1$ меняет знак. Указанное различие лежит в основе зависимости поляризационно-индуцированных эффектов в вынужденного тормозного излучения от угла между вектором начальной скорости налетающей частицы и вектором напряженности электрического поля в электромагнитной волне.

Физическая причина особенностей поведения функций $D_x(\varepsilon)$ и $D_y(\varepsilon)$ заключается в разном влиянии эффекта проникновения налетающей частицы в ионный остов на проекции фурье-образа наведенного дипольного момента в фокальной системе координат. Проникновение сильнее влияет на x -компоненту дипольного момента, чем на y -компоненту, поскольку именно x -компонента радиус-вектора налетающей частицы в процессе движения налетающей частицы от точки минимального сближения с центром поля до бесконечности меняет свой знак, в то время как y -компонента остается знакопостоянной на данном участке траектории.

Спектральные зависимости нормированного на статическое значение сечения вынужденного тормозного излучения вблизи собственной частоты перехода без изменения главного квантового числа в ионном остове для двух значений угла α (между вектором начальной скорости налетающей частицы и вектором напряженности электрического поля во внешнем излучении) показаны на рис. 5.3 для начальной скорости налетающей частицы $v=0.6$ а.е. .

Из зависимостей, представленных на данном рисунке, следует, что интерференционные эффекты проявляются наиболее резко для угла $\alpha = \pi/2$, в то время как для $\alpha = 0$ они существенно редуцированы. Отличие наиболее велико в области деструктивной интерференции статического и поляризационного каналов ($\omega < \omega_0$), где расчеты в дипольном приближении по взаимодействию налетающей частицы с остовом показали наличие глубокого минимума, обусловленного взаимной компенсацией поляризационного и статического слагаемых в амплитуде

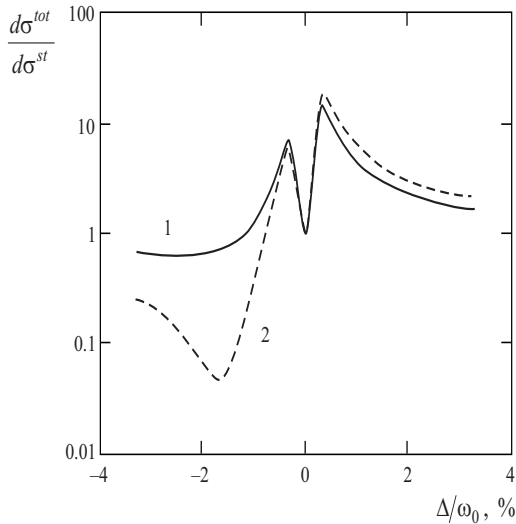


Рис. 5.3. Спектральные зависимости ($\Delta = \omega - \omega_0$) нормированного на статическое значение сечения вынужденного тормозного излучения квазиклассического электрона на ионе N^{4+} для двух значений угла α между вектором начальной скорости налетающей частицы ($v=0.6$ а.е.) и вектором напряженности электрического поля внешнего излучения ($F_0 = 10^{-3}$ а.е.): кривая 1 – $\alpha=0$, кривая 2 – $\alpha = \pi/2$ для частоты внешнего поля вблизи собственной частоты околорезонансного перехода в ионном остове без изменения главного квантового числа (2s-2p)

процесса. В области конструктивной интерференции ($\omega > \omega_0$) отличие в спектральной зависимости сечений для двух значений угла α невелико.

Объяснение зависимостей рис. 5.3 заключается в том, что, как это следует из второго равенства (5.4.7), угол α «управляет» относительным вкладом различных компонент излучающего дипольного момента. В случае если основной вклад в излучение дает D_x , сильное влияние недипольности взаимодействия налетающей частицы с ионным остовом приводит к тому, что взаимная компенсация амплитуд статического и поляризационного каналов (в области их деструктивной интерференции $\omega < \omega_0$) имеет место только для достаточно больших значений эксцентриситета орбиты налетающей частицы. В случае

малых эксцентриситетов указанная компенсация уже не имеет места. Более того начиная с некоторого ε_0 функция $D_x(\varepsilon)$ меняет знак, и интерференция статического и поляризационного каналов приобретает конструктивный характер. В результате интерференционный «провал» в интегральном по эксцентриситету орбиты налетающей частицы сечении вынужденного тормозного излучения «замазывается», что хорошо видно на рис. 5.3. В высокочастотном крыле спектральной линии $\omega > \omega_0$ ситуация обратная: большая «проявленность» интерференции каналов приводит к большему значению сечения вынужденного тормозного излучения для угла $\alpha = \pi/2$, по сравнению со значением $\alpha = 0$. Однако относительная роль интерференционного слагаемого здесь мала, поскольку велико полное сечение процесса. В низкочастотном крыле спектральной линии, где полное сечение мало, напротив, роль интерференции весьма существенна, и рассматриваемая зависимость сечения от поляризации внешнего излучения проявляется наиболее ярко.

Аналогичные спектральные зависимости были получены для перехода с изменением главного квантового числа 2s–3p. В этой ситуации отличие сечений в области деструктивной интерференции не столь велико, как для перехода с $\Delta n = 0$, что объясняется большим влиянием недипольности на величину y -компоненты наведенного в ионном остове дипольного момента, обусловленным большим радиусом 3p-состояния по сравнению с 2p-состоянием.

На рис. 5.4 приведена амплитудная зависимость (от величины F_0) отношения полного, (включая поляризационное слагаемое в амплитуде), сечения вынужденного тормозного излучения к своему статическому аналогу для двух значений угла α ($\alpha = 0$ — кривая 1, $\alpha = \pi/2$ — кривая 2) в области деструктивной интерференции каналов ($\omega < \omega_0$). Видно, что в первом случае интерференционные эффекты малы: они проявляются в том, что с увеличением напряженности электрического поля сечение процесса стремится к величине, несколько меньшей статического значения, вследствие деструктивной интерференции, сильно подавленной недипольностью взаимодействия налетающей частицы с ионным остовом.

Для $\alpha = \pi/2$ налицо сильный интерференционный эффект: амплитудная зависимость сечения вынужденного тормозного излучения

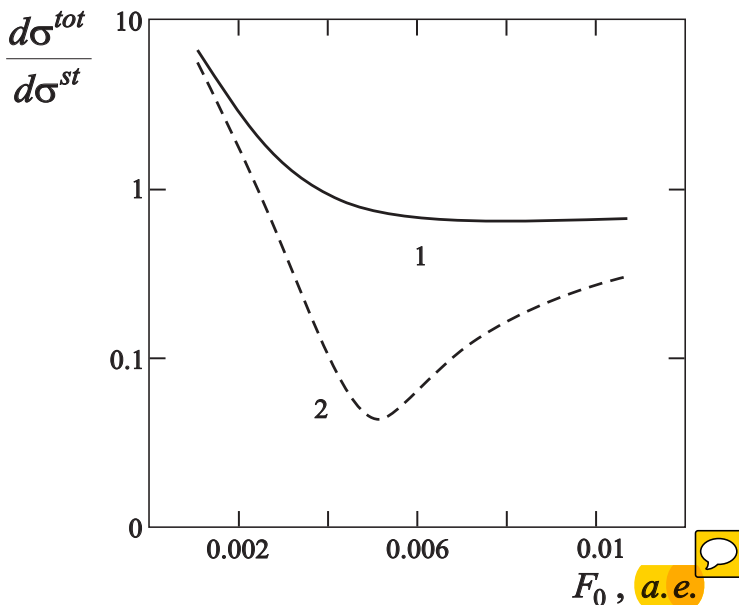


Рис. 5.4. Зависимости нормированного на статическое значение сечения вынужденного тормозного излучения от напряженности электрического поля во внешнем излучении для двух значений угла α : кривая 1 – $\alpha = 0$, кривая 2 – $\alpha = \pi/2$, для отрицательной отстройки от резонанса $(\omega - \omega_0)/\omega_0 = -0.3 \%$ вблизи собственной частоты перехода $2s-2p$ в ионе N^{4+} для скорости налетающей частицы $v_0 = 0.6$ а.е.

имеет широкий провал, вызванный взаимной компенсацией статического и поляризационного слагаемых в сечении процесса, характерный для рассмотрения в рамках дипольного приближения по взаимодействию налетающей частицы с ионным остовом. Причина сохранения «дипольных черт» в амплитудной зависимости сечения та же, что и в спектральной зависимости: для угла $\alpha = \pi/2$ основной вклад в излучение дает y -компонента наведенного дипольного момента, слабо подверженная влиянию недипольности для переходов без изменения главного квантового числа.

Рассчитаем теперь сечение вынужденного тормозного излучения, дифференциальное по углу рассеяния электрона, при квантовом описании движения налетающей частицы. Исходная формула для сечения

неупругого рассеяния электрона из состояния с начальным импульсом \mathbf{p}_i в состояние с конечным импульсом \mathbf{p}_f в телесный угол $d\Omega_f$ на ионе под воздействием внешнего поля амплитуды \mathbf{F}_0 и частоты ω может быть представлена в виде (пользуемся атомными единицами)

$$d\sigma(\mathbf{p}_f) = \frac{1}{16\pi^2} |(M_{fi})|^2 \frac{p_f}{p_i} d\Omega_f, \quad (5.4.8)$$

где

$$M_{fi}(\omega) = \langle \mathbf{p}_f | \frac{\mathbf{r}}{r} (V_{st}(r) + V_{pol}(r, \omega, E_0)) | \mathbf{p}_i \rangle \frac{\mathbf{F}_0}{\omega^2} \quad (5.4.9)$$

– матричный элемент от оператора возмущения движения налетающей частицы в статическом поле мишени и в поле наведенного дипольного момента мишени. Здесь $|\mathbf{p}_{if}\rangle$ – волновые функции налетающей частицы в центральном поле иона, нормированные на единичный поток на бесконечности, $p_f = \sqrt{p_i^2 \pm 2\omega}$ – модуль конечного импульса налетающей частицы, знак плюс относится к поглощению, минус, – к излучению фотона в результате неупругого рассеяния.

Выражение (5.4.9) получено в пренебрежении обменными эффектами. Функция $V_{st}(r)$ представляет собой модуль напряженности статического поля иона-мишени в месте расположения налетающей частицы, а $V_{pol}(r, \omega, E_0)$ связана с динамической поляризацией электронной оболочки иона на частоте внешнего поля ω и для рассматриваемого здесь резонансного случая ($|\omega - \omega_0| \ll \omega_0$) имеет вид

$$V_{pol}(r, \omega, F_0) = \text{sign}(\Delta) \frac{d_0}{3} \frac{\omega^2}{\sqrt{\Delta^2 + (d_0 F_0)^2}} V_{ns, n'p}(r), \quad (5.4.10)$$

где $d_0 = \langle ns \| d \| n'p \rangle$ – приведенный матричный элемент дипольного момента перехода, $V_{ns, n'p}(r)$ – приведенный матричный элемент потенциала взаимодействия налетающей частицы с резонансным переходом $ns \rightarrow n'p$ в ионном остове, равный

$$V_{nsn'p}(r) = \langle ns \| \theta(r - r_b) r_b / r^2 + \theta(r_b - r) r / r_b^2 \| n'p \rangle, \quad (5.4.11)$$

где \mathbf{r}_b – радиус-вектор связанного электрона иона, $\theta(x)$ – функция Хэвисайда. Всюду рассматривается основное s -состояние ионного остова.

Волновые функции налетающей частицы можно рассчитать в приближении заданного квантового тока налетающей частицы путем разложения по квантовому числу l орбитального момента. Внешнее электромагнитное поле предполагается достаточно слабым, так что волновые функции непрерывного спектра рассеиваемого электрона можно найти, решая соответствующее уравнение Шредингера в центральном поле иона-мишени. Расчет производится для литиеподобных ионов в основном состоянии и для частот внешнего излучения, окolorезонансных переходу без изменения главного квантового числа.

Радиальные волновые функции непрерывного спектра налетающей частицы нормировались в соответствии со своим асимптотическим видом

$$u(r \rightarrow \infty, l, p) \rightarrow \frac{2}{r} \sin \left(pr + \frac{Z_i}{p} \ln(2pr) - \frac{\pi}{2} l + \delta(l, p) \right). \quad (5.4.12)$$

Здесь $\delta(l, p) = \delta^C(l, p) + \Delta\delta(l, p)$ – полный сдвиг фаз, равный сумме кулоновского $\delta^C(l, p)$ и $\Delta\delta(l, p)$ – некулоновского сдвига фаз, последний рассчитывался по формуле

$$\begin{aligned} \sin(\Delta\delta(l, p)) = \\ = \frac{1}{2p} \int_0^\infty \left(\frac{Z_i}{r} - |V_{st}(r)| \right) u(r, l, p) u^{Coul}(r, l, p) r^2 dr, \end{aligned} \quad (5.4.13)$$

где $u^{Coul}(r, l, p)$ – решение радиального уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом.

В результате интегральные и дифференциальные сечения неупругого рассеяния представляются в виде суммы (по квантовому числу орбитального момента количества движения) слагаемых, содержащих радиальные матричные элементы от полного потенциала возмущения движения налетающей частицы ($V_{st}(r) + V_{pol}(r, \omega, F_0)$):

$$R_{l, l \pm 1} = \langle u(r, l, p_i) | V_{st}(r) + V_{pol}(r, \omega, F_0) | u(r, l \pm 1, p_f) \rangle. \quad (5.4.14)$$

После интегрирования по направлениям радиус-вектора налетающей частицы формулы (5.4.8), (5.4.9) дают

$$d\sigma(\Omega_f) = \frac{1}{16p_f p_i^3} \left(\frac{F_0}{\omega^2} \right)^2 \left| \sum_{l=0}^{\infty} S_l^{fi}(\Omega_f) \right|^2 d\Omega_f. \quad (5.4.15)$$

Для параллельной поляризации ($\mathbf{p}_i \parallel \mathbf{F}_0$) слагаемые S_l имеют вид

$$S_l^{fi,par}(\theta) = a_l \left[P_{l+1}(\cos\theta) R_{l,l+1} e^{i(\delta(l,p_i) + \delta(l+1,p_f))} - P_l(\cos\theta) R_{l+1,l} e^{i(\delta(l+1,p_i) + \delta(l,p_f))} \right], \quad (5.4.16)$$

где $P_l(\cos\theta)$ – полиномы Лежандра, θ – угол рассеяния налетающей частицы, $a_l = l + 1$.

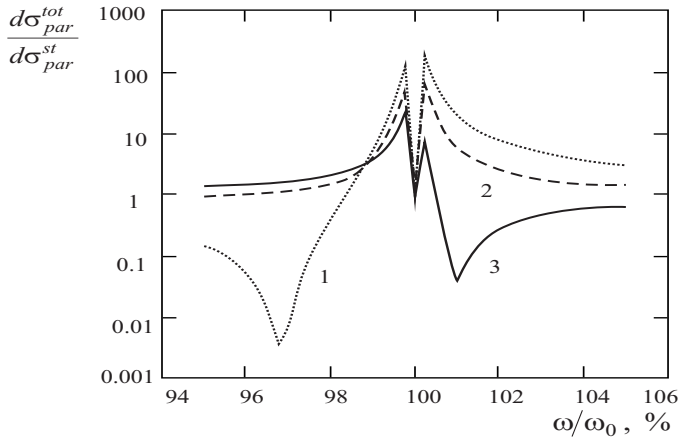
Аналогично, в случае перпендикулярной поляризации внешнего поля ($\mathbf{p}_i \perp \mathbf{F}_0$)

$$S_l^{fi,per} = e^{i\delta(l+1,p_f)} b_l [Y_{l+1,1} + Y_{l+1,-1}] \times \\ \times \left\{ e^{i\delta(l,p_i)} R_{l,l+1} + e^{i\delta(l+2,p_i)} R_{l+1,l} \right\}, \quad (5.4.17)$$

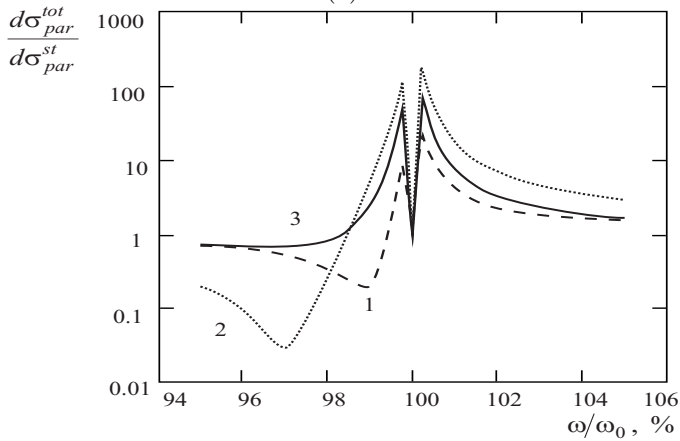
$b_l = \sqrt{\pi(l+1)/(l+2)2l+3}$, $Y_{nm}(\Omega_f)$ – сферические функции.

Результаты вычисления спектральных сечений, нормированных на статическое сечение и усредненных по возможным значениям полного спина сталкивающихся частиц, для различных углов неупругого рассеяния налетающей частицы и двух поляризаций внешнего поля представлены на рис. 5.5. Энергия налетающего электрона составляет 1 Ry, а напряженности внешнего поля $E_0 = 10^{-3}$ а.е., что соответствует окolorезонансному переходу 2s–2p ($\eta\omega_0 = 10$ эВ) в осто́ве иона N^{4+} .

Из результатов, приведенных на рис. 5.5 (а), видно, что учет недипольности взаимодействия налетающей частицы с излучающим переходом в ионном осто́ве для случая параллельной поляризации внешнего поля приводит к тому, что минимум в спектральном сечении процесса, обусловленный деструктивной интерференцией статического и поляризационного каналов, существенно зависит от угла рассеяния электрона. Для малых углов рассеяния налетающей частицы ($\theta < 90^\circ$) минимум приходится на отрицательные отстройки ($\omega < \omega_0$), а для



(a)



(б)

Рис. 5.5. Усредненные по спиновому состоянию системы сталкивающихся частиц спектральные сечения неупругого рассеяния (поглощение) электрона на ионе N^{4+} для различных углов рассеяния налетающей частицы: кривая 1 – $\theta = 57$ а.е., кривая 2 – 120 а.е., кривая 3 – 140 а.е., нормированные на соответствующие сечения статического канала.

Квантовый расчет: а – параллельная поляризация внешнего поля $\mathbf{p}_i \parallel \mathbf{F}_0$, б – перпендикулярная поляризация внешнего поля $\mathbf{p}_i \perp \mathbf{F}_0$

больших углов ($\theta > 140^\circ$) – на положительные ($\omega > \omega_0$). Существует также небольшой диапазон углов ($\theta \approx 120^\circ$), в котором интерференционный минимум отсутствует. Соответственно, происходит и «инверсия» асимметрии формы спектральной линии сечения процесса с ростом угла рассеяния налетающей частицы.

В случае перпендикулярной поляризации ($\mathbf{p}_i \perp \mathbf{F}_0$) интерференционный минимум для всех углов рассеяния налетающей частицы лежит в области отрицательных отстроек частоты внешнего поля от резонанса в ионном остоле (рис. 5.5 (б)), смещаясь к центру линии с увеличением угла рассеяния и исчезая при $\theta \approx 180^\circ$.

Рассмотренные особенности спектрального сечения, дифференциального по углу рассеяния налетающей частицы, связаны с зависимостью радиального матричного элемента недипольного поляризационного взаимодействия от квантового числа орбитального момента налетающей частицы. Указанный матричный элемент меняет знак при переходе от больших моментов к малым. Роль этих малых моментов особенно важна в случае параллельной поляризации внешнего поля, поскольку здесь увеличивается вклад участка орбиты налетающей частицы вблизи точки классического поворота. Напротив, для перпендикулярной поляризации возрастает роль больших расстояний налетающей частицы-ион (и, соответственно, больших орбитальных моментов), где ускорение налетающей частицы оказывается параллельным вектору напряженности внешнего поля. Таким образом, можно сделать вывод о том, что поляризационно-интерференционные эффекты в вынужденном тормозном излучении проявляются наиболее ярко в дифференциальном по углу рассеяния налетающей частицы сечении процесса.

Литература

1. *Astapenko V.A., Kukushkin A.B.* Interference of stimulated static and polarization bremsstrahlung in electron-ion collisions in a strong laser field: line shape symmetry and dips // *Laser Phys.* 1998. V. 8. P. 552–555.
2. *Astapenko V.A.* Polarization-induced resonances in the stimulated

- bremsstrahlung spectrum of quasi-classical electrons scattered by multiply charged ions // *Laser Phys.* 1998. V. 8. P. 1167–1173.
3. *Szöke A., Rhodes C.K.* Theoretical model of inner-shell excitation by outer-shell electrons // *Phys. Rev. Lett.* 1986. V. 56. P. 720–723.
 4. *Головинский П.А., Киян И.Ю.* Нелинейные процессы в отрицательных ионах // *УФН.* 1990. Т. 160. С. 97–140.
 5. *Келдыш Л.В.* Ионизация в поле сильной световой волны // *ЖЭТФ.* 1964. Т. 47. С. 1945–1957.
 6. *Зарецкий Д.Ф., Нерсесов Э.Ф.* Ионизация внутренних оболочек атома в процессе резонансного возбуждения валентного электрона // *ЖЭТФ.* 1991. Т. 100. С. 400–406.
 7. *Каразия Р.* Введение в теорию рентгеновских и электронных спектров свободных атомов. – Вильнюс: «Мокелас», 1987.
 8. *Fermi E.* Sulla deduzione Statistica di alcune properta dell'atomo. Applicazione alla teoria del sistema periodico degli elementi // *Rend Lincei.* 1928. V. 7. P. 342–346.
 9. *Connerade J.P.* Controlling the collaps of atomic wave functions // *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.* 1978. V. 11. L381–L384.
 10. *Golovinski P.A., Dolgopolov M.A., Rostovtsev V.S.* Laser-field controlled collapse of atomic wave functions // *Laser Phys.* 1993. V. 3. P. 487–488.
 11. Теория неоднородного электронного газа / Под ред. С. Лундквиста и Н. Марча: Перевод с англ. – М.: Мир, 1987.
 12. *Астапенко В.А.* Поляризационно-интерференционные эффекты в тормозном излучении квазиклассических электронов на ионах с остовом // *ЖЭТФ.* 1999. Т. 115. С. 1619–1629.
 13. *Astapenko V.A.* Inelastic scattering of electrons by ions with a core in a near-resonance external field // *Laser Phys.* 1999. V. 9. P. 1032–1038.
 14. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория поля. – М.: Физматлит, 2006.

Глава 6

Наблюдение МНОГОКВАНТОВЫХ и поляризационных явлений

6.1. Эффект Оже в лазерном поле

Взаимодействие интенсивного лазерного излучения с веществом приводит к образованию плазмы, в которой происходят разнообразные столкновения и радиационные процессы. В результате таких процессов, в частности, образуются вакансии во внутренних оболочках атомов. При этом полная энергия электронов становится положительной, а образовавшееся состояние является неустойчивым- метастабильным. Избыточная энергия такой системы может высвобождаться за счет радиационных переходов, при которых электроны из более высоких энергетических состояний переходят в незаполненные состояния с излучением фотона, или путем эффекта Оже. В эффекте Оже избыточная энергия электронов выделяется за счет вылета одного из электронов в континуум с одновременным переходом другого электрона оболоч-

ки в незаполненное низколежащее связанное состояние. Процесс Оже происходит за счет кулоновского взаимодействия обоих участвующих в нем электронов. В отсутствие внешнего лазерного излучения вылетающий в непрерывный спектр электрон имеет строго определенную энергию в соответствии с законом сохранения энергии. При воздействии поля лазерного излучения энергия электрона в непрерывном спектре будет модулироваться за счет излучения и поглощения фотонов внешнего переменного поля.

Экспериментально оже-эффект в интенсивном лазерном поле наблюдался в работе [1]. Начальное основное состояние аргона имеет электронную конфигурацию $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$. За счет облучения рентгеновским излучением с энергией фотонов в диапазоне от 255 эВ до 400 эВ создаются вакансии в $2p^6$ оболочке с образованием возбужденного иона $Ar^*(2p^5 3s^2 3p^6)$. Избыточная энергия при поглощении фотона забирается улетающим электроном. Образующееся вакантное состояние в коре иона заполняется с образованием двухзарядного иона в состоянии $(2p^6 3s^2 3p^4)$ и вылетом второго электрона с энергией около 200 эВ. Поскольку начальные состояния $^2P_{3/2}$, $^2P_{1/2}$ и конечные состояния 1S , 1D , $^3P_{0,1,2}$ ионов в оже-эффекте расщеплены по энергии, то оже-линии, то есть энергии вылетевших электронов, имеют структуру частично перекрывающихся пиков с четырьмя разрешаемыми компонентами в отсутствие поля.

Экспериментальная установка имеет следующие характеристики. Выходное импульсное излучение от титан-сапфирового задающего генератора растягивается до 400 пикосекунд и усиливается в две степени. После оптимальной компрессии получается импульс в 40 мДж длительностью 150 фс с основной частотой повторения 10 Гц и с распределением интенсивности близким к гауссову. Лазерный импульс разделяется на два пучка, один из которых направляется непосредственно на газовую мишень из атомов аргона, а второй используется для плазменной генерации рентгеновского излучения, ионизирующего атомы аргона с образованием вакансий в коре атома. В результате в спектре вылетевших электронов наблюдается структура множественных пиков, отстоящих друг от друга на величину энергии фотонов лазерного поля 1.55 эВ.

Таким образом в экспериментах по существу происходили два процесса в поле интенсивного лазерного излучения. Первый из них – фотоэффект с поглощением рентгеновского фотона и образованием вакансии в оболочке кора иона. Второй – оже-эффект в лазерном поле. Обычно в оже-процессе кинетическая энергия электрона в конечном состоянии имеет большую величину. В этом случае волновая функция электрона в конечном состоянии мало искажается полем остаточного иона. Такое же приближение не искаженных волн мы применим и для описания процесса ионизации рентгеновским излучением.

Начнем с рассмотрения ионизации рентгеновским излучением. Волновую функцию электрона с учетом действия лазерного поля в конечном состоянии можно взять в виде волковской функции

$$\psi_{\mathbf{p}}(r, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}) u_{\mathbf{p}}(t), \quad (6.1.1)$$

$$u_{\mathbf{p}}(t) = \exp\left(-i \int_0^1 \varepsilon_{\mathbf{p}}(\tau) d\tau\right), \quad \varepsilon_{\mathbf{p}}(\tau) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{p} + \frac{1}{c} \mathbf{A}(\tau)\right)^2,$$

где $\mathbf{A}(t)$ – вектор-потенциал поля, \mathbf{p} – импульс. Мы положим, что поле обладает линейной поляризацией, и $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 \cos(\omega t)$, $\mathbf{A}_0 = \mathbf{F}_0 c / \omega$, \mathbf{F}_0 – напряженность электрического поля волны, ω – частота поля, c – скорость света в вакууме.

Оператор, определяющий поглощение электромагнитной волны, нормированной на единицу объема, имеет вид [2]

$$\hat{V}_-(t) = \hat{V}_- e^{-i\Omega t}, \quad (6.1.2)$$

$$\hat{V}_- = B e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (-i\mathbf{e}\nabla) \hat{a}_{\mathbf{k}}, \quad B = \sqrt{\frac{2\pi}{\Omega}},$$

где $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ – оператор уничтожения фотона с волновым вектором \mathbf{k} , Ω – частота поглощаемых фотонов. Такая нормировка электромагнитного поля соответствует плотности потока фотонов, численно равной скорости света.

Амплитуда перехода в конечное состояние в первом порядке теории возмущений по оператору взаимодействия \hat{V}_- – имеет в дипольном приближении ($\mathbf{k} = 0$) вид

$$S_{fi} = \frac{B}{(2\pi)^{3/2}} \int \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r}) (-i\mathbf{e}\nabla) \varphi(\mathbf{r}) d^3r \times$$

$$\times \int_0^t u_{\mathbf{p}}^*(t') \exp(-i\Omega t' - i\varepsilon_i t') dt', \quad (6.1.3)$$

где ε_i – энергия в начальном состоянии со стационарной волновой функцией $\varphi(\mathbf{r})$. Мы считаем, что начальное состояние мало возмущается лазерным полем, так как является сильно связанным. Интегрируя в выражении для $u_{\mathbf{p}}$ по времени, получим периодическую функцию

$$u_{\mathbf{p}}(t) = \exp \left\{ i \left(\frac{\mathbf{p}\mathbf{F}}{\omega^2} \sin \omega t - U_p \left(t + \frac{\sin 2\omega t}{2\omega} \right) - \frac{p^2}{2} t \right) \right\}. \quad (6.1.4)$$

Величина $U_p = F^2/(4\omega^2)$ есть пондеромоторный потенциал, который определяет общий сдвиг континуума. Отметим, что пондеромоторный сдвиг порога при фотопроцессах наблюдается экспериментально и находится в согласии с теоретическим значением. Разложим выражение (6.1.4) в ряд Фурье

$$u_{\mathbf{p}}(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(u, v) \exp \left(-i \left(\frac{p^2}{2} + U_p + n\omega \right) t \right), \quad (6.1.5)$$

где

$$J_n(u, v) = \sum_{n=N+2N'} J_N(u) J_{N'}(v) \quad (6.1.6)$$

– обобщенная функция Бесселя целого аргумента [3], $u = \mathbf{p}\mathbf{F}_0/\omega^2$, $v = -U_p/(2\omega)$. Подставляя (6.1.5) в (6.1.3), проведя интегрирование по времени и воспользовавшись правилом Ферми для определения полной вероятности процесса в единицу времени, получим

$$w = \sum_{n=-\infty}^{\infty} w_n, \quad (6.1.7)$$

$$w_n = 2\pi B^2 \int d^3p \delta\left(\frac{p^2}{2} + U_p + n\omega - \Omega - \varepsilon_i\right) J_n^2(u, v) (\mathbf{e}\mathbf{p})^2 \varphi^2(\mathbf{r}).$$

Для сферически симметричной начальной функции $\varphi(\mathbf{p})$ (s-состояния) можно провести интегрирование как по модулю импульса вылетевшего электрона, так и по азимутальному углу. В результате

$$w_n = 2\pi^2 p^3 B^2 \kappa^2 \varphi^2(p_n) \int_{-1}^1 (\sin^2 \theta_0 + x^2 3 \cos 2\theta_0) J_n^2(u_n, v) dx, \quad (6.1.8)$$

где $p_n^2/2 = \varepsilon_i + \Omega - n\omega - U_p$, $u_n = p_n Fx/\omega^2$, $x = \cos \theta$, θ – угол интегрирования, θ_0 – угол между вектором поляризации поля лазерного излучения и вектором поляризации рентгеновского излучения, $n = \pm 1, \pm 2, \dots$. Для неполяризованного рентгеновского излучения все углы θ_0 равновероятны и по ним следует усреднить вероятность (6.1.8). Поскольку $J_n(-u, v) = (-1)^n J_n(u, v)$, то в итоге

$$W_n = 2\pi^2 p^3 B^2 \varphi^2(p_n) \int_0^1 J_n^2(u_n, v) dx. \quad (6.1.9)$$

В рассматриваемом нами диапазоне экспериментальных интенсивностей лазерного излучения $I \leq 10^{11}$ Вт/см² параметр $v \leq 10^{-2} \ll 1$, и все функции Бесселя от этого аргумента равны нулю, кроме функции с нулевым индексом. В силу этого $J_{N0}(v) = \delta_{N0}$, суммирование в формуле (6.1.6) снимается, и $J_n(u, 0) = J_n(u)$. В этом же диапазоне интенсивностей пренебрежимо мал пондеромоторный потенциал $U_p \sim 10^{-2}$ эВ. Многофотонные пики отстоят на $n\omega$ от линии без поля, а их относительная интенсивность при фотоионизации рентгеновским излучением в присутствии лазерного поля определяется модулирующим фактором

$$f_n(k) = \int_0^1 J_n^2(kx) dx, k = pF/\omega^2, \quad (6.1.10)$$

зависимость которого от k для $n = 0, \dots, 4$ показана на рис. 6.1. Из рисунка видно, что с ростом параметра k конкуренция между каналами с разным числом поглощенных и излученных фотонов усиливается. Воспользовавшись асимптотикой функции Бесселя при больших значениях индекса $J_n(y) \sim (2\pi n)^{-1/2} (ey/2n)^n$, получим асимптотическое поведение модулирующего фактора

$$f_n(k) \sim \frac{1}{2\pi(2n+1)} \left(\frac{ek}{2n} \right)^{n+1}. \quad (6.1.11)$$

В указанном на рисунке диапазоне значений k асимптотическая формула (6.1.11) воспроизводит численные результаты при $n \geq 4$.

Рассмотрим теперь оже-эффект, происходящий за счет не зависящего от времени взаимодействия электронов $W = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$. Ампли-

туду перехода, найденную по теории возмущений, запишем как

$$S_{fi} = \langle \mathbf{p}b | W | 0a \rangle \int_0^t \exp \left(i \int_{-\infty}^{t'} \varepsilon_{\mathbf{p}}(\tau) d\tau + i\omega_{ba}t' \right) dt', \quad (6.1.12)$$

где $\omega_{ba} = \varepsilon_b - \varepsilon_a$ – энергия перехода из дискретного состояния на фоне континуума. Соответственно вероятность оже-процесса в единицу времени в присутствии лазерного поля

$$w^a = \sum_{n=-\infty}^{\infty} w_n^a, \quad (6.1.13)$$

$$w_n^a = 2\pi p_n \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |\langle \mathbf{p}b | W | 0a \rangle|^2 J_n^2(u'_n, v) \sin \theta d\theta d\varphi.$$

В формуле (6.1.13) интегрирование проводится как по полярному углу θ , так и по азимутальному углу φ импульса вылетевшего электрона.

Выражение для матричного элемента $M = \langle \mathbf{p}b | W | 0a \rangle$ можно упростить в дипольном приближении, полагая $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} = 1/r + \mathbf{r}\mathbf{r}'/r^3$, где \mathbf{r}' – радиус-вектор электрона, совершающего в результате оже-процесса переход в более низкое энергетическое состояние, расположенное ближе к атомному ядру; \mathbf{r} – радиус-вектор электрона, переходящего в непрерывный спектр. Если воспользоваться известным соотношением между матричными элементами в форме скорости и ускорения, то можно записать

$$M = -\frac{\omega_{ba}}{Z} \langle b | \mathbf{r}' \mathbf{p} | a \rangle \varphi(\mathbf{p}), \quad (6.1.14)$$

где Z – заряд иона. Учитывая связь между силой осциллятора f_{ba} и матричным элементом перехода $f_{ba} = 2\omega_{ba} |\langle b | y | a \rangle|^2$, после интегрирования по азимутальному углу будем иметь

$$w_n^a = \frac{4\pi^2 p_n^3 \omega_{ba} f_{ba}}{Z^2} \int_0^1 \varphi^2(p_n) J_n^2(u_n, v) dx. \quad (6.1.15)$$

При сферической симметрии начального состояния $\varphi(\mathbf{p})$ модуляция полем как вероятности ионизации, так и автоионизации определяется

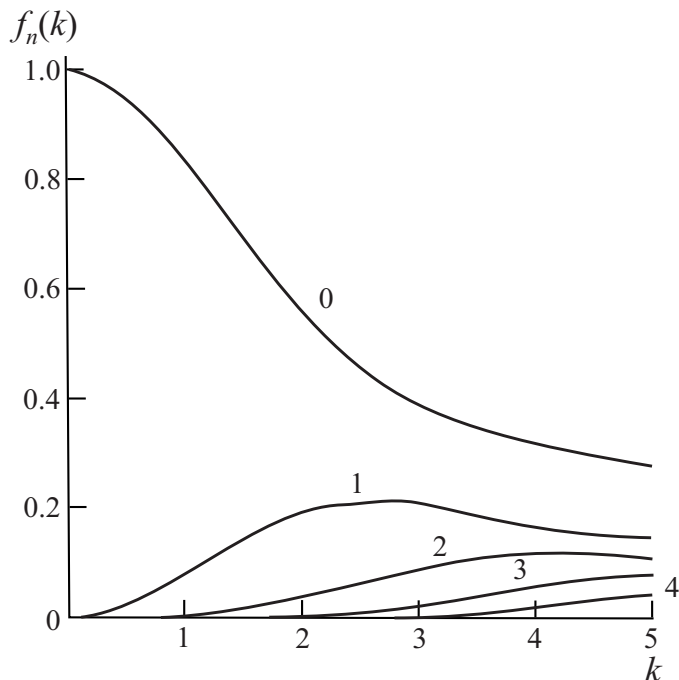


Рис. 6.1. Функциональная зависимость модулирующего фактора $f_n(k)$ для разной фотонности процесса $n = 0, \dots, 4$

одинаковым фактором $f_n(k)$, зависящим от числа поглощенных или излученных фотонов n .

Поскольку в лазерной плазме фотоионизация рентгеновским излучением и оже-эффект сосуществуют одновременно, оценим их относительную интенсивность. Для частоты рентгеновского излучения, совпадающей с частотой оже-перехода, на основании (6.1.9) и (6.1.15) получим

$$W_n^a = \frac{\Omega^2 f_{bac}}{\pi Z^2} \frac{W_n}{N_\Omega}, \quad (6.1.16)$$

где N_Ω – плотность потока фотонов.

На рис. 6.2 построена зависимость от интенсивности поля отношения полной вероятности оже-процесса к вероятности процесса в отсутствие поля. Ясно видна тенденция к заметному увеличению полной

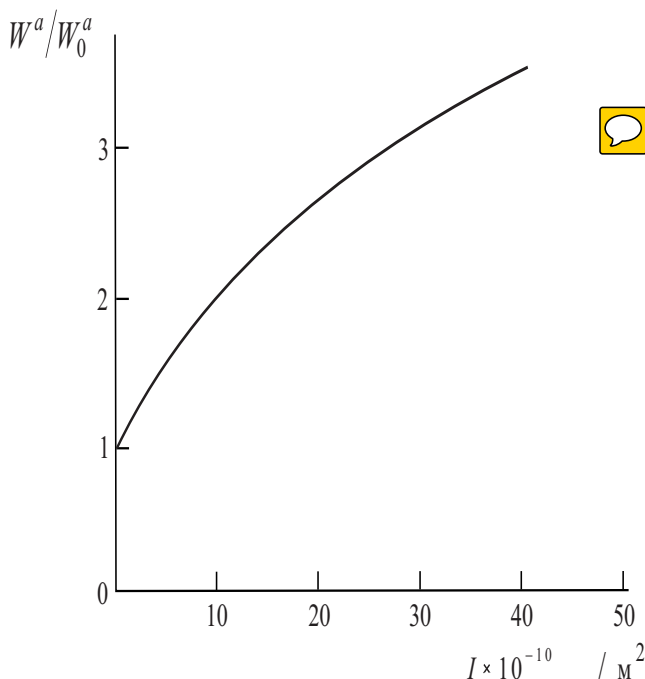


Рис. 6.2. Зависимость отношения вероятности w^a оже-процесса в лазерном поле к вероятности w_0^a оже-процесса без поля от интенсивности излучения при длине волны 800 нм

скорости оже-распада за счет действия лазерного поля. Это означает, что использование скоростей реакций, полученных теоретически или экспериментально для плазмы в отсутствие поля, в применении к расчетам лазерной плазмы не может считаться удовлетворительным.

На рис. 6.3 показана экспериментально измеренная [1] модуляция оже-процесса в сравнении с результатами теоретического расчета. Форма линии взята в равномерно лоренцевском виде с шириной, обеспечивающей наилучшее приближение. Пондеромоторный сдвиг линий с ростом поля не проявляется в соответствии со сделанными выше оценками. Сравнение показывает убедительное согласие положения и относительной величины гармоник в экспериментальном и теоретическом спектре электронов.

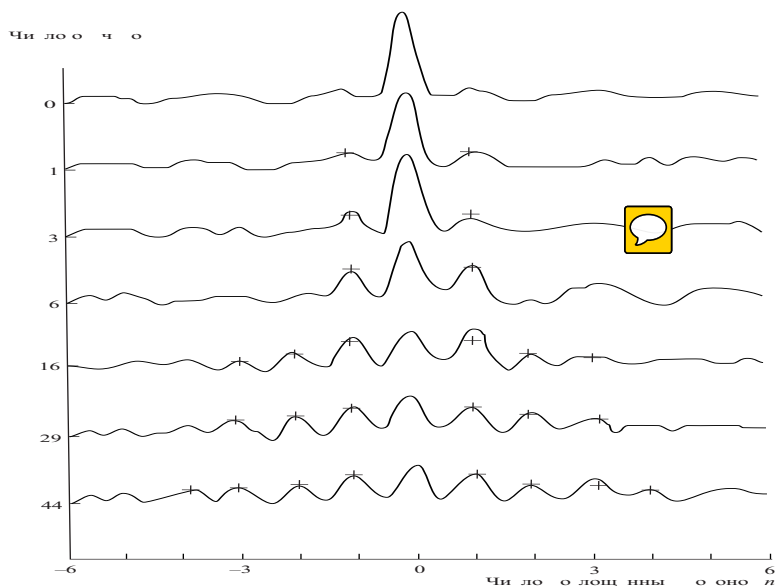


Рис. 6.3. Экспериментальный спектр электронов в поле лазерного излучения и теоретические значения амплитуд пиков сигналов (+). Интенсивности указаны слева от графиков в единицах 10^{10} Вт/см^2

6. 2. Прямая двухэлектронная ионизация в сильном лазерном поле

В процессе ионизации атомов образуются ионы с различной зарядностью. Впервые образование многозарядных ионов большой кратности ионизации под действием лазерного излучения высокой интенсивности с энергией фотонов $\sim 6,4 \text{ эВ}$ было обнаружено в работе [4]. Полученные в этой работе результаты стимулировали более детальное изучение процесса образования многозарядных ионов. Важным при этом стало выяснение вопроса является ли вылет электронов из атомов и ионов независимым, или процесс образования многозарядных ионов идет при активном межэлектронном взаимодействием и электроны могут освободиться парами. Детальное экспериментальное исследование ионизации атомов гелия в работе [5] позволило придти к заключению, что процесс образования He^{+2} носит характер прямой двухэлектрон-

ной ионизации. Типичная зависимость выхода двухзарядных ионов гелия от интенсивности излучения имеет ярко выраженную зависимость в форме типичного колена. Дальнейший анализ теоретических и экспериментальных данных подтвердили наличие механизма одно-временной двухэлектронной ионизации.

Данное явление можно описать, используя основные идеи теории Келдыша [6]. Такой подход позволяет рассмотреть широкий диапазон интенсивностей, и учесть электронные корреляции. Скорость двухэлектронного перехода из начального состояния ψ_i в конечное состояние ψ_f можно найти по общему правилу вычисления матричных элементов для S -матрицы:

$$w_{fi} = \lim_{T \rightarrow 0} |M_{fi}|^2 / T, \quad (6.2.1)$$

где

$$M_{fi} = -i \int_0^T dt \langle \psi_f | V_F | \psi_i \rangle, \quad (6.2.2)$$

а V_F представляет потенциал взаимодействия с внешним электромагнитным полем. Взаимодействие с внешним полем мы выберем в дипольном приближении и в калибровке скорости:

$$V_F(t) = \mathbf{A}(t) \frac{\hat{\mathbf{p}}}{c} + \frac{\mathbf{A}^2(t)}{2c^2}, \quad (6.2.3)$$

где \mathbf{A} – классический вектор-потенциал лазерного поля, $\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2$ – оператор импульса двух электронов, c – скорость света.

Если пренебречь взаимодействием электронов, то получаются стандартные выражения для скорости одноэлектронной ионизации. Среднее значение величины $\langle A^2(t)/2c^2 \rangle = V_p$ есть пондеромоторный одноэлектродный потенциал. Вследствие влияния этого потенциала происходит сдвиг границы спектра континуума в сторону его увеличения. В случае, когда мы рассматриваем одновременный вылет во внешнем поле двух электронов, пондеромоторный сдвиг континуума составляет $2V_p$, т. е. он равен средней колебательной энергии этих двух электронов.

Расчет прямой одновременной двухэлектронной ионизации двух электронов с учетом поправки на кулоновский потенциал и корреля-

ционного взаимодействия электронов в конечном состоянии дает результаты для выхода ионов H^{+2} слишком малые для объяснения экспериментальных данных. Причиной этого является то, что не учтена возможность нахождения одного из электронов в связанном промежуточном состоянии. Для учета вклада соответствующего канала в вероятность двухэлектронной ионизации мы воспользуемся выражением для компонент Фурье волнового пакета, образующегося при электронной ионизации. После интегрирования по углам вылета электрона получим для квадрата амплитуды

$$|B(p_n)|^2 = \frac{2\omega\beta}{I}(n\omega - U_p)^2 |\varphi(\mathbf{p}_n)|^2 \Pi(p_n) F(b_n), \quad (6.2.4)$$

где I – потенциал одноэлектродной ионизации, $\gamma = 2\omega I^{1/2}/F$, $\beta = \gamma/(1 + \gamma^2)^{1/2}$, $\varphi(\mathbf{p}_n)$ – волновая функция связанного электрона в импульсном представлении, n – число поглощенных фотонов, $b_n = p_n^2 \beta / \omega$. Функции $\Pi(p_n)$ и $F(b_n)$ определены соотношениями

$$\Pi(p_n) = \exp \left\{ -\frac{2I^2}{\omega} [(1 + \gamma^{-2}/2 + p_n^2/2I) \sinh^{-1} \gamma - 1/2\beta] \right\}, \quad (6.2.5)$$

$$F(b_n) = \int_0^1 \exp(b_n y^2) dy. \quad (6.2.6)$$

Функция $F(b_n)$ описывает эффективность надпорогового поглощения энергии одним из электронов, в то время как другой электрон остается связанным. Если сравнить поведение множителя, описывающего ионизацию в наинизшее возможное по энергии состояние континуума, с вероятностью поглощения дополнительных фотонов, то их отношение составит $2(p_n \gamma / \sqrt{I})^2$. Отсюда следует, что надпороговое поглощение эффективно при $2\gamma^2 < 1$, т. е. когда колебательная энергия электрона превышает его начальную энергию связи.

Осциллирующий в поле электрон взаимодействует с остаточным ином за счет кулоновского отталкивания, так что часть его энергии передается связанному электрону и обеспечивает дополнительную ионизацию системы за счет электронного удара. Этот эффект проявляется в следующем порядке теории возмущений по взаимодействию электронов, и в соответствующем матричном элементе подразумевается суммирование по промежуточным состояниям. Расчеты существенно

упрощаются, если использовать полюсное приближение. В результате полная вероятность двухэлектронной ионизации за счет механизма электронного удара принимает вид

$$W = 2\pi \sum_{n>\nu} p_n^3 \sigma(p_n) / B(p_n)^2 F(b_n/2)^2 F(b_n), \quad (6.2.7)$$

где $\sigma(p_n)$ сечение ионизации электронным ударом, ν – минимальное число квантов, необходимых для одноэлектронной ионизации. Сечение ионизации электронным ударом можно выбрать в виде приближенной формулы Лотца (Lotz)

$$\sigma(p_n) = 2.78\pi(2I_2)^{-2} \frac{\ln(u+1)}{u+1} \quad u = p_n^2/2I_2, \quad (6.2.8)$$

где I_2 – потенциал ионизации при отрыве второго электрона, u – энергия налетающего электрона, измеренная в относительных единицах к энергии ионизации. Результаты расчетов двухэлектронной ионизации, основанные на формулах (6.1.6) и (6.1.7) в сопоставлении с последовательной ступенчатой ионизацией показаны на рис. 6.4. Дано также сравнение с экспериментальными данными [7]. Видно, что учет ударного механизма образования двухзарядного иона He^{+2} приводит к хорошему согласию результатов теории одновременной ионизации с экспериментальными данными. Этот механизм доминирует, в частности, в процессе образования He^{+2} при интенсивностях более 10^{15} Вт/см², при экспериментальной длине волны лазерного излучения в 617 нм. Данные расчетов позволяют сделать вывод о том, что межэлектронное взаимодействие играет весьма заметную роль в процессе двухэлектронной ионизации в сильном лазерном поле. При этом важнейшим каналом оказывается тот, в котором один из электронов в промежуточном состоянии остается связанным.

6.3. Неупругое рассеяние электронов атомами в лазерном поле

Классической экспериментальной работой по многофотонным свободно-свободным переходам является [8]. В ней наблюдалось упругое рассеяние электронов, при котором энергия налетающих и рассеянных

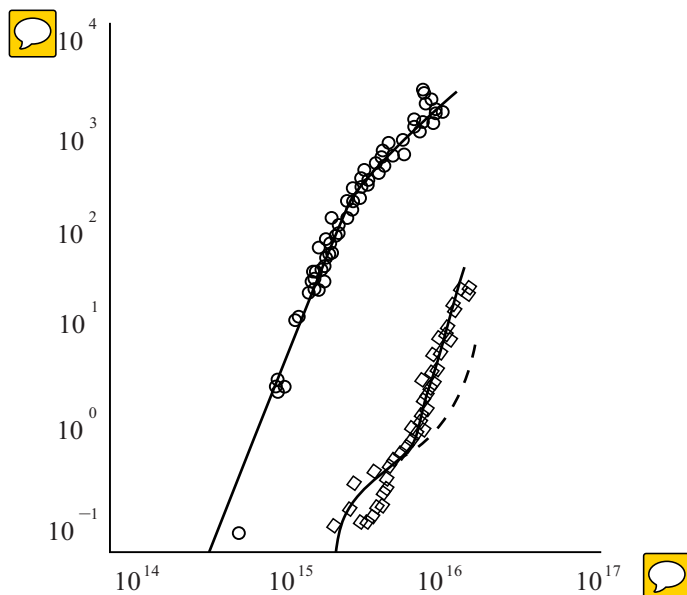


Рис. 6.4. Зависимость выхода ионов He^+ и He^{+2} от интенсивности лазерного излучения с длиной волны 617 нм длительностью 100 фс. Крестики и ромбики воспроизводят экспериментальные данные. Сплошная кривая показывает результаты расчетов с учетом механизма ионизации электронным ударом и ступенчатого механизма ионизации. Пунктирная линия дает результаты с учетом только механизма ионизации электронным ударом

электронов одинакова ($E_i = E$) в отсутствие лазерного поля. При включенном поле лазерного излучения наблюдается модифицированное внешним полем упругое рассеяние, при котором рассеянные электроны могут изменять свою энергию так, что $E_f = E_i \pm n\omega$, где n – целое число поглощенных или испущенных фотонов с частотой ω . В экспериментах наблюдалось взаимодействие с излучением или поглощением до одиннадцати фотонов. Большинство экспериментов проводилось с использованием в качестве мишени атомов аргона, хотя изучались и другие газы, в том числе H_2 . Из соотношений упругого рассеяния без учета поля резационных эффектов следует известная

формула Крола и Ватсона (Kroll-Watson formula) [9]

$$\frac{\partial \sigma^{(n)}}{\partial \Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot \frac{p_f}{p_i} J_n^2[\mathbf{a}(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)], \quad (6.3.1)$$

где \mathbf{p}_i – импульс налетающего электрона, \mathbf{p}_f – импульс рассеянного электрона, $\mathbf{a} = \mathbf{F}_0/\omega^2$ – амплитуда колебаний электрона в поле с напряженностью \mathbf{F}_0 и частотой ω , J_n – функция Бесселя первого рода порядка n .

Для наилучшего наблюдения многофотонных свободно-свободных переходов необходимо сделать максимальным скалярное произведение $\mathbf{a}(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)$. Для этого угол рассеяния в эксперименте выбирался равным 155° . Энергия налетающих электронов $E_i = 11$ эВ, а в качестве излучения использовалось излучение CO_2 лазера с энергией фотонов 0.117 эВ. Поскольку лазер действовал в импульсном режиме, то интенсивность рассеянных электронов суммировалась для нескольких сот лазерных импульсов (около 600). Результат элементарных процессов излучения и поглощения фотонов при свободно-свободных переходах показывает симметрию спектров свободно-свободных переходов относительно нулевого пика. Количество поглощаемых фотонов равно количеству излучаемых фотонов в случае моноэнергетического электронного пучка, как это и следует из формулы Крола и Ватсона. Однако полной симметрии спектров не наблюдается, что может быть свидетельством проявления дополнительных механизмов в тормозном эффекте.

При рассеянии электрона в поле лазерной волны может также происходить возбуждение атомов. В низкочастотном приближении можно рассчитать возбуждение атомов в таком процессе, основываясь на использовании усреднения мгновенной скорости процесса по периоду внешнего поля. Такая методика позволяет легко находить сечения возбуждения атомов и ионов электронным ударом в поле лазерного излучения по данным о сечениях в отсутствие поля. При этом изменение сечения может быть весьма заметным. Так, действие поля лазерного излучения с интенсивностью $2 \cdot 10^{11}$ Вт/см² и длиной волны 10.6 мкм для угла между вектором поляризации поля лазерного излучения и направлением движения налетающих на атом электронов $\phi = 0$ увеличивает сечение возбуждения атомов электронами с энергией 100 эВ на 10 %.

Приближение мгновенного удара и приближение Борна являются независимыми. Поэтому в низкочастотном пределе при выполнении процедуры усреднения скорости процесса по периоду поля можно использовать более точные экспериментальные или теоретические данные по сечениям возбуждения. В качестве примера было рассчитано сечение возбуждения метастабильного состояния 2^3S в атоме He [10]. Расчет проводился для двух случаев: для поля лазерного излучения неодимового лазера ($\hbar\omega = 1.17$ эВ) в условиях эксперимента работы [11] и для поля излучения CO_2 -лазера ($\hbar\omega = 0.117$ эВ) в условиях эксперимента работы [12].

В первом случае, для неодимового лазера, интенсивность излучения взята равной $4 \cdot 10^{10}$ Вт/см². Угол ϕ между вектором поляризации поля лазерного излучения и направлением движения налетающих на атомы электронов составлял 45° . Результаты расчетов разности сечения возбуждения в присутствии поля и при выключенном поле показаны на рис. 6.5 штриховой линией. На том же рисунке приведены экспериментальные данные работы [11] с указанием погрешности. Сплошной кривой показаны результаты расчетов Чичкова [13], умноженные на четыре. Как видим, приведенный в данном разделе расчет дает значения ближе к результатам эксперимента. Отметим, что результаты расчетов весьма чувствительны к зависимости сечения от энергии электрона в околопороговой области в отсутствие поля. На рис. 6.6 представлены результаты расчетов возбуждения He(2^3S) электронами в поле CO_2 -лазера. Значения энергии отсчитываются от порога реакции в единицах энергии фотона. Сплошная кривая 1 соответствует экспериментально измеренному числу возбужденных состояний в отсутствие поля. Штриховые кривые 2 – 6 соответствуют расчетным значениям разности количеств метастабильных атомов при включенном и выключенном поле. Здесь же приведены экспериментальные данные с указанием погрешностей. При построении теоретических кривых было учтено, что низкочастотная поляризуемость He(2^3S) довольно велика и составляет 46.8 а.е. Это приводит к штарковскому сдвигу состояния и повышению порога возбуждения состояния 2^3S на 0.05 эВ. Сравнение экспериментальных и теоретических результатов позволяет сделать вывод об их разумном согласии. Отметим, что низкочастотное приближение имеет и более общее квантовомеханическое содержание, поскольку с ним тесно связан вопрос из-

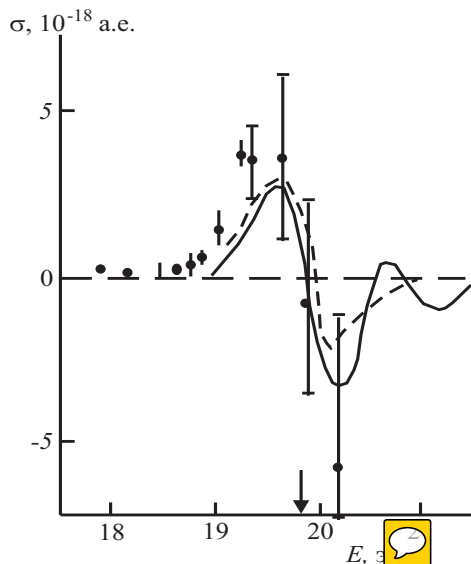


Рис. 6.5. Зависимость сечения возбуждения метастабильного состояния 2^3S в атоме Ne от энергии налетающего электрона вблизи порога реакции в условиях, соответствующих эксперименту [11]

меримости. При этом ограничения на времена измерения и скорость изменения параметров квантовомеханической системы во время измерения задаются принципом неопределенности.

6.4. Излучательные процессы в бихроматическом поле

Возможности управления различными процессами, протекающими в лазерном поле, за счет изменения его параметров исключительно велики. Данный раздел посвящен радиационным явлениям в электромагнитном излучении, состоящем из двух монохроматических компонент. Напряженность электрического поля в таком излучении дается выражением

$$\mathbf{F}(t) = \mathbf{F}_{01} \cos(\omega_1 t + \varphi_{01}) + \mathbf{F}_{02} \cos(\omega_2 t + \varphi_{02}), \quad (6.4.1)$$

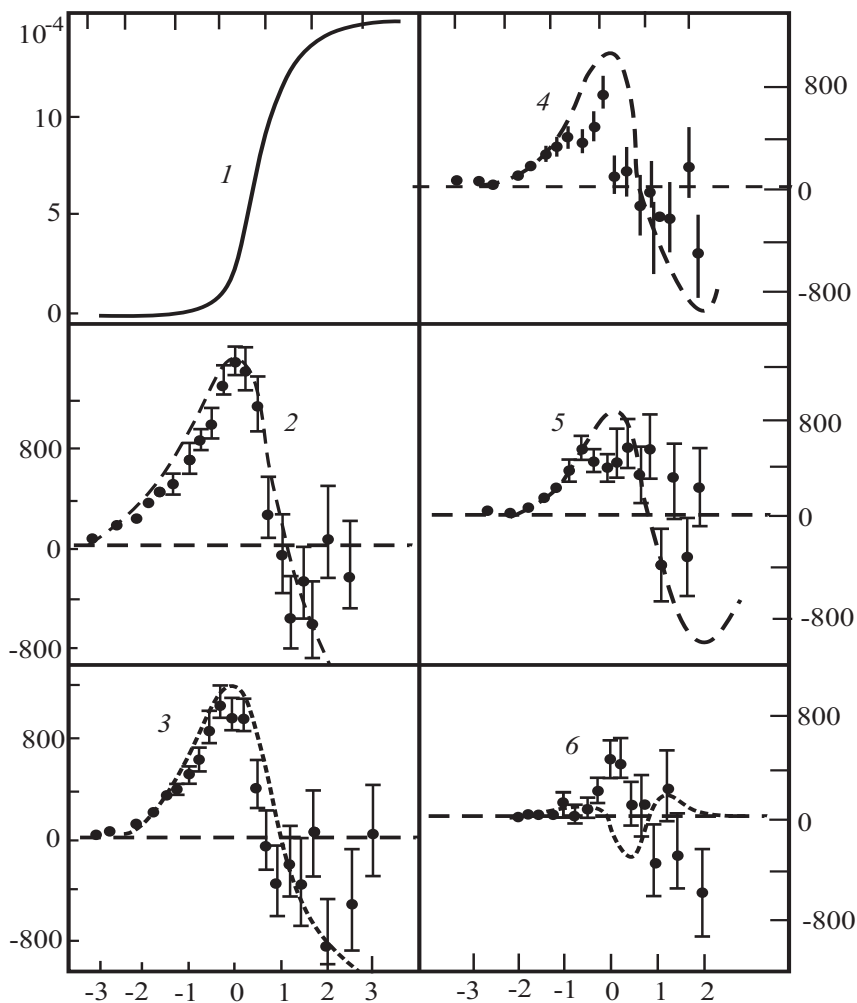


Рис. 6.6. Зависимость числа метастабильных атомов He от энергии налетающего электрона вблизи порога реакции в условиях, соответствующих эксперименту [12], за 5000 лазерных импульсов: 1 – сигнал без поля, 2 – $\phi = 0^\circ$, 3 – $\phi = 30^\circ$, 4 – $\phi = 45^\circ$, 5 – $\phi = 60^\circ$, 6 – $\phi = 90^\circ$. Энергия налетающего электрона отсчитывается от порога в единицах энергии фотона

где $\mathbf{F}_{01,2}$ – амплитуды монохроматических компонент, $\omega_{1,2}$ – их частоты, $\varphi_{01,02}$ – начальные фазы. Электромагнитное поле типа (6.4.1) называется бихроматическим.

Рассмотрим сначала ситуацию, когда отношение частот ω_1 и ω_2 является произвольным числом. Для расчета вероятностей двухфотонных процессов в бихроматическом случае нужно вычислить матричные элементы оператора бихроматического возмущения вида:

$$V_{kn}(t) = V_{1kn} e^{-i\omega_1 t} + V_{1kn}^* e^{i\omega_1 t} + V_{2kn} e^{-i\omega_2 t} + V_{2kn}^* e^{i\omega_2 t}, \quad (6.4.2)$$

где

$$V_{jkn} = \frac{1}{2} \mathbf{d}_{kn} \mathbf{F}_{0j} e^{-i\varphi_{0j}} \quad (6.4.3)$$

– матричные элементы электромагнитного взаимодействия для j -й монохроматической компоненты с выделенной временной зависимостью. Равенство (6.4.3) соответствует использованию дипольного приближения, справедливого для не слишком коротких длин волн излучения. В противном случае, в (6.4.3) необходимо учитывать зависимость напряженности электрического поля от пространственной координаты.

После указанной подстановки для амплитуды двухфотонного поглощения под влиянием обеих монохроматических компонент записать следующее выражение:

$$\begin{aligned} A_{fi}^{(2abs)} &= \langle f | V_2 G(E_i + \omega_1) V_1 | i \rangle + \langle f | V_1 G(E_i + \omega_2) V_2 | i \rangle = \\ &= \sum_n \left[\frac{V_{2fn} V_{1ni}}{\omega_{ni} - \omega_1 - i\gamma_{ni}} + \frac{V_{1fn} V_{2ni}}{\omega_{ni} - \omega_2 - i\gamma_{ni}} \right]. \end{aligned} \quad (6.4.4)$$

Отметим, что в этой формуле присутствуют два слагаемых в отличие от амплитуды монохроматического двухфотонного поглощения. Для вероятности рассматриваемого процесса имеем:

$$w_{fi}^{2abs} = 2\pi G_{fi}(\omega_1 + \omega_2) |A_{fi}^{2abs}|^2. \quad (6.4.5)$$

Амплитуда и вероятность вынужденного двухфотонного излучения под действием обеих компонент бихроматического поля получаются из формул (6.4.2) – (6.4.4) путем изменения знака у частот и

комплексного сопряжения матричных элементов оператора взаимодействия. В результате находим:

$$A_{fi}^{(2em)} = \sum_n \left\{ \frac{V_{2fn} V_{1ni}}{\omega_{ni} + \omega_1 - i\gamma_{ni}} + \frac{V_{1fn} V_{2ni}}{\omega_{ni} + \omega_2 - i\gamma_{ni}} \right\}, \quad (6.4.6)$$

$$w_{fi}^{(2em)} = 2\pi G_{fi}(-\omega_1 - \omega_2) \left| A_{fi}^{(2em)} \right|^2. \quad (6.4.7)$$

Здесь аргумент в функции формы линии соответствует закону сохранения энергии в виде $E_i = E_f + (\omega_1 + \omega_2)$ (с точностью до энергетической ширины линии перехода γ_{fi}). Таким образом, в данном случае предполагается, что $E_i > E_f$.

Для вынужденного рассеяния, если выполняется приближенное равенство $\omega_{fi} \approx \omega_1 - \omega_2$, формулы для амплитуды и вероятности процесса имеют вид:

$$A_{fi}^{(scat)} = \sum_n \left\{ \frac{V_{2fn}^* V_{1ni}}{\omega_{ni} - \omega_1 - i\gamma_{ni}} + \frac{V_{1fn} V_{2ni}^*}{\omega_{ni} + \omega_2 - i\gamma_{ni}} \right\}, \quad (6.4.8)$$

$$w_{fi}^{(scat)} = 2\pi G_{fi}(\omega_1 - \omega_2) \left| A_{fi}^{(scat)} \right|^2. \quad (6.4.9)$$

Если же $\omega_{fi} \approx \omega_2 - \omega_1$, то в (6.4.8) – (6.4.9) следует произвести замену индекса у частоты $1 \leftrightarrow 2$.

Рассеяние, при котором $\omega_{fi} \neq 0$ и, соответственно, $\omega_1 \neq \omega_2$, называется вынужденным комбинационным рассеянием. В ходе комбинационного рассеяния частота излучения изменяется в отличие от релеевского рассеяния, происходящего без изменения частоты.

Представляет интерес рассмотреть спонтанное двухфотонное излучение разных частот. Для этого запишем вероятность вынужденного процесса в виде:

$$w_{fi}^{(2em)} = (2\pi)^3 u_1 u_2 G_{fi}(-\omega_1 - \omega_2) \times \\ \times \left| \sum_n \left\{ \frac{\mathbf{e}^* \mathbf{d}_{fn} \mathbf{e}^* \mathbf{d}_{ni}}{\omega_{ni} + \omega_1 - i\gamma_{ni}} + \frac{\mathbf{e}^* \mathbf{d}_{fn} \mathbf{e}^* \mathbf{d}_{ni}}{\omega_{ni} + \omega_2 - i\gamma_{ni}} \right\} \right|^2, \quad (6.4.10)$$

где $u_{1,2}$ – пространственные плотности энергии монохроматических компонент поля (6.4.1).

Поскольку спонтанные радиационные явления вызываются электромагнитным полем вакуумных флуктуаций, для перехода к спонтанному процессу в (6.4.10) нужно произвести замены:

$$u_j \rightarrow du_{vac}(j) = \frac{(\omega_j)^3}{8\pi^3 c^3} d\omega_j d\Omega_j, \quad j = 1, 2, \quad (6.4.11)$$

а затем просуммировать по конечным состояниям системы. Это суммирование сводится к интегрированию по частотам ω_j , суммированию по поляризациям \mathbf{e}_j и интегрированию по телесным углам испускания двух фотонов Ω_j . Так как спектр вакуумных флуктуаций электромагнитного поля бесконечно широкий, то при выполнении интегрирования по частотам удобно функцию формы линии в (6.4.10) заменить на дельта-функцию. Пусть для простоты начальное и конечное состояния квантовой системы сферически симметричны, а векторы поляризаций \mathbf{e}_j действительны (линейная поляризация). Тогда квадрат модуля в правой части равенства (6.4.10) может быть записан в следующем виде: $(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)^2 |c_{fi}(\omega_2, -\omega_1)|^2$, где $c_{fi}(\omega', \omega)$ – скалярная часть тензора рассеяния. Суммирование по поляризациям (с помощью правила усреднения компонент единичных векторов \mathbf{e}_j : $\langle e_l e_s \rangle = (\delta_{ls} - n_l n_s)/2$), и интегрирование по телесным углам приводит к замене: $(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)^2 \rightarrow 32\pi^2$. В результате для вероятности в единицу времени спонтанного двухфотонного излучения получаем:

$$w_{fi}^{(2em)} = \frac{4}{\pi c^6} \int_0^{\omega_{if}} \omega_1^3 (\omega_{if} - \omega_1)^3 |c_{if}(\omega_{if} - \omega_1, -\omega_1)|^2 d\omega_1, \quad (6.4.12)$$

где $\omega_{if} = E_i - E_f > 0$, c – скорость света. При выводе (6.4.12) было учтено, что из-за наличия дельта-функции в интеграле по $d\omega_2$ (была сделана замена $G_{fi}(\omega) \rightarrow \delta(\omega)$) величина ω_2 фиксируется, если частота ω_1 задана: $\omega_2 = \omega_{if} - \omega_1$.

Вероятность двухфотонного спонтанного излучения (6.4.12) содержит множитель c^{-6} в отличие от однофотонного процесса, в вероятность которого входит c^{-3} . В атомных единицах $c \cong 137$, $c^{-3} \cong 3.9 \cdot 10^{-7}$ и $c^{-6} \cong 1.5 \cdot 10^{-13}$. Тем самым определяется малость двухфотонной вероятности по сравнению с однофотонной. Выражение (6.4.12) описывает, в частности, распад 2s подуровня атома водорода в результате двухфотонного перехода $2s \rightarrow 1s$. Действительно, однофотонный

процесс $2s \rightarrow 1s$ запрещен правилами отбора по четности, так что остаются возможными только переходы с излучением четного числа фотонов, из которых основной вклад дает двухфотонное излучение. Вероятность четырехфотонного распада, например, содержит малый множитель c^{-12} .

Вычисление вероятности в единицу времени (6.4.10) может быть проведено с помощью формализма кулоновской функции Грина, которая определяет величину $c_{fi}(\omega', \omega)$. В результате получается значение для времени жизни $2s$ подуровня атома водорода

$$\tau_{2s} = \frac{1}{w_{2s1s}^{(2em)}} \approx 0.14 \text{ с.} \quad (6.4.13)$$

Расчетный результат (6.4.13) находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными. Приведем для сравнения время жизни $2p$ подуровня атома водорода, который распадается за счет однофотонного перехода: $\tau_{2p} \cong 1.6 \cdot 10^{-9}$ с. Итак, в данном случае двухфотонный процесс на целых восемь порядков величины менее вероятен, чем однофотонный.

Рассмотрим радиационные явления в бихроматическом излучении с кратными частотами, в котором напряженность электрического поля

$$\mathbf{F}(t) = \mathbf{F}_{01} \cos(\omega t + \varphi_{01}) + \mathbf{F}_{0n} \cos(n\omega t + \varphi_{0n}), \quad (6.4.14)$$

где n – целое число, большее единицы. В дальнейшем предполагается, что начальные фазы монохроматических компонент $\varphi_{01,02}$ могут изменяться контролируемым образом.

Квантовая система под действием поля (6.4.14) может совершить переход из начального состояния в конечное состояние по двум каналам, как это показано на рис. 6.7 для $n = 3$, т. е., когда бихроматическое поле является суперпозицией поля на основной частоте и его третьей гармоники. В этом случае первый канал представляет собой однофотонное поглощение на частоте третьей гармоники с амплитудой $A_{fi}^{(1)}$, а второй – трехфотонное поглощение на основной частоте с амплитудой $A_{fi}^{(n=3)}$. Предполагаем выполненными условия применимости теории возмущений. Полная амплитуда процесса при двухканальном возбуждении равна: $A_{fi}^{(tot)} = A_{fi}^{(1)} + A_{fi}^{(2)}$.

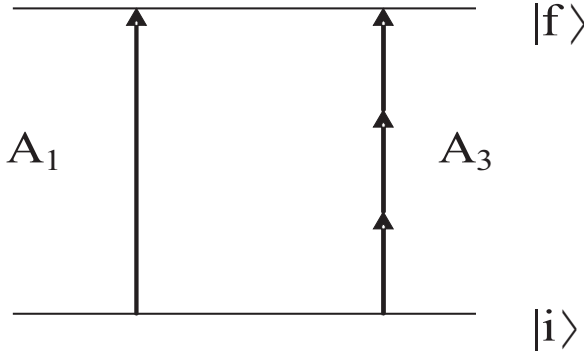


Рис. 6.7. Два канала перехода системы из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$ с амплитудами $A_1 \equiv rmA_{fi}^{(1)}$ и $A_3 \equiv A_{fi}^{(n=3)}$ в бихроматическом излучении с кратными частотами

Для полной вероятности в единицу времени бихроматического возбуждения перехода $i \rightarrow f$ имеем (при произвольном n):

$$\begin{aligned}
 w_{fi}^{(bh)} &= 2\pi G_{fi}(n\omega) \left| A_{fi}^{(1)} + A_{fi}^{(n)} \right|^2 = \\
 &= 2\pi G_{fi}(n\omega) \left\{ \left| A_{fi}^{(1)} \right|^2 + \left| A_{fi}^{(n)} \right|^2 + 2\text{Re} \left[A_{fi}^{(1)} A_{fi}^{(n)*} \right] \right\}.
 \end{aligned}
 \tag{6.4.15}$$

Здесь первое слагаемое в фигурных скобках описывает однофотонное поглощение на частоте n -й гармоники, второе слагаемое описывает n -фотонное поглощение на основной частоте, а третье слагаемое представляет себя интерференционный член. Если учесть общее выражение для амплитуды n -фотонного поглощения, то (6.4.15) можно переписать в виде:

$$w_{fi}^{(bh)} = w_{fi}^{(1abs)} + w_{fi}^{(nabs)} + 4\pi G_{fi}(n\omega) \left| A_{fi}^{(1)} A_{fi}^{(n)} \right| \cos(\Delta\varphi_{bh} + \Delta\varphi_i),
 \tag{6.4.16}$$

где $\Delta\varphi_{bh} = \varphi_{0n} - n\varphi_{01}$ – величина, которую будем называть бихроматической фазой и $\Delta\varphi_i = \arg(rmA_{fi}^{(1)}) - \arg(A_{fi}^{(n)}) - \Delta\varphi_{bh}$ – «внутренний» сдвиг фаз, не зависящий от начальных фаз монохроматических компонент поля (6.4.14). Когда начальное и конечное состояния кван-

товой системы принадлежат дискретному энергетическому спектру и отсутствует промежуточный резонанс, то $\Delta\varphi_i = 0$.

Из выражения (6.4.16) следует, что изменение бихроматической фазы $\Delta\varphi_{bh}$ за счет интерференционного члена приводит к изменению полной вероятности радиационного процесса при постоянных интенсивностях монохроматических компонент. Такое управление вероятностью фотопроцесса путем изменения бихроматической фазы называется когерентным фазовым контролем в бихроматическом поле. Физической основой когерентного фазового контроля в этом случае является квантовая интерференция амплитуд двух каналов при бихроматического воздействия.

Равенство (6.4.16) удобно представить в следующей форме:

$$w_{fi}^{(bh)} = w_{fi}^{(\Sigma)} \left\{ 1 + \frac{k}{2} \cos(\Delta\varphi_{bh} + \Delta\varphi_i) \right\}, \quad (6.4.17)$$

где $w_{fi}^{(\Sigma)} = w_{fi}^{(1abs)} + w_{fi}^{(nabs)}$ – вероятность процесса без интерференционного слагаемого и

$$k = 2 \sin \left\{ 2 \arctg \left| \frac{A_{fi}^{(nabs)}}{A_{fi}^{(1abs)}} \right| \right\} \quad (6.4.18)$$

– выражение для коэффициента фазовой модуляции через амплитуды каналов. Коэффициент фазовой модуляции определяется формулой

$$k = 2 \frac{w_{max} - w_{min}}{w_{max} + w_{min}}, \quad (6.4.19)$$

где $w_{max, min}$ – максимальное и минимальное значения вероятности возбуждения в зависимости от величины бихроматической фазы $\Delta\varphi_{bh}$. Как следует из определения (6.4.19), коэффициент фазовой модуляции изменяется в пределах $2 \geq k \geq 0$. В случае $k = 2$ достигается максимально возможная фазовая модуляция процесса, если же $k = 0$, то фазовая модуляция отсутствует.

В соответствии с равенством (6.4.18) можно сделать вывод о том, что максимально возможная фазовая модуляция бихроматического возбуждения отвечает условию

$$\left| A_{fi}^{(nabs)} \right| = \left| A_{fi}^{(1abs)} \right|, \quad (6.4.20)$$

т. е. имеет место в случае, когда модули амплитуд двух каналов процесса равны между собой.

Рассмотрим бихроматическое возбуждение в простейшем случае двухуровневой системы, когда вычисления можно довести до конца. Используя формулу для однофотонного возбуждения на частоте n -й гармоники и n -фотонного возбуждения на основной частоте, находим выражение для вероятности в единицу времени бихроматического возбуждения:

$$w_{TLS}^{(tot)} = 2\pi G(n\omega) \left| \Omega_{0n} + C_n \frac{\Omega_{01}^n}{\omega_0^{n-1}} \exp(i\Delta\varphi_{bh}) \right|^2, \quad (6.4.21)$$

где

$$\Omega_{0j} = \frac{d_0 F_{0j}}{2}, \quad j = 0, n \quad (6.4.22)$$

– резонансные частоты Раби двухуровневой системы, соответствующие амплитудам напряженности электрического поля F_{01} , F_{0n} ; C_n – численный коэффициент, $\Delta\varphi_i = 0$; ω_0 , d_0 – собственная частота и дипольный момент перехода двухуровневой системы.

После взятия квадрата модуля в правой части равенства (6.4.21) для полной вероятности в единицу времени (или скорости) бихроматического возбуждения двухуровневой системы находим:

$$w_{TLS}^{tot}(\Delta\varphi_n) = w_n^{(\Sigma)} \left[1 + \frac{k}{2} \cos\left(\Delta\varphi_{bh} + \frac{\pi}{2}(n-1)\right) \right]. \quad (6.4.23)$$

Здесь

$$w_n^{(\Sigma)} = 2\pi G(n\omega) \left[\Omega_{0n}^2 + C_n^2 \omega_0^2 \left(\frac{\Omega_{01}}{\omega_0} \right)^{2n} \right] \quad (6.4.24)$$

– скорость бихроматического возбуждения двухуровневой системы без учета интерференционного слагаемого,

$$k_n = 2 \sin \left\{ 2 \arctg \left[|C_n| \frac{\Omega_{01}^n}{\Omega_{0n} \omega_0^{n-1}} \right] \right\} \quad (6.4.25)$$

– коэффициент фазовой модуляции вероятности бихроматического возбуждения двухуровневой системы. Подчеркнем, что в случае четного числа n вероятность рассматриваемого процесса равна нулю из-за дипольных правил отбора.

Соотношение (6.4.20) для бихроматического возбуждения двухуровневой системы переписывается в виде:

$$|C_n| \Omega_{01}^n = \Omega_{0n} \omega_0^{n-1}. \quad (6.4.26)$$

Равенство (6.4.26) определяет оптимальные параметры задачи, при которых коэффициент фазовой модуляции максимален $k_n = 2$. Поскольку на практике имеют дело с интенсивностью излучения, а не с напряженностью поля, имеет смысл переписать условие (6.4.26) через интенсивность излучения на основной частоте

$$I_1 = c \frac{F_{01}^2}{8\pi}, \quad (6.4.27)$$

где c – скорость света, и параметр

$$\eta_n = \frac{I_n}{I_1}, \quad (6.4.28)$$

представляющий собой отношение интенсивности n -й гармоники к интенсивности излучения на основной частоте. Тогда равенство (6.4.26) дает:

$$\eta_n^{opt} = C_n^2 \left(\frac{\Omega_{01}}{\omega_0} \right)^{2n-2} = C_n^2 \left(\frac{d_0}{2\omega_0} \sqrt{\frac{8\pi I_1}{c}} \right)^{2n-2}. \quad (6.4.29)$$

В случае выполнения равенства $\eta_n = \eta_n^{(opt)}$ коэффициент фазовой модуляции $k_n = 2$, т. е. максимален, и зависимость скорости возбуждения двухуровневой системы от бихроматической фазы наиболее сильная. Для проведения расчетов удобно переписать условие (6.4.29) в атомных единицах, когда $e = m = \hbar = 1$, а интенсивность излучения (в ваттах, деленных на квадратный сантиметр) должна быть нормирована на величину атомной интенсивности, которая равна $I_a = 3.52 \times 10^{16}$ Вт/см². Тогда вместо (6.4.29) имеем:

$$\eta_n^{opt} = C_n^2 \left(\frac{d_0}{2\omega_0} \sqrt{\frac{8\pi I_1}{137 I_a}} \right)^{2n-2}. \quad (6.4.30)$$

При записи (6.4.30) было учтено, что в атомных единицах скорость света равна 137.

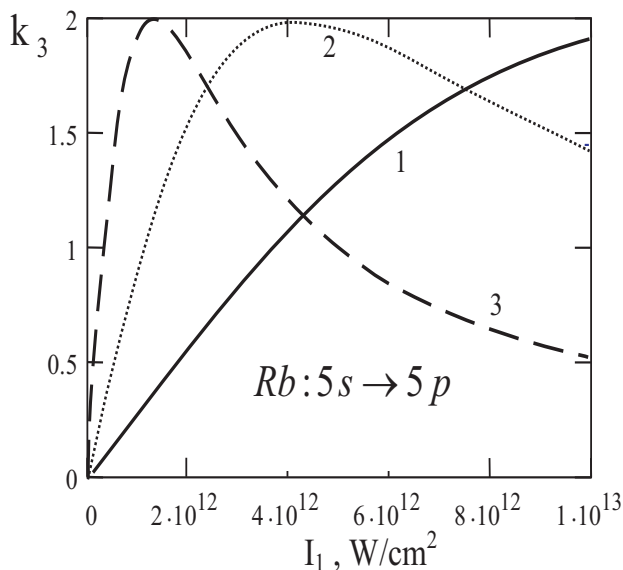


Рис. 6.8. Зависимость коэффициента фазовой модуляции скорости бихроматического возбуждения перехода $5s \rightarrow 5p$ в атоме рубидия, вычисленная в двухуровневом приближении, от интенсивности излучения I_1 на основной частоте при различных значениях параметра $\eta_3 = I_3/I_1$:
 1 – $\eta_3 = 10^{-2}$; 2 – $\eta_3 = 10^{-3}$; 3 – $\eta_3 = 10^{-4}$

В качестве примера реализации двухуровневой системы рассмотрим переходы из состояний с нулевым орбитальным моментом без изменения главного квантового числа в атоме рубидия (основное состояние $5s$). Такой выбор обусловлен тем обстоятельством, что сила осциллятора для переходов внутри атомной оболочки (без изменения главного квантового числа) максимальна. Поэтому в наилучшей степени выполняется условие двухуровневого приближения. Зависимость коэффициента фазовой модуляции от интенсивности излучения на основной частоте для перехода $5s \rightarrow 5p$ представлена на рис. 6.8 для $n = 3$.

Вычисления показывают, что оптимальные значения интенсивности излучения на основной частоте (при тех же величинах параметра

$\eta_3 = I_3/I_1$) для перехода $6s \rightarrow 6p$ в атоме рубидия на два порядка величины меньше, чем для перехода из основного состояния. Это связано с большей величиной отношения $\zeta_1 = \Omega_{01}/\omega_0$, определяющего амплитуду n -фотонного процесса (второе слагаемое под знаком модуля в правой части равенства (6.4.21)).

Для относительно малых значений интенсивностей излучения формула (6.4.25) для коэффициента фазовой модуляции может быть переписана в виде:

$$k_n(I_1 \rightarrow 0) \rightarrow 4|C_n| \frac{\Omega_{01}^n}{\Omega_{0n}^n \omega_0^{n-1}} = 4|C_n| \eta_n^{-1/2} \left(\frac{d_0}{2\omega_0} \sqrt{\frac{8\pi}{c}} I_1 \right)^{n-1}, \quad (6.4.31)$$

т. е. имеет место предельное соотношение $k_n \rightarrow \eta_n^{-1/2} (I_1)^{\frac{n-1}{2}}$. Отсюда, в частности, следует, что при $n = 3$, коэффициент фазовой модуляции в области малых значений интенсивности излучения растет линейно с величиной I_1 , причем угол наклона соответствующей прямой к оси абсцисс увеличивается с уменьшением параметра $\eta_3 = I_3/I_1$:

$$k_3 \cong 0.4 \left(\frac{d_0}{\omega_0} \right) \frac{1}{\sqrt{\eta_3}} \frac{I_1}{I_a}. \quad (6.4.32)$$

Полученные результаты могут быть использованы для оценки эффективности фазового контроля возбуждения атомов в дискретном спектре под действием бихроматического излучения с кратными частотами в случае применимости двухуровневого приближения и теории возмущений.

Подавляющая часть выполненных к настоящему времени экспериментов по фазовому контролю в бихроматическом поле посвящена возбуждению квантовых систем (атомов, молекул, твердых тел) из связанного состояния в состояние непрерывного спектра. Впервые когерентный контроль бихроматического возбуждения атома на связанно-связанном переходе при внешнем изменении бихроматической фазы наблюдался в работе Эллиота с сотрудниками в 1990 году [14]. Возбуждался $6s^1S_0 \rightarrow 6p^1P_1$ переход в атоме ртути под действием излучения на основной частоте ($\lambda = 554$ нм) и его третьей гармоники. В этом случае имела место квантовая интерференция амплитуды однофотонного поглощения на частоте третьей гармоники и амплитуды трехфотонного поглощения излучения на основной частоте. Зависимость полной

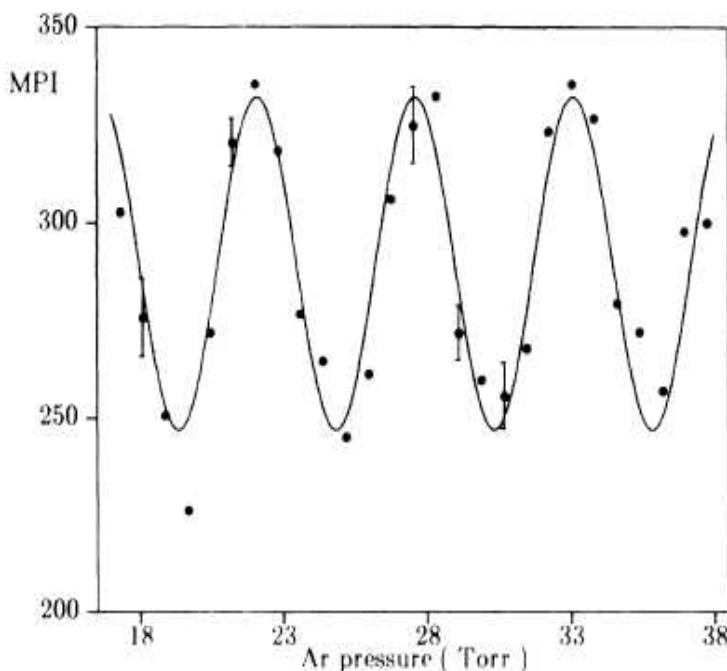


Рис. 6.9. Фазовая модуляция сигнала фототока (когерентный фазовый контроль), зарегистрированная в эксперименте [14]

скорости возбуждения $6s^1S_0 \rightarrow 6p^1P_1$ перехода от бихроматической фазы $\Delta\varphi = \varphi_{03} - 3\varphi_{01}$ регистрировалась по сигналу фототока, возникающего в результате двухфотонной ионизации $6p^1P_1$ состояния излучением на основной частоте. Зарегистрированная в эксперименте [14] (рис. 6.9) глубина фазовой модуляции фототока, характеризующая эффективность когерентного фазового контроля, составила 15% при максимально возможном расчетном значении 30%. Ограничение на расчетную величину глубины фазовой модуляции проистекает из различной пространственной зависимости интенсивности излучения на основной частоте и его третьей гармоники в фокальной области. Отклонение измеренного значения данной величины от расчетного авторы связывали с влиянием ряда факторов, таких как: несовершенное перекрытие лазерных пучков, неоптимальное отношение вероятностей одно- и трехфотонного поглощения, эффект насыщения и сдвиг

верхнего энергетического уровня вследствие динамического эффекта Штарка.

Иная схема возбуждения атомов в дискретном спектре использовалась для реализации когерентного контроля в статье [15]. Квантовая интерференция различных каналов процесса наблюдалась при возбуждении атомов криптона и ксенона из основного состояния в возбужденное состояние ($5p[5/2]_2$ — в случае криптона и $4f[3/2]_2$ — в случае ксенона) за счет поглощения излучения на основной частоте и его третьей гармоники. Вероятность возбуждения регистрировалась по сигналу фототока, вызванного однофотонной ионизацией возбужденного состояния атома излучением на основной частоте. Фазовая зависимость процесса возникала в результате квантовой интерференции двух каналов возбуждения: (1) — четырехфотонного поглощения на основной частоте и (2) — поглощения одного фотона на основной частоте и одного фотона на частоте третьей гармоники. В этом случае, благодаря высокой нелинейности процесса удалось получить большее значение коэффициента модуляции, чем в работе Эллиота с сотрудниками.

Выше рассматривалось бихроматическое возбуждение атомов в дискретном спектре. Представляет интерес исследовать особенности когерентного контроля при переходе атомного электрона из связанного в автоионизационное состояние. (Автоионизационным является состояние, которое ионизируется без внешнего воздействия в результате внутренних взаимодействий в системе.) Такой эксперимент был поставлен в работе [16]. Наблюдался фазовый контроль возбуждения атома кальция в автоионизационное состояние $4p7s[1/2]_1^0$ за счет интерференции двух каналов: трехфотонного поглощения на основной частоте и однофотонного поглощения на частоте третьей гармоники (схема контроля $k3+1n$, изображенная на рис. 84). В качестве накачки использовалось излучение перестраиваемого лазера на красителе с длиной волны 435 нм, длительностью импульса 10 нс, энергией в импульсе 5 мДж и шириной спектра 0.1 см^{-1} . Достигнутая глубина фазовой модуляции составляла примерно 43%. Авторы [16] отмечали, что данная работа является первым шагом на пути к достижению управления спектральной формой автоионизационного резонанса с помощью вариации бихроматической фазы. Другой важный вывод их эксперимента состоит в демонстрации возможности фазового контро-

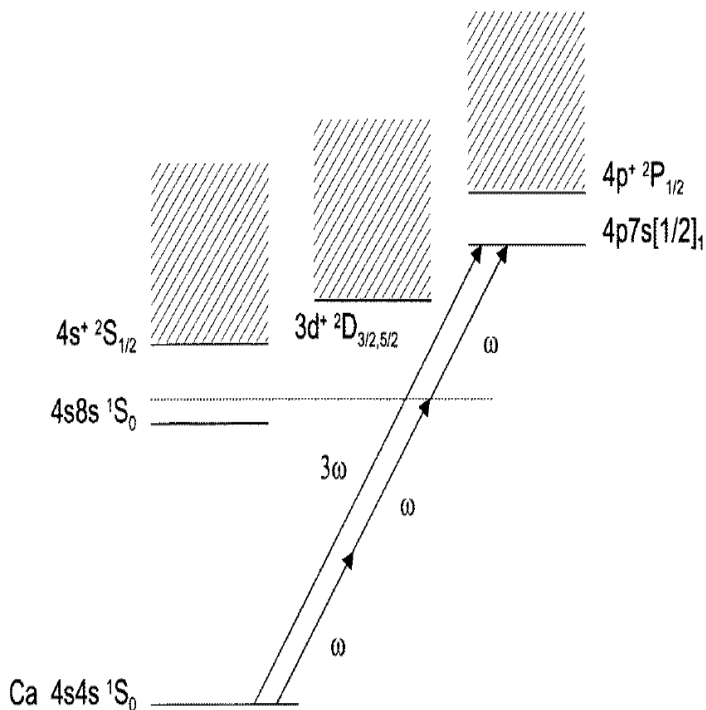


Рис. 6.10. Схема бихроматического возбуждения атома кальция в автоионизационное состояние

ля без фокусировки лазерного излучения, что важно с точки зрения приложений, например, для когерентного контроля фотохимических реакций.

Фазовый контроль может наблюдаться при бихроматическом возбуждении внешнего или внутреннего фотоэффекта в твердом теле. Внешний фотоэффект представляет собой испускание электронов поверхностью твердого тела под действием электромагнитного излучения. Внутренний фотоэффект возникает в результате фотоиндуцированных переходов носителей электрического тока в объеме твердых тел. Эти переходы могут быть межзонными, внутризонными, примесь-

зонными, а также происходить между квантово-размерными уровнями энергии в наноструктурированных средах.

Хорошо известно, что в случае центрально-симметричного образца в отсутствии внешнего поля невозможно монохроматическое возбуждение стационарного электрического тока, т. е. отсутствует объемный фотогальванический эффект. В то же время при возбуждении носителей заряда в твердом теле под действием бихроматического поля вида (6.4.14) возможен так называемый когерентный фотогальванический эффект без приложения внешнего напряжения. Первая экспериментальная работа по внутреннему фотоэффекту при бихроматическом возбуждении [17] была посвящена фазовому контролю тока в слоистой полупроводниковой структуре AlGaAs /GaAs. Стандартный фотоприемник на основе данной структуры имеет в инфракрасном диапазоне значительную величину диэлектрической восприимчивости второго порядка $\chi^{(2)}$, ответственной за двухфотонное поглощение. Поэтому возможна квантовая интерференция амплитуд одно- и двухфотонного поглощения при возбуждении переходов между энергетическими подзонами квантовых ям в образце AlGaAs/GaAs. Данное обстоятельство было использовано в работе [17] для реализации фазового контроля фототока.

Квантовая яма представляет собой одномерную потенциальную яму, размер которой порядка длины волны де-Бройля $\lambda^{(DB)}$ захваченной ямой частицы. В случае электрона с энергией E , пользуясь определением длины волны де-Бройля $\lambda^{(DB)} = h/p$, нетрудно получить оценку:

$$\lambda^{(DB)} \propto 2\pi a_B \sqrt{13.6 \text{ [eV]} / |E|},$$

где $a_B \cong 0.53 \text{ \AA}$ – радиус Бора. Если $|E| \approx 0.1 \text{ эВ}$ то $\lambda^{(DB)} \approx 40 \text{ \AA}$, таким образом размер потенциальной ямы лежит в нанометровом диапазоне длин. Если ширина ямы удовлетворяет указанному требованию, то будет иметь место квантование поперечного движения носителей заряда, которое используется в различного рода оптоэлектронных устройствах.

Наноструктуры типа квантовых ям могут быть сформированы в виде тонкого слоя полупроводника с узкой запрещенной зоной E_g , окруженного полупроводником с большей шириной запрещенной зоны, с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии. В рассматриваемом

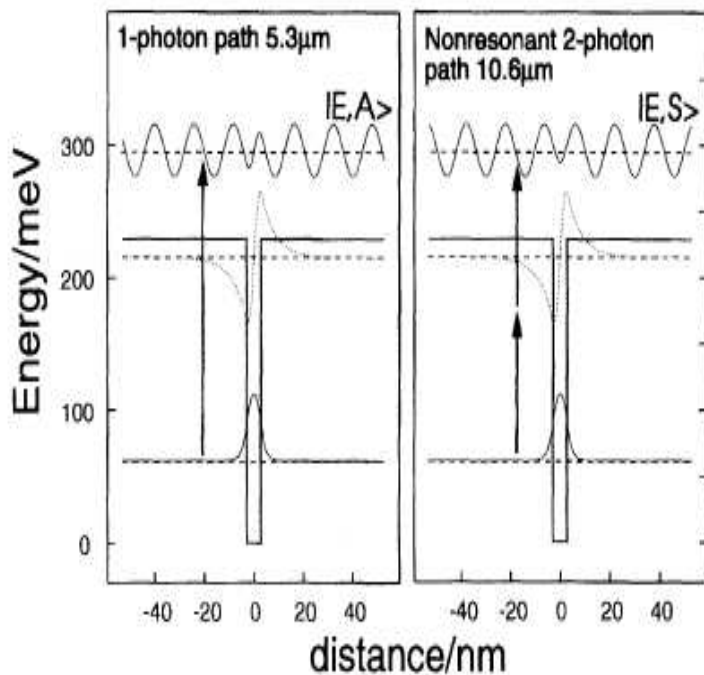


Рис. 6.11. Два канала возбуждения внутреннего фотоэффекта на квантовых ямах в полупроводниковой структуре AlGaAs/GaAs

случае в роли узкозонного полупроводника выступает GaAs ($E_g = 1.5$ эВ), а в роли широкозонного – соединение $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, в котором доля x атомов галлия заменена атомами алюминия. Ширина запрещенной зоны этого соединения колеблется (в зависимости от величины x) в пределах $1.5 \text{ эВ} < E_g < 2.2 \text{ эВ}$. В эксперименте [16] использовались квантовые ямы с шириной 5.5 нм и параметром $x = 0.26$. Уровни энергии и волновые функции электрона в квантовой яме данного типа показаны на рис. 6.11. Фототок в эксперименте возникал в результате возбуждения электронов из основного (связанного) состояния квантовой ямы в состояние, соответствующее инфинитному движению, под действием бихроматического излучения на длинах волн $\lambda_1 = 10.6$ мкм и $\lambda_2 = 5.3$ мкм (рис. 6.11). Таким образом, имелось два канала процесса: однофотонное поглощение на длине волны

5.3 мкм и двухфотонное поглощение на длине волны 10.6 мкм. Фазовый контроль фототока возникал как следствие квантовой интерференции этих каналов. В представленном на рис. 85 случае в отличие от возбуждения в дискретном спектре амплитуды обоих каналов не равны нулю, поскольку верхний энергетический уровень, принадлежащий непрерывному спектру, вырожден по четности. Однофотонное возбуждение происходит в нечетное конечное состояние (A), а двухфотонное возбуждение – в четное состояние (S) той же энергии.

Излучение на основной частоте генерировалось одномодовым CO_2 лазером с длительностью импульсов 100 нс при частоте повторения 2 Гц. Удвоение частоты происходило в кристалле AgGaSe_2 с эффективностью порядка 2×10^{-4} . Величины одно- и двухфотонного поглощения выравнивались с помощью набора фильтров с целью получения максимальной эффективности фазового контроля. Измерение фототока в периодической структуре, состоящей из 25 квантовых ям $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.74}\text{Al}_{0.26}\text{As}$ с толщиной 55 Å и расстоянием между соседними ямами 325 Å, проводилось при температуре $T = 82^\circ \text{K}$. Величина и направление регистрируемого фототока изменялись в интервале 10 мкА за счет вариации относительной фазы $\varphi_{bh} = \varphi_{02} - 2\varphi_{01}$. Вариация бихроматической фазы осуществлялась с помощью поворота пластинки из NaCl, через которую пропускалось бихроматическое излучение. Подчеркнем, что фототок в данном эксперименте возникал без приложения внешнего напряжения к слоистой структуре AlGaAs/GaAs. Таким образом, в работе [17] была экспериментально продемонстрирована возможность когерентного контроля фотопроцессов в полупроводниковых наноструктурах с помощью бихроматического излучения кратных частот.

Помимо вышеизложенных имеется значительное количество экспериментальных работ по когерентному фазовому контролю фотоионизации атомов и молекул, фотодиссоциации молекул, внешнему фотоэффекту, возбуждению спинового тока в твердых телах под действием бихроматического излучения с кратными частотами (см. обзор [18]).

Литература

1. *Schins J.M., Breger P., Agostini P.* Laser-assisted Auger decay as free-free transitions in high-intensity laser field // *Phys. Rev. A*.
2. V. 52. P. 172–1278.
3. *Давыдов А.С.* Квантовая механика. – СПб.: БХВ–Петербург, 2011.
4. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. – М.: Наука, 1979.
5. *Luk T.S., Johan V., Egger H., Pummer H., Rhodes C.K.* Collision-free multiple photon ionization of atoms and molecules at 193 nm // *Phys. Rev. A*. 1985. V. 32. P. 214–224.
6. *Walker B., Mevel E., Yang Baorui, Breger P., Chambaret J. P., Antonetti A., DiMauro L. F., Agostini P.* Double ionization in the perturbative and tunneling regimes // *Phys. Rev.* 1993. V. 48. R 894–R897.
7. *Golovinski P.A.* Direct two-electron bound- free transition in an intense laser field // *Laser Phys.* 1997. V. 7. P. 655–659.
8. *Fittinghoff D. N., Bolton P. R., Chang B., Kulander K. C.* Observation of nonsequential double ionization of helium with optical tunneling // *Phys. Rev. Lett.* 1992. V. 69. P. 2642–2645.
9. *Weingartshofer A., Clarke E.M., Holmes J.K., Jung C.* Experiments on multiphoton free-free transitions // *Phys. Rev. A*. 1979. V. 19. P. 2371–2376.
10. *Kroll N.M., Watson K.M.* Charged-particle scattering in the presence of a strong electromagnetic wave // *Phys. Rev. A*. 1973. V. 8. P. 804–809.
11. *Головинский П.А.* Возбуждение атомов электронами в сильном световом поле // *ЖЭТФ*. 1993. Т. 103. С. 1947–1958.
12. *Luang S., Hippler R., Lutz H.O.* Simultaneous electron-photon excitation of helium ($\hbar\omega = 1.17\text{eV}$) // *J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.* 1991. V. 24. P. 3241–3249.

13. *Wallbank B., Holms J.K., Weingartshofer A.* Simultaneous electron-photon excitation of helium 2^2S : an experimental investigation of the effects of laser intensity and polarization // *J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.* 1990. V. 23. P. 2997–3005.
14. *Chichkov B.N.* Laser-assisted electron impact ionization in laser produced plasmas // *J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.* 1990. V. 23. L333–L338.
15. *Ce Chen, Yi – Yian Yin, Elliot D.S.* Interference between optical transitions // *Phys. Rev. Lett.* 1990. V. 64. P. 507–509.
16. *Karapanagioti N.E., Xenakis D., Charalambidis D., Fotakis C.* Coherent control in four-photon excitation schemes // *J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.* 1996. V. 29. P. 3599–3609.
17. *Xenakis D., Karapanagioti N.E., Faucher O., Hertz E., Charalambidis D.* Observation of field phase dependent autoionization // *J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.* 1999. V. 32. P. 341–348.
18. *Dupont E., Corkum P.B., Liu H.C. et al.* Phase-controlled currents in semiconductors // *Phys. Rev. Lett.* 1995. V. 74. P. 3596–3599.
19. *Астапенко В.А.* Когерентный фазовый контроль возбуждения атомов бихроматическим лазерным излучением в присутствии электрического поля // *Квантовая электроника.* 2005. Т. 35. С. 541–546.

Глава 7

Ультракороткие лазерные импульсы

7. 1. Генерация ультракоротких импульсов

Взаимодействие лазерного излучения с веществом является одним из наиболее широко используемых инструментов исследования свойств микромира. Обычно изучение процессов взаимодействия импульсов электромагнитного поля, например, лазерного излучения, с веществом проводится для импульсов с длительностью, значительно превышающей характерные периоды времени мишени. Однако создание технологии сжатия и усиления лазерных импульсов на основе линейной модуляции частоты с использованием нелинейных кристаллов позволило получить источники электромагнитного излучения с длительностью импульса $5 - 30$ фс и пиковой интенсивностью до 10^{21} Вт/см². Подобные импульсы являются уникальным инструментом исследования физических, химических и биологических процессов; позволяют изучать быстропротекающие процессы в веществе с рекордно высоким временным разрешением, соответствующим одному-двум периодам светового поля.

Так, для одного из наиболее эффективных титан-сапфировых лазеров реализована схема, обеспечивающая уменьшение длительности

импульса до 5 фс, а также выполнены работы по синтезу импульсов длительностью менее 4 фс путем генерации множественных стоксовых и антистоксовых компонент в комбинационно активном газе. Получены экспериментальные доказательства генерации импульсов длительностью 130-250 ас ($\text{ас} = 10^{-18} \text{ с}$) путем фазировки гармоник высокого порядка. Теоретически такой предельно сжатый импульс будет содержать всего один полупериод колебания электрического поля, что определяет минимальный предел длительности ультракоротких импульсов. Вследствие физических особенностей сред резонаторов лазеров, излучаемые ими длины волн лежат в ближнем инфракрасном или оптическом диапазонах. Таким образом, длительность импульса обычного лазера имеет предел порядка нескольких фемтосекунд. Обзор вопросов, связанных со взаимодействием сверхсильных, ультракоротких электромагнитных полей с веществом, дан в [1]. В книге рассматриваются теоретические и практические аспекты построения лазеров рентгеновского диапазона, а также различные применения ультракороткого излучения.

Длительность фемтосекундных импульсов пока еще не подходит для прямого изучения внутриатомной динамики электронов, поскольку характерные времена в таких процессах относятся к дофемтосекундному диапазону. При нелинейном взаимодействии со средой посредством генерации гармоник, фемтосекундные импульсы могут порождать импульсы вторичного излучения, длина волны и длительность которых во много раз меньше длины волны и длительности падающего импульса. Исследование этих процессов дало начало развитию физики аттосекунд [2]. Подобные аттосекундные импульсы можно использовать для исследования быстротекущих процессов со сверхвысоким временным разрешением.

Описание взаимодействия со средой предельно коротких импульсов, содержащих несколько колебаний поля, а в пределе только половину периода, с помощью понятий «частота» и «огibaющая» становится неполным, так как воздействие такого импульса на среду зависит от конкретной формы фронта нарастания и затухания сигнала, а протекающие при прохождении импульса процессы сильно зависят от сдвига несущей по отношению к максимуму интенсивности или, так называемой, огibaющей-несущей фазе. С помощью численного решения уравнения Шредингера было получено, что направление вылета из ми-

пени ускоренных электронов в значительной степени зависит от длительности импульса излучения, а при количестве колебаний более 15 эта зависимость пропадает. Данный эффект использован для создания приборов, позволяющих делать «томографию» падающего импульса, т. е. определять мгновенные значения электрического поля. Продемонстрирована возможность зафиксировать фазу несущей по отношению к огибающей от импульса к импульсу для последовательности импульсов. Подобные системы используются для осуществления прямого управления атомной системой. Активно обсуждаются способы генерации ультракоротких и импульсов длительностью до 10^{-21} – 10^{-22} с. Это может открыть новые перспективы исследования взаимодействия ультракоротких импульсов электромагнитного излучения с веществом не только на атомном, но и на ядерном уровне.

Новые экспериментальные возможности делают необходимым развитие адекватной теории для описания ультракоротких импульсов, а так же их дифракции и фокусировки. Одновременно данный круг вопросов привлек внимание и специалистов в области генерации и распространения импульсов в радио и СВЧ диапазоне. Описание ультракоротких импульсов на основе преобразования Фурье становится достаточно громоздким для лазерного излучения, содержащего всего несколько колебаний поля. Однако в настоящее время развит раздел математики, связанный с исследованием локальных особенностей функций на основании математических конструкций – вейвлетов (всплесков) [3, 4]. Термин «всплески» (wavelets) введен Гроссманом и Морле (Grossman, Morlet) в середине восьмидесятых годов в приложении к анализу свойств сейсмических и акустических сигналов. В настоящее время всплески широко используются в приложениях, например, в проблеме распознавания изображений, в обработке и синтезе различных сигналов, включая человеческую речь. На основе всплесков строятся преобразования (всплеск-преобразования), являющиеся альтернативой традиционному преобразованию Фурье. Вейвлеты или всплески удачно приспособлены для описания процессов, протекающих в широком диапазоне пространственных или временных масштабов.

7.2. Вейвлеты

Рассмотрим вейвлеты (всплески) с точки зрения их приложения к описанию излучения и распространения ультракотких импульсов. Преобразования на основе всплесков (всплеск-преобразования) являются альтернативой традиционному преобразованию Фурье. Всплески прекрасно приспособлены для описания процессов, протекающих в широком диапазоне масштабов (пространственных или временных).

Приведем основные свойства вейвлетов, для чего вначале напомним основные свойства рядов Фурье. Рассмотрим пространство $L^2(0, 2\pi)$ квадратично интегрируемых функций $f(t)$, для которых

$$\int_0^{2\pi} |f(t)|^2 dt < \infty. \quad (7.2.1)$$

Любую такую функцию, определенную в интервале $(0, 2\pi)$, можно периодически продолжить на всю ось t с помощью соотношения

$$f(t) = f(t - 2\pi). \quad (7.2.2)$$

Любая периодическая функция разложима в ряд Фурье

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp(int) \quad (7.2.3)$$

с коэффициентами

$$c_n = (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} f(t) \exp(-int) dt, \quad (7.2.4)$$

а функции $\varphi_n(t) = \exp(int)$ образуют ортонормированный полный базис в пространстве $L^2(0, 2\pi)$. Для коэффициентов c_n справедлива теорема Парсиваля, согласно которой

$$\int_0^{2\pi} |f(t)|^2 dt = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2. \quad (7.2.5)$$

Можно ввести принципиально иной полный ортонормированный набор функций, – всплески для представления функций в виде разложения в ряд по соответствующему полному набору. Рассмотрим пространство $L^2(R)$ функций $f(t)$, квадратично интегрируемых на всей

оси, так что

$$E_f = \int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt < \infty. \quad (7.2.6)$$

Таким образом, теперь функции $f(t)$ включаются на $-\infty$ и выключаются на $+\infty$. Рассмотрим, как покрыть всю ось с помощью локализованной функции, которая быстро стремится к нулю. Естественной операцией для этого является сдвиг вдоль оси, а для воспроизведения масштаба неоднородностей – масштабирование аргумента. Возьмем для определенности масштабирования степени 2. Тогда порождаемый набор функций есть $\psi(2^j t - k)$, где j и k – целые числа.

Введем определение нормы $\|p\| = \langle p, p \rangle^{1/2}$ через скалярное произведение

$$\langle p, q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p(t) q^*(t) dt. \quad (7.2.7)$$

Следовательно,

$$\|\psi(2^j t - k)\| = 2^{-j/2} \|\psi\|. \quad (7.2.8)$$

Если порождающая функция ψ нормирована, то нормированные всплески семейства $\{\psi_{jk}\}$ имеют вид

$$\psi_{jk}(t) = 2^{j/2} \psi(2^j t - k). \quad (7.2.9)$$

Семейство $\{\psi_{jk}\}$ образует ортонормированный базис, так что

$$\langle \psi_{jk}, \psi_{lm} \rangle = \delta_{jl} \delta_{km}, \quad (7.2.10)$$

и каждая функция $f \in L^2(R)$ может быть представлена в виде равномерно сходящегося ряда

$$f(t) = \sum_{j,k=-\infty}^{\infty} c_{jk} \psi_{jk}(t). \quad (7.2.11)$$

Можно строить непрерывные аналоги всплеск-преобразований:

$$\tilde{f}(a, b) = a^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \psi^* \left(\frac{t-b}{a} \right) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{ab}^*(t) dt. \quad (7.2.12)$$

Обратное непрерывное преобразование выражается в виде

$$f(t) = C_{\psi}^{-1} \iint \tilde{f}(a, b) \psi_{ab}(t) \frac{da db}{a^2}, \quad (7.2.13)$$

где

$$C_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\psi}(\omega)|^2 \frac{d\omega}{\omega} < \infty, \quad (7.2.14)$$

а $\tilde{\psi}(\omega)$ – преобразование Фурье функции ψ . Неравенство (7.2.14) ограничивает класс функций, которые можно использовать в качестве базиса всплесков. Так, необходимо, чтобы $\tilde{\psi}(0) = 0$ и, следовательно,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) dt = 0. \quad (7.2.15)$$

Все всплески данного семейства $\psi_{ab}(t)$ имеют то же число осцилляций, что и базисный всплеск ψ , поскольку получаются масштабным преобразованием и сдвигом. В этом причина успеха приложения всплеск-преобразований к фрактальному анализу, т. е. к анализу самоподобных структур.

Базисные функции всплесков могут быть построены разными способами, и их рациональный выбор зависит от решаемой задачи. Так, в качестве базисной функции можно выбрать одну из функций, построенных на основе производных от гауссовой функции

$$\psi_m(t) = (-1)^m \frac{d^m}{dt^m} \left[\exp \left(-\frac{t^2}{2} \right) \right], \quad (7.2.16)$$

$$\tilde{\psi}(k) = m(ik)^m \exp \left(-\frac{k^2}{2} \right). \quad (7.2.17)$$

Для $m = 1$ и $m = 2$ такие всплески показаны на рис. 7.1, а,б.

Часто используется базисный всплеск вида

$$\psi(t) = \exp \left(-\frac{t^2}{2} \right) - \frac{1}{2} \exp \left(-\frac{t^2}{8} \right), \quad (7.2.18)$$

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \left[\exp \left(-\frac{k^2}{2} \right) - \exp(-2k^2) \right], \quad (7.2.19)$$

а также

$$\psi(t) = \exp(ik_0 t) \exp \left(-\frac{t^2}{2} \right), \quad (7.2.20)$$

$$\tilde{\psi}(k) = \theta(k) \exp \left[-\frac{(k - k_0)^2}{2} \right]. \quad (7.2.21)$$

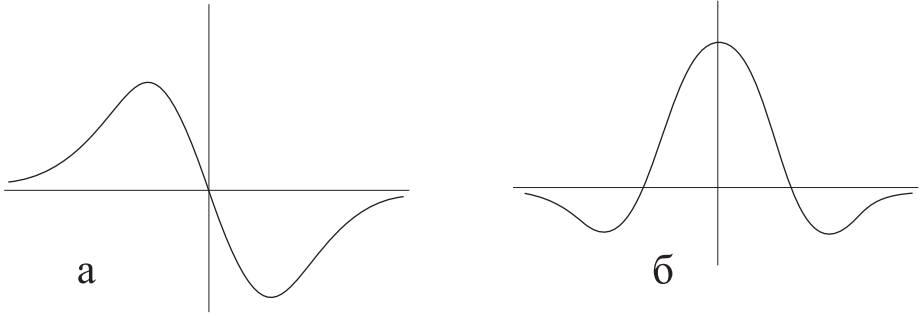


Рис. 7.1. Характерный вид всплесков

В квантовой механике используется всплеск вида

$$\psi(t) = \Gamma(m+1) \frac{i^m}{(1-it)^{m+1}}, \quad (7.2.22)$$

$$\tilde{\psi}(k) = \theta(k) k^m \exp(-k). \quad (7.2.23)$$

Всплеск (7.2.20) учитывает направление распространения и позволяет явно учесть принцип причинности.

Всплески обладают свойством линейности. Обозначим $W[f] = f(a, b)$. Линейность означает

$$W[\alpha f_1(t) + \beta f_2(t)] = \alpha W[f_1] + \beta W[f_2] = \alpha \tilde{f}_1(a, b) + \beta \tilde{f}_2(a, b). \quad (7.2.24)$$

Отсюда следует, например, что всплеск-преобразование вектора осуществляется покомпонентно. Трансляционная инвариантность всплеск-преобразований может быть записана в виде

$$W[f(t - b_0)] = \tilde{f}(a, b - b_0). \quad (7.2.25)$$

Это означает, что дифференцирование можно переносить на изображение

$$W \left[\frac{d}{dt} f(t - b_0) \right] = \frac{\partial}{\partial b} \tilde{f}(a, b - b_0). \quad (7.2.26)$$

Имеется инвариантность по отношению к растяжению:

$$W \left[f \left(\frac{t}{a_0} \right) \right] = \frac{1}{a_0} \tilde{f} \left(\frac{a}{a_0}, \frac{b}{a_0} \right). \quad (7.2.27)$$

Для всплесков существует аналог теоремы Парсеваля

$$\int f_1(t)f_2^*(t) dt = C_\psi^{-1} \int \int \tilde{f}_1(a, b) \tilde{f}_2^*(a, b) \frac{da db}{a^2}. \quad (7.2.28)$$

Следовательно, энергия сигнала может быть вычислена через амплитуды преобразования всплесков в виде

$$E_f = \int f^2(t) dt = C_\psi^{-1} \int \int f^2(a, b) \frac{da db}{a^2}. \quad (7.2.29)$$

Стандартное преобразование Фурье обладает, как уже отмечалось, рядом недостатков. В частности, его невозможно применять к анализу нестационарных сигналов, поскольку для этого требуется знание сигнала на всей оси $t \in (-\infty, +\infty)$, т. е. знание не только прошлого, но и будущего. Кроме того, резкие изменения функции $f(t)$ в частотной области представляются размазанными функциями в спектральной области и плохо идентифицируются. Для преодоления трудностей с анализом ограниченных во времени сигналов часто используют кратковременные или, иначе, оконные преобразования Фурье. Вводится оконная функция $w(t - b)$, которая отлична от нуля в некотором интервале значений t в окрестности b . Параметр b задает сдвиг окна по временной оси. Оконное преобразование Фурье имеет вид:

$$A_b(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)w(t - b)e^{-i\omega t} dt. \quad (7.2.30)$$

Окно можно перемещать, меняя параметр b , и за несколько сдвигов просмотреть весь сигнал. Однако введение оконной функции вносит ошибку в спектр. Нельзя одновременно получить высокое частотное и временное разрешение. Связь между длительностью импульса и шириной спектра определяется соотношением неопределенности Гейзенберга

$$\Delta\omega \cdot \Delta t \geq 2\pi. \quad (7.2.31)$$

Его легко проверить для гауссовского импульса (колокола)

$$f(t) = \exp(-\beta^2 t^2),$$

для которого фурье-образ

$$A(\omega) = \frac{\sqrt{\pi}}{\beta} \exp\left(-\frac{\omega^2}{4\beta^2}\right). \quad (7.2.32)$$

Параметр β определяет форму функции как в пространственной, так и в частотной области. При $\beta \rightarrow \infty$ колокол в исходной временной области сужается до вертикального отрезка, а в частотной области расплывается до малого и почти постоянного значения на большом частотном промежутке. Простейшее окно можно выбрать в виде буквы П - "ступеньки".

Существует некоторое соотношение, которое позволяет по оконному преобразованию восстановить исходный сигнал. Оно лежит в основе применения и непрерывных вейвлет преобразований. Формула обращения для оконного преобразования Фурье имеет вид:

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int \int e^{i\omega t} A_b(\omega) w(t-b) d\omega db. \quad (7.2.33)$$

Для ее доказательства подставим (7.2.30) в (7.2.33). Тогда

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{1}{2\pi} \int \int \int e^{i\omega t} e^{-i\omega\tau} f(\tau) w(\tau-b) w(t-b) d\omega db d\tau = \\ &= f(t) \int w^2(t-b) db = f(t), \end{aligned} \quad (7.2.34)$$

поскольку

$$\frac{1}{2\pi} \int e^{i\omega(t-\tau)} d\omega = \delta(t-\tau),$$

а функция w подобрана так, что

$$\int w^2(t-b) db = 1.$$

Тем самым, формула обращения (7.2.33) доказана. Если мы сужаем окно во временной области, то шире становится окно в спектральной области. Чем шире мы возьмем окно, тем меньше искажений допустим при восстановлении исходного сигнала при обратном преобразовании в рамках одного окна (без интегрирования по b).

Мы рассмотрели восстановление сигнала по оконному преобразованию Фурье. Подобным образом можно произвести прямое и обратное непрерывное вейвлет преобразование. Примем соглашение относительно обозначений преобразования Фурье:

$$\hat{f}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ix\xi} f(x). \quad (7.2.35)$$

Обратное преобразование

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{i\xi x} \hat{f}(\xi). \quad (7.2.36)$$

Прямое непрерывное вейвлет преобразование имеет вид

$$\tilde{f}(a, b) = |a|^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \psi\left(\frac{t-b}{a}\right) dt. \quad (7.2.37)$$

Если $b = 0, a = 1$, то это обычное преобразование Фурье. Обратное вейвлет-преобразование находится с помощью формулы

$$f(x) = c_{\psi}^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da db}{a^2} \tilde{f}(a, b) \psi^{a,b}, \quad (7.2.38)$$

где $\psi^{a,b} = |a|^{-1/2} \psi((x-b)/a)$, ψ – базисная функция, а постоянная

$$c_{\psi} = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} d\xi |\hat{\psi}|^2 |\xi|^{-1}. \quad (7.2.39)$$

Докажем формулу (7.2.38) для обратного вейвлет-преобразования. Для этого покажем сначала, что для двух функций f и g справедливо равенство

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da db}{a^2} \tilde{f}(a, b) \tilde{g}(a, b)^* = c_{\psi}(f, g), \quad (7.2.40)$$

где скалярное произведение

$$(f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) g^*(x) dx, \quad (7.2.41)$$

а символ "*" означает комплексное сопряжение. Если вместо произвольной функции $g(x)$ подставить δ -функцию ($g = \delta(x - x')$), то

$$(f, g) = \int f(x) \delta(x - x') dx = f(x')$$

и

$$\tilde{g}(a, b) = \int \delta(x - x') \psi \left(\frac{x - b}{a} \right) dx = \psi \left(\frac{x' - b}{a} \right).$$

Представим \tilde{f} и \tilde{g} через преобразование Фурье. Если мы докажем (7.2.40), то докажем и (7.2.38). Итак,

$$\begin{aligned} \psi^{a,b}(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi \left(\frac{x - b}{a} \right) e^{-ix\xi} dx = |a| e^{-i\xi b} \hat{\psi}(a\xi) \\ \tilde{f}(a, b) &= \frac{|a|^{1/2}}{\sqrt{2\pi}} \iint dx f(x) \exp(i\xi x) |a| \exp(i\xi b) \psi^*(a\xi) d\xi. \end{aligned} \quad (7.2.42)$$

Учитывая, что

$$\int f(x) e^{i\xi x} dx = \hat{f}(\xi)$$

– преобразование Фурье функции $f(x)$, получим

$$\tilde{f}(a, b) = |a|^{1/2} \int \hat{f}(\xi) e^{-i\xi b} \hat{\psi}^*(a\xi) d\xi, \quad (7.2.43)$$

$$\tilde{g}(a, b) = |a|^{1/2} \int \hat{g}(\xi) e^{-i\xi b} \hat{\psi}^*(a\xi) d\xi.$$

Тогда

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da db}{a^2} \tilde{f}(a, b) \tilde{g}(a, b) = \\ &= \int \int \frac{da db}{a^2} \left[\int d\xi \hat{f}(\xi) |a|^{1/2} e^{ib\xi} \hat{\psi}(a\xi) \right] \times \left[\int d\xi' \hat{g}(\xi') |a|^{1/2} e^{-ib\xi'} \hat{\psi}^*(a\xi') \right]. \end{aligned} \quad (7.2.44)$$

Выражение в первой паре скобок – это фурье-преобразование функции F

$$F_a(\xi) = |a|^{1/2} \hat{f}(\xi) \hat{\psi}^*(a\xi), \quad (7.2.45)$$

умноженное на $(2\pi)^{1/2}$. Вторая скобка – это сопряженное фурье-преобразование

$$G_a(\xi) = |a|^{1/2} \hat{g}(\xi) \hat{\psi}^*(a\xi), \quad (7.2.46)$$

умноженное на $(2\pi)^{1/2}$. Поскольку

$$\int e^{ib(\xi' - \xi)} db = 2\pi \delta(\xi - \xi'), \quad (7.2.47)$$

то интегралы по ξ' и b после интегрирования полностью пропадают. В итоге получим

$$2\pi \int d\xi \hat{f}(\xi) \hat{g}^*(\xi) \int \frac{da}{|a|} \left| \hat{\psi}(a\xi) \right|^2 = c_\psi \langle f, g \rangle, \quad (7.2.48)$$

что доказывает соотношение (7.2.40). Если подставить теперь вместо $g(x)$ функцию Дирака $\delta(x - x')$, то можно восстановить функцию f :

$$f = c_\psi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da db}{a^2} \tilde{f}(a, b) \psi^{a,b}, \quad (7.2.49)$$

где

$$\psi^{a,b}(x) = \psi\left(\frac{x-b}{a}\right). \quad (7.2.50)$$

Тем самым, установлена формула обращения для непрерывных вейвлет-преобразований доказана. Для того, чтобы описанная схема работала, необходимо выполнение соотношения

$$c_\psi = 2\pi \int d\xi |\xi|^{-1} \left| \hat{\psi}(\xi) \right|^2 < \infty, \quad (7.2.51)$$

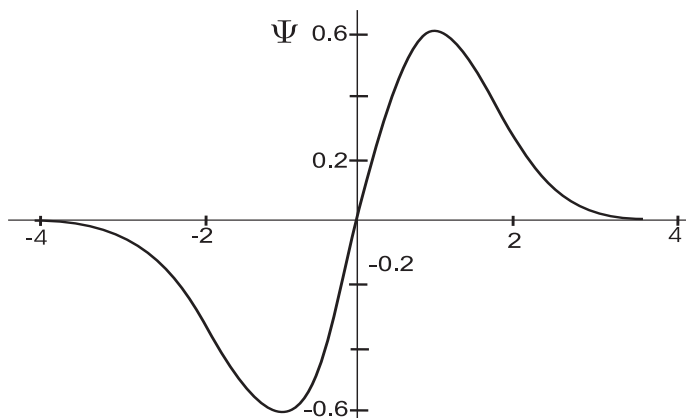
а это ограничивает класс допустимых функций условием $\hat{\psi}(0) = 0$ или

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) dx = 0. \quad (7.2.52)$$

Выполнение этого требования практически достаточно для построения непрерывных вейвлет преобразований.

7.3. Дифракция ультракоротких импульсов

Для описания взаимодействия ультракоротких импульсов с веществом важно правильно представить форму импульса. Оказывается, она зависит не только от генерируемого лазерного импульса, но и от различных направляющих систем. Рассмотрим задачу о дифракции ультракоротких импульсов и их фокусировке. Решение основывается на применении метода Кирхгофа–Зоммерфельда [5] и теории

Рис. 7.2. Вид базового всплеска при $a = 1$ и $b = 0$

всплесков [3, 4]. Классический стационарный метод Кирхгофа решения дифракционных задач состоит в использовании интегральной теоремы, согласно которой значение функции ψ , являющейся решением скалярного уравнения Гельмгольца, в произвольной точке $M(x, y, z)$, находящейся внутри замкнутого объема, выражается через значение функции ψ и её первой производной на поверхности, ограничивающей данный объем. Рассмотрим прохождение плоской электромагнитной волны через квадратное отверстие. В качестве профиля плоской волны рассмотрим волновой всплеск.

В качестве базового всплеска удобно взять, например, одну из функций вида

$$\Psi_m(t) = (-1)^m \partial_t^m \exp(-t^2/2) \quad (7.3.1)$$

при некотором фиксированном m . Выберем базовый всплеск (7.3.1), соответствующий $m = 1$ (рис. 7.2), т. е.

$$\psi_1(t) = \frac{t-b}{a} \exp\left(-\frac{(t-b)^2}{2a^2}\right).$$

Здесь a и b – константы, которые сдвигают и масштабируют всплеск. Он сам похож на характерный ультракороткий импульс. Пусть задано такое начальное распределение импульса по времени. Тогда ему

соответствует плоская волна, распространяющаяся вдоль оси OZ :

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(z - ct) = \frac{(z - ct - b)}{a} \exp\left(-\frac{(z - ct - b)^2}{2a^2}\right). \quad (7.3.2)$$

Импульс произвольной формы может быть разложен по всплескам, дифракция каждого из которых описывается отдельно. Тогда результат дифракции, в силу линейности задачи, будет суперпозицией соответствующих решений для отдельных всплесков с весами исходного разложения. Результат дифракции может быть записан в виде линейной суперпозиции решений, полученных из решения для всплеска путем соответствующих его растяжений и сдвигов.

Подставляя (7.3.2) в нестационарный интеграл Кирхгофа–Зоммерфельда [5], имеем

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial z} \int_{S(V)} \frac{\Psi(\xi, \eta, 0, t - R/c)}{R} dS, \quad (7.3.3)$$

где переменные $\xi, \eta, 0$ представляют собой координаты точек в плоскости диафрагмы, в которых берется значение падающей плоской волны, и по которым ведется интегрирование, $dS = d\xi d\eta$. В силу отмеченной ранее полноты базиса всплесков, импульс иной формы может быть разложен по решениям для отдельных всплесков.

Переменные x, y, z в формуле (7.3.3) представляют собой координаты точки за диафрагмой, в которой ищется значение электромагнитного поля. С учетом (7.3.2) получим

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi a} \frac{\partial}{\partial z} \int_{S(V)} \frac{(R - \tau) \exp(-(R - \tau)^2/2a^2)}{R} dS, \quad (7.3.4)$$

где $\tau = ct + b$.

Для вычисления интеграла воспользуемся дифференцированием интеграла по параметру и представим формулу (7.3.3) в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{a}{2\pi} \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \tau} \int_{S(V)} \frac{\exp(-(R - \tau)^2/2a^2)}{R} dS. \quad (7.3.5)$$

Теперь предположим, что расстояние от исследуемой точки до диафрагмы намного больше размеров диафрагмы, и

$$R \approx r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.$$

Представим вектор \mathbf{R} в виде суммы векторов $\mathbf{R} = \mathbf{r} + \rho\mathbf{e}$, где $\mathbf{r} = (x, y, z)$ – радиус-вектор, проведенный из центра диафрагмы в точку наблюдения поля, \mathbf{e} – единичный вектор, направленный вдоль полярного радиуса. Тогда

$$R = \sqrt{r^2 + \rho^2 - 2\rho(\mathbf{e}, \mathbf{r})} \approx r + \frac{\rho^2 - 2\rho(\mathbf{e}, \mathbf{r})}{2r},$$

$$(R - \tau)^2 = \Delta^2 + \Delta \frac{\rho^2 - 2r\rho \cos \theta}{r} + \frac{(\rho^2 - r\rho \cos \theta)^2}{4r^2}, \quad (7.3.6)$$

где $\Delta = r - \tau$, $\rho = \sqrt{\xi^2 + \eta^2}$. Событие $\Delta = 0$ означает, что в рассматриваемую точку (x, y, z) пришла центральная часть импульса волны от точки $(0, 0, 0)$ на поверхности диафрагмы. В выражении (7.3.6) θ есть угол между векторами \mathbf{r} и \mathbf{e} . Последнее слагаемое сильно осложняет вычисление интеграла (7.3.5). Отбросить его в общем случае нельзя, так как оно само не является малым. Поэтому для проведения расчетов во всем пространстве приходится вычислять интеграл численно. Аналитические результаты можно получить только в приосевой области, правда именно эта область часто представляет наибольший интерес. В ней параметр

$$\beta \approx \frac{\rho^2 - 2\rho(\mathbf{e}, \mathbf{r})}{2r} \approx \frac{\rho^2}{r} \ll 1.$$

В этом приближении

$$(R - \tau)^2 = \left[\Delta^2 + \frac{\Delta}{r} (\rho^2 - 2(x\xi + y\eta)) + \frac{(\rho^2 - 2(x\xi + y\eta))^2}{4r^2} \right],$$

и интеграл в формуле (7.3.5) можно переписать в виде

$$\int \frac{\exp(-(R - \tau)^2/2a^2)}{R} dS =$$

$$= \frac{\exp(-\Delta^2/2a^2)}{r} \int \exp\left(-\frac{\Delta}{2a^2r} \{\rho^2 - 2(x\xi + y\eta)\}\right) d\xi d\eta. \quad (7.3.7)$$

При интегрировании по апертуре квадратной диафрагмы размером $2A \times 2A$ факторизуется вспомогательный интеграл

$$\int \exp[-\alpha(\xi^2 + \eta^2 - 2(x\xi + y\eta))] d\xi d\eta =$$

$$= \int \exp(-\alpha(\xi^2 - 2x\xi)) d\xi \cdot \int \exp(-\alpha(\eta^2 - 2y\eta)) d\eta = I(x) \cdot I(y). \quad (7.3.8)$$

Интегралы, содержащие параметры x и y разделились, они одинаковые, и их можно вычислить отдельно:

$$\begin{aligned} I(x) &= \int_{-A}^A \exp(-\alpha(\xi^2 - 2x\xi)) d\xi = \\ &= \frac{\sqrt{\pi} e^{\alpha x^2}}{2\sqrt{\alpha}} [\operatorname{erf}(\sqrt{\alpha}(A - x)) - \operatorname{erf}(-\sqrt{\alpha}(A + x))] , \end{aligned} \quad (7.3.9)$$

где интеграл ошибок [6]

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt.$$

Тогда

$$\int_{-A}^A d\xi \int_{-A}^A d\eta \frac{\exp(-(R - \tau)^2/2a^2)}{R} = \frac{\exp(-\Delta^2/2a^2)}{r} I(x)I(y),$$

где $I(x)$ определяется формулой (7.3.9), а $\alpha = \Delta^2/2a^2r$. Следовательно, скалярный потенциал

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{a}{2\pi} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \tau} \exp\left(-\frac{\Delta^2}{2a^2}\right) I(x)I(y). \quad (7.3.10)$$

Учитывая, что вся зависимость $I(x), I(y)$ от z и τ содержится в параметре α , производные от интегралов I можно представить в виде

$$\frac{\partial}{\partial z} I(x) = \frac{\partial I(x)}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial z} = I'_\alpha(x) \frac{\partial \alpha}{\partial z}.$$

После вычисления производных получим

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= \frac{a}{2\pi} \exp(-\Delta^2/2a^2) \left[\left(\frac{z}{a^2 r^2} - \frac{\Delta}{a^2 r^2} - \frac{z\Delta^2}{a^4 r^2} \right) I(x)I(y) + \right. \\ &+ \left. \left(\frac{1}{2a^2 r^3} + \frac{\Delta z}{2a^4 r^3} - \frac{\Delta \tau z}{2a^4 r^4} + \frac{z}{2a^2 r^4} \right) (I'_\alpha(x)I(y) + I'_\alpha(y)I(x)) + \right. \end{aligned}$$

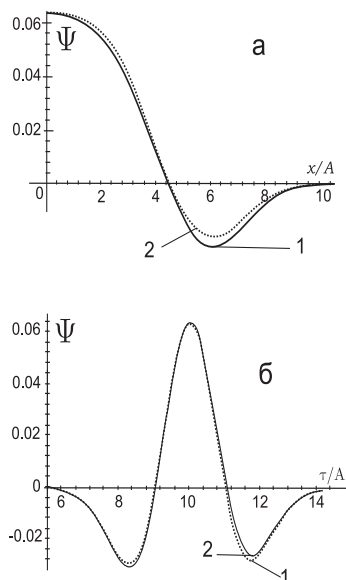


Рис. 7.3. Зависимость поля в точке $(0, 0, 10A)$ а) в поперечном сечении в зависимости от расстояния x/A и б) от параметра времени τ/A : 1 – результат приближенного расчета по формуле (14), 2 – результат прямого численного интегрирования

$$+ \frac{\tau z}{a^4 r^5} \left(I''_{\alpha\alpha}(x)I(y) + 2I'_\alpha(x)I'_\alpha(y) + I(x)I''_{\alpha\alpha}(y) \right) \Big]. \quad (7.3.11)$$

На рис. 7.3, представлены результаты расчетов дифракции [7] для квадратной диафрагмы со стороной $A = 1$ см, полученные прямым численным интегрированием в формуле (7.3.5) и результаты, полученные на основании приближенной формулы (7.3.11). Импульс излучения имел форму всплеска (7.3.2) и параметрами $a = A$, $b = 0$. На рис. 7.3 б показана поперечная зависимость скалярного потенциала поля в точке $(1 A, 1A, 10A)$ за диафрагмой для параметра времени $\tau = ct \in [-10A, 10A]$. Сравнение показывает хорошее согласие обоих методов. Отличия составляют не более трех процентов. Интересно отметить, что временная форма импульса после дифракции, при прямом численном интегрировании, более не симметрична относительно

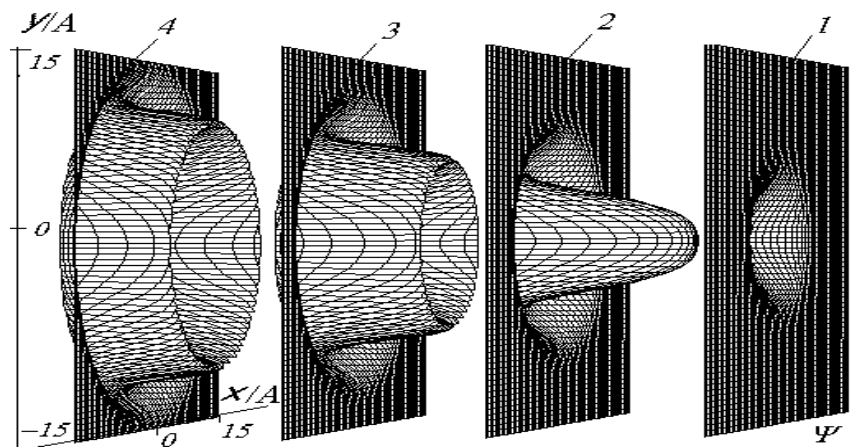


Рис. 7.4. Поперечное распределение поля $\Psi(x, y)$ дифрагированного импульса в плоскости $z = 10A$ в различные моменты времени: 1) $\tau/A = 8$, 2) $\tau/A = 10$, 3) $\tau/A = 12$, 4) $\tau/A = 14$

центра импульса, в отличие от формы, рассчитанной по приближенной аналитической формуле. На рис. 7.4 представлен вид распространяющейся волны на плоскости $z = 10$ в разные моменты времени t . На рисунке видно, что перед максимальным значением скалярного потенциала волны имеется область с противоположным значением скалярного потенциала, которой нет в исходном импульсе (7.3.2). При удалении от оси z величина максимального значения поля уменьшаться. Таким образом, узкая диафрагма дифференцирует исходный импульс.

Другим удобным и универсальным способом решения линейных задач, в которых требуется нахождение отклика системы на произвольное возмущение является построение отклика на δ -импульс, т. е. функции Грина $g(\mathbf{r}, t)$. Рассмотрим прохождение временного δ -импульса через круглое отверстие. Подставляя δ -импульс в нестационарный интеграл Кирхгофа–Зоммерфельда (7.3.4), получим

$$g(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial z} \int_S \frac{\delta(R - \tau)}{R} dS. \quad (7.3.12)$$

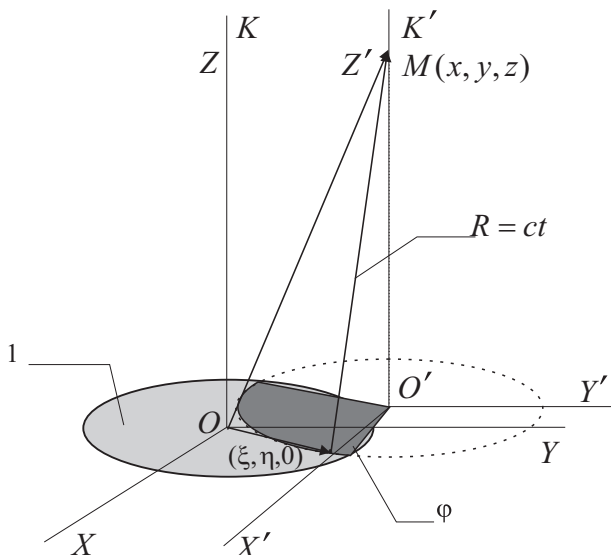


Рис. 7.5. Системы координат K и K' функции Грина g в задаче о прохождении импульса через круглую диафрагму: $M(x, y, z)$ – точка наблюдения поля, 1 – апертура диафрагмы, ϕ – угол наблюдения дуги окружности из центра координат O' системы K'

Выберем новую систему координат K' , начало координат которой совпадает с проекцией точки (x, y, z) на плоскость диафрагмы, ось $O'Z'$ параллельна оси OZ , а ось OX' проходит через центр диафрагмы (рис. 7.5). В этой системе координат $z = z'$, $y = y'$, $qR = \sqrt{\rho'^2 + z^2}$ – расстояние от точки в области диафрагмы до исследуемой точки, а $\rho' = \sqrt{x'^2 + y'^2}$. Тогда

$$dR = \frac{2\rho' d\rho'}{R}. \quad (7.3.13)$$

Переходя в интеграле, входящем в формулу (7.3.12), к интегрированию в полярных координатах ρ', φ' и, воспользовавшись (7.3.13), будем иметь

$$g(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial z} \int \int \delta(R - \tau) d\varphi dR = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial z} \phi. \quad (7.3.14)$$

Здесь ϕ есть угол, под которым видна дуга, вырезаемая диафрагмой из окружности с центром в начале координат системы K' , из ее центра, лежащего в плоскости диафрагмы. Эта дуга представляет собой геометрическое место точек, лежащих в плоскости диафрагмы и удаленных от точки наблюдения поля (x, y, z) на расстояние $\tau = ct$, на которое распространился свет от точек дуги за время t . Выражение (7.3.14) надо понимать в том смысле, что

$$\begin{cases} R &= \tau, \\ \phi &= \phi(\tau). \end{cases} \quad (7.3.15)$$

Найдем аналитическое выражение для ϕ . С учетом симметрии задачи

$$\cos \frac{\phi}{2} = \frac{x'}{\sqrt{x'^2 + y'^2}}.$$

Решим систему уравнений для определения координат пересечения двух окружностей, одна из которых имеет центр в начале координат системы K' и радиус $\sqrt{x'^2 + y'^2}$, а другая центр в начале координат системы K и радиус A :

$$\begin{cases} x'^2 + y'^2 &= \tau^2 - z^2, \\ \left(x' - \sqrt{x^2 + y^2}\right)^2 + y'^2 &= A^2. \end{cases}$$

Раскрывая скобки и вычитая первое уравнение из второго, получаем

$$\tau^2 - z^2 - 2x'\sqrt{x^2 + y^2} + x^2 + y^2 = A^2, \quad (7.3.16)$$

откуда

$$x' = \frac{1}{2} \left(\frac{\tau^2 - z^2 + x^2 + y^2 - A^2}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right), y' = \pm \sqrt{\tau^2 - z^2 - x'^2}. \quad (7.3.17)$$

Условием существования решения является положительность выражения, стоящего под знаком корня в уравнении для y' . Физически ясно, что решение существует, если свет дошел от диафрагмы, в противном случае $\phi = 0$. Таким образом, имеем

$$\phi = \begin{cases} 0, & x'^2 < \tau^2 - z^2, \\ 2 \arccos \left(x' / \sqrt{x'^2 + y'^2} \right), & x'^2 > \tau^2 - z^2. \end{cases} \quad (7.3.18)$$

Если точка наблюдения находится на оси диафрагмы, то для любого момента времени, когда свет успевает прийти от диафрагмы, в силу симметрии угол ϕ , всегда равен 2π . В этом случае

$$\phi = \begin{cases} 0, & \tau^2 - z^2 < 0, \\ 2\pi & x'^2 > \tau^2 - z^2, \\ 0 & x'^2 < \tau^2 - z^2. \end{cases} \quad (7.3.19)$$

Учтем, что полученное выражение необходимо продифференцировать по z , и что дифференциал от единичного скачка является δ -функцией. Тогда скалярный потенциал поля на оси излучения приобретает характер двух δ -импульсов, разнесенных по времени на $\Delta t = (\sqrt{z^2 + A^2} - z)/c$ и противоположных по знаку. При движении точки наблюдения в плоскости перпендикулярной распространению света вид скалярного потенциала меняется. Передний δ -образный импульс размывается, причем это размытие становится максимальным для точек лежащих за границей диафрагмы. Второй импульс не претерпевает сильных изменений. На рисунке 7.6 показана функция Грина g в задаче о прохождении импульса через круглую диафрагму. Система координат K и K' выбрана таким образом, что $M(x, y, z)$ – точка наблюдения поля, 1 – апертура диафрагмы, ϕ – угол наблюдения дуги окружности из центра координат O' системы K' .

Рассмотрение дифракции предельно коротких импульсов на основе нестационарного интеграла Кирхгофа–Зоммерфельда демонстрирует необходимость модификации принципа Гюйгенса–Френеля. В нестационарной форме его можно сформулировать следующим образом: поле, создаваемое в результате дифракции, может быть найдено путем суммирования вкладов от областей волнового фронта, отстоящих от точки наблюдения на фиксированное расстояние, соответствующее времени распространения импульса. Вклад равноудаленных областей фронта берется с одним знаком при положительной производной амплитуды по времени, и с противоположным знаком при отрицательной. В применении к стационарным задачам такое условие означает сдвиг фазы интерферирующих волн на $\pi/2$. Это устраняет известную фазовую неточность стационарной формулировки. При прохождении коротких импульсов через узкую диафрагму число колебаний в импульсе увеличивается на единицу.

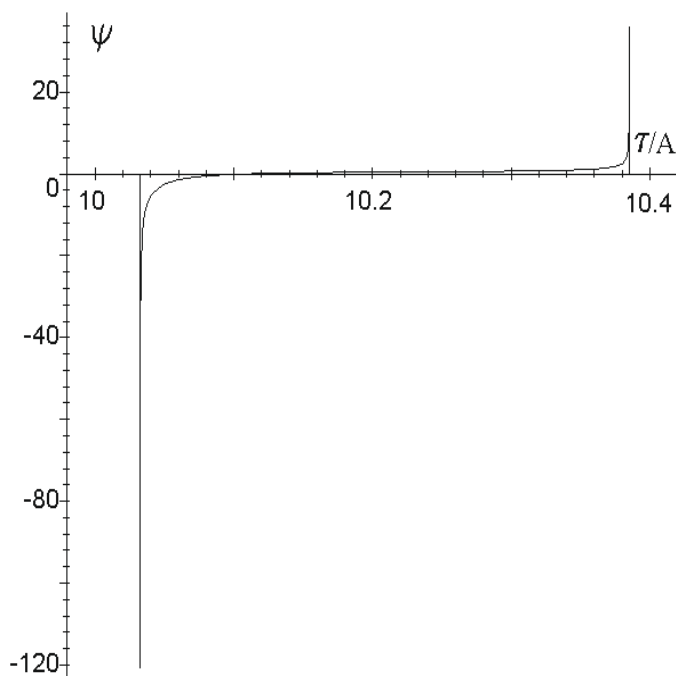


Рис. 7.6. Пространственное распределение функции Грина вдоль оси X в задаче о прохождении плоской волны через диафрагму в момент времени $\tau/A = 10.5$ и $z/A = 10$

7.4. Безабберационная фокусировка импульса

Рассмотрим фокусировку отдельного всплеска [7]. При описании дифракции на основе формулы (7.3.5) мы использовали постоянство значения падающей волны на засвечиваемой апертуре диафрагмы. Соответствующая плоская поверхность имеет уравнение $\zeta = 0$. При рассмотрении фокусировки действие фокусирующего устройства, расположенного в плоскости диафрагмы, сводится к искажению плоского фронта волны и превращению его в сферический. В зависимости от выпуклости сферического фронта, прошедшая волна будет ис-

пытывать фокусировку или дефокусировку. Уравнение сферы, имеющей центр в фокусе оптической системы с радиус-вектором \mathbf{F} есть $\tilde{r}_{\pm} = |\mathbf{r} - \mathbf{F}| = \sqrt{(z \pm F)^2 + x^2 + y^2}$. Здесь знак «+» соответствует фокусировке, а «-» — дефокусировке. Вводя уравнение сферы вместо уравнения плоскости заменой $z - ct \rightarrow \tilde{r}_{\pm} \pm ct - F$ в фазу дифрагирующей волны в уравнении (7.3.3), получим в приближении Зоммерфельда

$$\psi = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial z} \int \frac{\Psi(\tilde{r}_{\pm} \pm ct' - F)}{R} \Big|_{\zeta=0, t'=t-R/c} dS. \quad (7.4.1)$$

Предположим, что фокусное расстояние $F \gg A$, где A — характерные размеры диафрагмы. Тогда расстояние от фокуса (мнимого фокуса) до точки в плоскости диафрагмы можно приближенно записать как

$$\tilde{r}_{\pm} = \sqrt{F^2 + \xi^2 + \eta^2} \approx F + \frac{ds\xi^2 + \eta^2}{2F} = F + \frac{\rho^2}{2F},$$

и (7.4.1) можно переписать в виде

$$\psi = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial z} \int_S \frac{ds \Psi(\rho^2/2F \pm (ct - R))}{dsR} dS. \quad (7.4.2)$$

В пределе при $F \rightarrow \infty$ формула (7.4.2) переходит в формулу (7.4.2) для плоской волны.

Рассмотрим дифракцию всплеска (7.3.2) на круглом отверстии при наличии фокусировки (дефокусировки). Вспомогательный интеграл в (7.4.2) можно представить в виде

$$I = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^A \exp \left(- \left(R - \tau \pm \frac{\rho^2}{2F} \right)^2 / 2a^2 \right) \rho d\rho. \quad (7.4.3)$$

Здесь знак «+» соответствует дефокусировке, а «-» — фокусировке. В приосевом приближении, также, как и в случае без фокусировки, аргумент функции в подынтегральном выражении можно представить в виде

$$R - \tau \pm \frac{\rho^2}{2F} \approx \Delta + \frac{\gamma\rho^2 - 2\rho \cos \theta}{2r}.$$

Здесь $\gamma = 1 \pm r/F$ – параметр фокусировки, в котором знак « $-$ » соответствует фокусированию. Разложим подинтегральное выражение формулы (7.4.3) в ряд по параметру малости $\cos \theta$:

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{(R - \tau \pm \rho^2/2F)^2}{2a^2}\right) &= \exp\left(-\frac{(\gamma\Delta + \gamma\rho^2/2r)^2}{2a^2}\right) + \\ &+ \frac{\rho}{a^2} (\Delta + \gamma\rho^2/2r) \exp\left(-\frac{(\Delta + \gamma\rho^2/2r)^2}{2a^2}\right) \cos \theta + \dots \end{aligned} \quad (7.4.4)$$

Как и в плоском случае, интеграл от второго слагаемого уравнения (7.4.4) пропадает. В результате имеем

$$I_f = 2\pi \left[\frac{ar}{\gamma} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left\{ \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}(\gamma A^2 + 2\Delta r)}{4ar}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\Delta}{a\sqrt{2}}\right) \right\} \right]. \quad (7.4.5)$$

Индекс у символа I_f указывает на наличие фокусировки. Проводя дифференцирование получим ответ для ψ :

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= -\frac{az}{\gamma r} \left(\frac{1}{\gamma F} - \frac{\Delta}{a^2} \right) \exp\left(-\frac{\delta^2}{2a^2}\right) + \\ &+ \frac{az}{\gamma r} \left[\frac{(\gamma A^2 + 2\Delta r)}{4a^2 r} \left(2 + \frac{2\Delta}{r} - \frac{A^2}{rF} \right) - \right. \\ &\left. - \frac{1}{4a^2 r^3} (\gamma A^2 + 2\Delta r)^2 - \frac{1}{\gamma F} \right] \exp\left(\frac{(\gamma A^2 + 2\Delta r)}{8a^2 r^2}\right). \end{aligned} \quad (7.4.6)$$

Полученное выражение описывает фокусировку импульса, если F учитывать со знаком « $-$ » и дефокусировку в случае противоположного знака. На рис. 7.7 представлены результаты расчета поля вблизи фокуса и нефокусированного импульса, прошедшего то же входное отверстие. Видно, что нефокусированный импульс разбился на два всплеска, тогда как сфокусированный представляет собой один импульс. Полученный результат можно прояснить с помощью понятия «зон Френеля». Разность фаз источников вторичных волн в плоскости диафрагмы, вносимая фокусатором в фокусе полностью компенсирует оптическую разность хода от разных точек на диафрагме до фокуса. Для наблюдателя, находящегося в фокусе (случай фокусировки) это

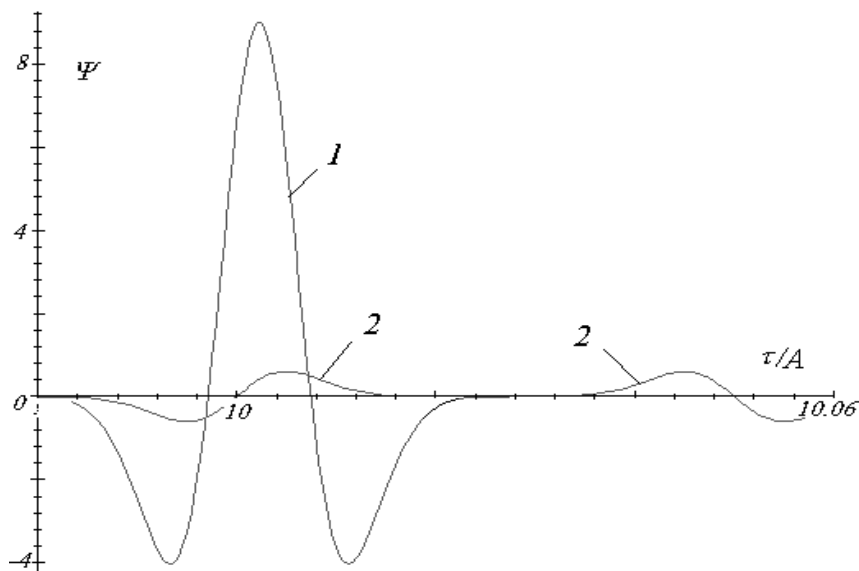


Рис. 7.7. Сравнение временной зависимости поля Ψ фокусированного (1) и нефокусированного (2) импульса вблизи фокуса

означает, что диафрагма выступает как одна «зона Френеля». Следовательно, форма импульса не должна искажаться. При удалении от фокуса подобная компенсация пропадает и форма импульса искажается, так же как в случае дифракции без фокусировки.

В [8] рассмотрено распространение ультракороткого лазерного импульса протяженностью в несколько осцилляций в прямоугольном зеркальном волноводе с идеально проводящими стенками. Если размеры импульса превышают поперечные размеры волновода, то в волновод проникает лишь незначительная его часть, соответствующая высокочастотным составляющим спектра импульса. Это отражает факт существования минимальной частоты, при которой в волноводе возможно распространение монохроматической волны. Важно отметить, что процедура расчета распространения импульса остается сходной и при выборе волновода не прямоугольного сечения, однако в этом случае поперечные моды не будут описываться простыми функциями типа синуса и косинуса. Разработанный метод может быть также использован

при расчете прохождения широкополосных лазерных импульсов в оптических световодах и распространении плазмонов в наноразмерных структурах [9].

При рассмотрении задачи распространения импульса в волноводе введение векторов Герца позволяет заменить исходную векторную задачу совокупностью скалярных задач для разных типов волн. Линейность задачи позволяет свести её методом Фурье к подзадачам на распространение отдельных мод. Наличие минимальной граничной частоты распространения волны в волноводе приводит к искажению спектра исходного импульса, и, как следствие, к изменению его формы. Качественная картина распространяющегося в волноводе импульса с достаточно высокими характерными частотами выглядит как последовательное падение и отражение импульса от стенок волновода. Фактически ситуация значительно сложнее, поскольку в процессе распространения импульса происходит его дисперсионное распыление, так как разные моды имеют разные фазовые скорости. Поэтому для использования волноводов при передаче ультракоротких импульсов без искажений необходимы достаточно широкие волноводы без дисперсии, либо волноводы, в которых дисперсионное распыление импульса компенсируется нелинейным сжатием, как это широко применяется в нелинейной оптике для более длинных импульсов.

Литература

1. *Крюков П.Г.* Лазеры ультракоротких импульсов и их применения. – Долгопрудный: Изд. дом «Интеллект», 2012.
2. *Agostini P., DiMauro F.* The physics of attosecond light pulses // Rep. Prog. Phys. 2004. V. 67. P. 813Ц855.
3. *Блаттер К.* Вейвлет-анализ. Основы теории. – М.: Техносфера, 2004.
4. *Астафьева Н.М.* Вейвлет-анализ: основы теории и примеры применения // УФН. 1996. Т. 166. С. 1145–1170.
5. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1970.

6. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. – М.: Наука, 1979.
7. Михайлов Е.М., Головинский П.А. Описание дифракции ультракороткого импульса на основе метода Зоммерфельда // ЖЭТФ. 2000. Т. 117. С. 275–285.
8. Михайлов Е.М., Головинский П.А. Распространение ультракороткого импульса лазерного излучения в волноводе прямоугольного сечения // Оптика и спектроскопия. 2003. Т. 94. С. 341–344.
9. Майер С.А. Плазмоника: Теория и приложения. – М.–Ижевск: НИЦ «РХД», 2011.

Глава 8

Взаимодействие ультракоротких лазерных импульсов с веществом

8.1. Фотовозбуждение вещества ультракороткими импульсами

Развитие техники генерации ультракоротких импульсов электромагнитного излучения делает актуальным рассмотрение специфических особенностей его взаимодействия с веществом и развитие адекватных способов описания соответствующих электромагнитных процессов. Использование ультракоротких лазерных импульсов открывает новые возможности в сверхбыстром контроле светоиндуцированных явлений, аттосекундной метрологии, спектроскопии, микроскопии и плазмоники. В рамках применимости теории возмущений в случае воздействия на вещество относительно длинных импульсов излучения отклик на электромагнитное воздействие обычно описывается с помощью вероятности фотопроцесса в единицу времени w .

Вероятность в единицу времени может быть определена через сечение σ фотопроцесса по формуле

$$w = \int \sigma(\omega') \frac{I(\omega')}{\omega'} d\omega', \quad (8.1.1)$$

где $I(\omega')$ – спектральная интенсивность излучения, которая для монохроматического поля частоты ω равна $I(\omega') = I_0 \delta(\omega - \omega')$, I_0 – интегральная интенсивность. Отметим, что сечение $\sigma(\omega')$ отвечает воздействию монохроматического поля на заданной частоте ω' , интегрирование по частотам в правой части равенства (8.1.1) учитывает немонохроматичность излучения. Если длительность импульса существенно превосходит период колебаний на несущей частоте $T = 2\pi/\omega$, спектральная интенсивность излучения определяется через автокоррелятор напряженности электрического поля по формуле

$$I(\omega') = \frac{c}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \langle F_i(t) F_i(t+\tau) \rangle_t \exp(i\omega'\tau) d\tau, \quad (8.1.2)$$

где символ $\langle \dots \rangle_t$ означает усреднение по времени.

При переходе к ультракоротким импульсам, состоящим из малого числа оптических циклов или даже части цикла, понятие вероятности фотопроцесса в единицу времени становится неадекватным ситуации, и больший физический смысл приобретает описание электромагнитного взаимодействия с помощью полной вероятности за все время действия импульса [1, 2]. Итак, для ультракоротких импульсов формулы (8.1.1), (8.1.2) не работают. Для описания процессов в ультракоротких полях в рамках теории возмущений целесообразно обобщить равенство (8.1.1) на вычисление полной вероятности фотопроцесса w за все время действия ультракороткого импульса, причем таким образом, чтобы сохранить описание свойств возбуждаемой системы с помощью сечения $\sigma(\omega')$.

Рассмотрим фотовозбуждение квантовой системы из основного состояния $|0\rangle$ в некоторое возбужденное состояние $|n\rangle$ под действием дипольного возмущения

$$\hat{V}(t) = -\hat{d}_i F_i(t), \quad (8.1.3)$$

где $\hat{\mathbf{d}}$ – оператор электрического дипольного момента системы, $\mathbf{F}(t)$ – напряженность электрического поля, которая подразумевается клас-

сической величиной, не зависящей от пространственной координаты (дипольное приближение). Амплитуда этого процесса в первом порядке теории возмущений за все время действия поля равна:

$$c_{n0} = -i \int_{-\infty}^{\infty} \langle n | \hat{d}_i(t) | 0 \rangle F_i(t) dt, \quad (8.1.4)$$

где $\hat{d}_i(t) = \exp(i \hat{H}_0 t) d_i \exp(-i \hat{H}_0 t)$ – оператор дипольного момента в представлении взаимодействия, \hat{H}_0 – невозмущенный гамильтониан системы.

Для вероятности фотовозбуждения системы за все время действия возмущения на переходе $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$ имеем:

$$w_{n0} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle 0 | \hat{d}_i(t') | n \rangle \langle n | \hat{d}_k(t) | 0 \rangle F_i(t') F_k(t) dt dt'. \quad (8.1.5)$$

Полная вероятность фотовозбуждения, учитывающая переходы во все состояния системы, равна:

$$w_{tot} = \sum_n w_{n0} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle 0 | \hat{d}_i(t') \hat{d}_k(t) | 0 \rangle F_i(t') F_k(t) dt dt'. \quad (8.1.6)$$

При выводе (8.1.6) из (8.1.5) была использована полнота набора функций $|n\rangle$ и учтено, что $\langle 0 | \hat{d}_i(t) | 0 \rangle = 0$ для сферически симметричной системы, так что в сумму (8.1.6) для соблюдения условия полноты можно включить слагаемое, отвечающее неизменному состоянию системы w_{00} .

Учтем теперь, что коррелятор дипольных моментов стационарной в невозмущенном состоянии системы зависит только от разности моментов времени $\tau = t' - t$: $K_{ik}(\tau) = \langle 0 | \hat{d}_i(t') \hat{d}_k(t) | 0 \rangle$, в чем легко убедиться непосредственно. Тогда формулу (8.1.6) можно переписать в виде

$$w_{tot} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(\tau) F_i(t + \tau) F_i(t) dt d\tau. \quad (8.1.7)$$

Здесь учтено, что для центрально-симметричной системы $K_{ik}(\tau) = \delta_{ik} K(\tau)$, где $K(\tau) = K_{ii}(\tau)/3$. Переходя в равенстве (8.1.7) к фурье-

образам подынтегральных функций по формуле

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega') \exp(i\omega' t) \frac{d\omega'}{2\pi},$$

получаем

$$w_{tot} = \frac{2\pi}{c} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(\omega') I(\omega', t) d\omega' dt, \quad (8.1.8)$$

где введена функция

$$I(\omega', t) = \frac{c}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} F_i(t) F_i(t + \tau) \exp(i\omega' \tau) d\tau. \quad (8.1.9)$$

Функция (8.1.9) может быть названа спектральной плотностью мгновенной интенсивности излучения. Фурье-образ коррелятора дипольных моментов равен по определению

$$K(\omega) = \frac{1}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \langle 0 | \hat{d}_i(t) \hat{d}_i(t + \tau) | 0 \rangle \exp(i\omega \tau) d\tau. \quad (8.1.10)$$

Исходя из формулы (8.1.9), несложно доказать равенство

$$\int_{-\infty}^{\infty} I(\omega', t) dt = \frac{c}{(2\pi)^2} |\mathbf{F}(\omega')|^2. \quad (8.1.11)$$

Подставляя выражение (8.1.11) в правую часть равенства (8.1.8), получаем

$$w_{tot} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\omega') |\mathbf{F}(\omega')|^2 d\omega'. \quad (8.1.12)$$

Рассмотрим случай монохроматического поля $\mathbf{F}(t) = \mathbf{F}_0 \cos(\omega t)$, когда средняя по периоду $T = 2\pi/\omega$ интенсивность равна:

$$\langle I(\omega', t) \rangle_T = I_0 \delta(\omega - \omega') \langle 1 + \exp(-2i\omega t) \rangle_T = I_0 \delta(\omega - \omega'), \quad (8.1.13)$$

где $I_0 = c\mathbf{E}_0^2/8\pi$. Учитывая равенство (8.1.13) и интегрируя в (8.1.8) по конечному временному интервалу Δt , находим:

$$w_{tot} = \frac{2\pi}{c} K(\omega) I_0 \Delta t, \quad (8.1.14)$$

откуда можно перейти к вероятности фотовозбуждения в единицу времени

$$w_{tot} = \frac{2\pi}{c} K(\omega) I_0. \quad (8.1.15)$$

С другой стороны, по определению сечения фотопоглощения в монохроматическом поле частоты ω , имеем:

$$w_{tot} = \sigma(\omega) \frac{I_0}{\omega}. \quad (8.1.16)$$

Величина I_0/ω – представляет собой плотность потока фотонов монохроматического излучения. Сравнивая формулы (8.1.15) и (8.1.16), находим выражение для фурье-образа коррелятора дипольных моментов через сечение фотопоглощения в дипольном приближении:

$$K(\omega) = \frac{c}{2\pi\omega} \sigma(\omega). \quad (8.1.17)$$

Отсюда следует важная формула для сечения фотопоглощения:

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi\omega}{c} K(\omega). \quad (8.1.18)$$

Подставляя (8.1.17) в (8.1.12), получаем выражение для полной вероятности рассматриваемого процесса за все время действия импульса излучения. Поскольку речь идет о фотопоглощении, при интегрировании в (8.1.12) нужно ограничиться только положительными частотами, так что окончательно находим [1]:

$$w_{tot} = \frac{c}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \sigma(\omega') \frac{|\mathbf{F}(\omega')|^2}{\omega'} d\omega'. \quad (8.1.19)$$

Для сечения фотопоглощения можно написать равенство

$$\sigma(\omega') = \frac{2\pi^2 e^2}{c} \left\{ \sum_{n>0} f_{n0} G_{n0}(\omega') + g_{c0}(\omega') \right\} = \sum_n \sigma_{n0}(\omega') + \sigma_{c0}(\omega'), \quad (8.1.20)$$

в котором выделен вклад в полное сечение дискретного спектра (сумма по n) и непрерывного спектра (второе слагаемое в фигурных скобках). Здесь f_{n0} – силы осцилляторов, $G_{n0}(\omega')$ – спектральная форма линии на переходе $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$, $g_{c0}(\omega')$ – спектральная функция дипольного возбуждения в непрерывный энергетический спектр. В правую часть (8.1.20) входят: $\sigma_{n0}(\omega')$ – сечение фотовозбуждения дискретного уровня энергии, а $\sigma_{c0}(\omega')$ – сечение возбуждения состояния

в непрерывном спектре. С учетом (8.1.20) из (8.1.19) можно получить следующее выражение для полной вероятности фотовозбуждения n -го состояния дискретного спектра:

$$w_{n0} = \frac{c}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \sigma_{n0}(\omega') \frac{|\mathbf{F}(\omega')|^2}{\omega'} d\omega' \quad (8.1.21)$$

или

$$w_{n0} = \frac{f_{n0}}{2} \int_0^\infty G_{n0}(\omega') \frac{|\mathbf{F}(\omega')|^2}{\omega'} d\omega'. \quad (8.1.22)$$

Полученные выражения (8.1.21), (8.1.22) справедливы в рамках применимости теории возмущений, когда $W_{n0} < 1$.

В случае, когда спектральная ширина импульса $\Delta\omega \propto 1/\Delta t$ много больше спектральной ширины связанно-связанного перехода $\Delta\omega \gg \Delta\omega_{n0}$, функцию формы линии можно заменить на дельта-функцию $G_{n0}(\omega') \rightarrow \delta(\omega_{n0} - \omega')$. Тогда формула (8.1.21) с учетом выражения для силы осциллятора ($f_{n0} = 2\omega_{n0} |\mathbf{d}_{n0}|^2/3$) приводит к простому выражению для вероятности фотоперехода

$$w_{n0} = |\Omega(\omega_{n0})|^2, \quad (8.1.23)$$

где $\Omega(\omega_{n0}) = \mathbf{d}_{n0} \mathbf{F}(\omega_{n0})$ – фурье-образ мгновенной частоты Раби, вычисленный на собственной частоте возбуждаемого перехода. Равенство (8.1.23), естественно, можно получить напрямую в 1-м порядке теории возмущений по напряженности электрического поля с помощью формул (8.1.4), (8.1.5).

Для вероятности возбуждения произвольного состояния в непрерывном спектре за все время действия импульса поля из (8.1.19), (8.1.20) находим:

$$w_{c0} = \frac{c}{(2\pi)^2} \int_{I_P}^\infty \sigma_{c0}(\omega') \frac{|\mathbf{F}(\omega')|^2}{\omega'} d\omega', \quad (8.1.24)$$

где I_P – потенциал ионизации рассматриваемой системы. Для дифференциальной вероятности фотовозбуждения в состояние непрерывного спектра с энергией ε из (8.1.24) можно получить соотношение

$$\frac{dw}{d\omega_{\varepsilon 0}} = \frac{c}{(2\pi)^2} \sigma_{c0}(\omega_{\varepsilon 0}) \frac{|\mathbf{F}(\omega_{\varepsilon 0})|^2}{\omega_{\varepsilon 0}}, \quad (8.1.25)$$

где $\omega_{\varepsilon 0} = (I_P + \varepsilon)$ – частота перехода в заданное состояние непрерывного спектра. Формула (8.1.25) получается из (8.1.24) с помощью подстановки дельта-функции $\delta(\omega_{\varepsilon 0} - \omega')$ в подынтегральное выражение правой части равенства (8.1.24). Эта подстановка выделяет переход системы из основного состояния в состояние непрерывного спектра с заданной энергией $|0\rangle \rightarrow |\varepsilon\rangle$.

Для произвольного фотоиндуцированного процесса в квазимонохроматическом поле можно записать следующее выражение для вероятности в единицу времени через сечение процесса:

$$w_{tot}(t) = \int_0^{\infty} \sigma(\omega') \frac{I(\omega', t)}{\omega'} d\omega'. \quad (8.1.26)$$

Здесь сечение $\sigma(\omega')$ может описывать не только фотопоглощение, но и другие фотопроцессы, такие как рассеяние, вынужденное тормозное излучение и вынужденная фоторекомбинация. Интегрируя равенство (8.1.26) по времени, получаем для вероятности за все время действия импульса:

$$w = \int_{-\infty}^{\infty} w(t) dt = \int_0^{\infty} \sigma(\omega') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I(\omega', t)}{\omega'} dt d\omega'. \quad (8.1.27)$$

Отсюда с учетом (8.1.11) приходим к формуле (8.1.19).

В случае квазимонохроматического поля можно записать аналогично (8.1.21) – (8.1.25) выражение для энергии электромагнитного импульса, поглощаемой квантовой системой за все время взаимодействия с излучением:

$$\Delta E = \int_{-\infty}^{\infty} Q(t) dt = \int_0^{\infty} \sigma(\omega') \int_{-\infty}^{\infty} I(\omega', t) dt d\omega'. \quad (8.1.28)$$

Отсюда находим

$$\Delta E = \frac{c}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} \sigma(\omega') |\mathbf{F}(\omega')|^2 d\omega'. \quad (8.1.29)$$

С помощью формул (8.1.19), (8.1.25) можно описать не только фотопоглощение в ультракоротком импульсе, но и другие фотопроцессы,

такие как рассеяние излучения, а также вынужденный тормозной эффект. Для этого необходимо в правую часть равенства (8.1.19) подставить соответствующее сечение.

Рассмотрим фотовозбуждение системы под действием лазерного импульса, в котором напряженность электрического поля изменяется по закону (импульс с гауссовой огибающей):

$$\mathbf{F}(t) = \mathbf{F}_0 \exp(-t^2/\Delta t^2) \cos(\omega t + \varphi), \quad (8.1.30)$$

где \mathbf{F}_0 – амплитуда, ω – несущая частота, φ – фаза, Δt – параметр, пропорциональный длительности импульса Δt_p .

Фурье-образ поля (8.1.30) имеет вид:

$$F(\omega') = F_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Delta t \left\{ \exp \left[-i\varphi - \frac{(\omega - \omega')^2 \Delta t^2}{4} \right] + \exp \left[i\varphi - \frac{(\omega + \omega')^2 \Delta t^2}{4} \right] \right\}. \quad (8.1.31)$$

Длительность импульса Δt_p естественно определить как отношение вероятности за все время действия импульса W к вероятности в единицу времени w для одной и той же формы импульса в пределе больших длительностей ($\Delta t_p \gg \omega^{-1}$):

$$\Delta t_p \leftarrow \frac{W}{w}. \quad (8.1.32)$$

Тогда для поля (8.1.30) можно получить связь между параметром Δt и длительностью импульса Δt_p :

$$\Delta t_p = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Delta t \cong 1.253 \Delta t. \quad (8.1.33)$$

При выводе равенства (8.1.33) был использован предельный переход (при $\Delta t \rightarrow \infty$) в фурье-образе импульса (8.1.31):

$$|\mathbf{F}(\omega')|^2 \rightarrow (\pi/2)^{3/2} \mathbf{F}_0^2 \Delta t \delta(\omega - \omega'),$$

откуда с помощью формулы (8.1.12) получаем

$$W_{tot} \rightarrow \sqrt{\pi/2} (K(\omega)/4^2) \mathbf{F}_0^2 \Delta t.$$

Сравнивая последнее соотношение с выражением для скорости фотовозбуждения в монохроматическом поле $w = (K(\omega)/4^2) \mathbf{F}_0^2$, на основании определения (8.1.32) приходим к равенству (8.1.33).

Введем в рассмотрение число циклов в импульсе n_c :

$$n_c = \frac{\Delta t_p}{T} = \frac{\omega \Delta t_p}{2\pi}, \quad (8.1.34)$$

где $T = 2\pi/\omega$ – период колебания на несущей частоте. С помощью (8.1.33) получаем для параметра Δt , фигурирующего в формулах (8.1.30), (8.1.31), следующее выражение через число циклов в импульсе:

$$\Delta t = \frac{2\sqrt{2\pi} n_c}{\omega}. \quad (8.1.35)$$

В дальнейшем будем рассматривать сверхкороткие импульсы, для которых число циклов на несущей частоте $n_c \sim 1$ и меньше.

Квадрат модуля фурье-образа поля (8.1.31), который определяет согласно (8.1.19) вероятность фотовозбуждения за все время действия излучения, выраженный через число циклов, имеет вид

$$|E(\omega')|^2 = 2\pi^2 \left(\frac{n_c E_0}{\omega} \right)^2 G_E(\omega', \omega, n_c) [1 + K_{ph}(\omega', \omega, n_c) \cos(2\varphi)], \quad (8.1.36)$$

где

$$G_E(\omega', \omega, n_c) = \exp \left[-4\pi n_c^2 \left(1 - \frac{\omega'}{\omega} \right)^2 \right] + \exp \left[-4\pi n_c^2 \left(1 + \frac{\omega'}{\omega} \right)^2 \right], \quad (8.1.37)$$

$$K_{ph}(\omega', \omega, n_c) = \operatorname{sech} \left(8\pi n_c^2 \frac{\omega'}{\omega} \right). \quad (8.1.38)$$

Для вероятности возбуждения дискретного уровня энергии за все время действия импульса имеем

$$w_{n0} = 2\pi^2 \left(\frac{d_{n0} F_0}{\omega} n_c \right)^2 G_E(\omega_{n0}, \omega, n_c) [1 + K_{ph}(\omega_{n0}, \omega, n_c) \cos(2\varphi)] \quad (8.1.39)$$

в предположении, что $w_{n0} < 1$. Как видно из последнего равенства, функция $G_E(\omega_{n0}, \omega, n_c)$ описывает спектральную форму линии возбуждения связанно-связанного перехода, а $K_{ph}(\omega_{n0}, \omega, n_c)$ является коэффициентом фазовой модуляции, поскольку определяет степень зависимости вероятности процесса от фазы.

Из полученного выражения (8.1.39) следует, что в условиях справедливости теории возмущений зависимость полной вероятности фотовозбуждения связанно-связанного перехода под действием импульса (8.1.30) от фазы дается функцией $\cos(2\varphi)$. Из численного анализа правой части равенства (8.1.38) вытекает, что коэффициент фазовой модуляции имеет заметную величину только для субцикловых импульсов: $n_c < 0.5$. Для фиксированного значения параметра n_c коэффициент K_{ph} возрастает с увеличением несущей частоты ω , при этом в соответствии с выражением для спектральной функции возбуждения (8.1.37) уменьшается величина вероятности процесса. Спектральная функция $G_E(\omega_{n0}, \omega, n_c)$ заметно отличается от гауссовой зависимости тоже для весьма коротких субцикловых импульсов $n_c < 0.5$, причем при $n_c < 0.2$ данная функция монотонно убывает с ростом отношения ω_{n0}/ω .

В пределе импульса нулевой длительности ($\Delta t \rightarrow 0$), когда $F(\omega') \rightarrow \sqrt{\pi} F_0 \Delta t \cos \varphi$, равенство (8.1.19) преобразуется к виду

$$w_{tot} = \frac{c}{4\pi} (F_0 \Delta t)^2 \cos^2 \varphi \int_0^\infty \frac{\sigma(\omega')}{\omega'} d\omega'. \quad (8.1.40)$$

Таким образом, в этом случае полная вероятность фотопоглощения определяется интегралом по частоте от отношения $\sigma(\omega')/\omega'$. При этом зависимость от фазы дается функцией $\cos^2 \varphi$, что соответствует формуле (8.1.39), поскольку $K_{ph} \rightarrow 1$ при $\Delta t \rightarrow 0$.

Для полной поглощенной энергии за все время действия импульса в пределе $\Delta t \rightarrow 0$ из (8.1.29) вытекает следующее равенство

$$\Delta E = \frac{\pi}{2} N_e r_e (c \Delta t)^2 F_0^2 \cos^2 \varphi, \quad (8.1.41)$$

где $r_e = 1/c^2$ – классический радиус электрона, N_e – число электронов в атоме. При выводе (8.1.41) было использовано правило сумм

для сечения фотопоглощения:

$$\int_0^{\infty} \sigma(\omega') d\omega' = \frac{2\pi^2}{c} N_e. \quad (8.1.42)$$

Формулы (8.1.40), (8.1.41) справедливы в рамках применимости теории возмущений, когда $w_{tot} < 1$. Как следует из (8.1.19), предел нулевой длительности импульса реализуется при выполнении неравенства $\Delta t < 1/\Delta\omega_a$, где $\Delta\omega_a$ – частотный интервал, дающий основной вклад в интегральное по частоте сечение процесса.

Таким образом, в данном разделе выведены формулы (8.1.19) и (8.1.27), выражающие полную вероятность фотопроцесса за все время действия излучения через сечение этого процесса и фурье-образ напряженности электрического поля излучения. Полученные равенства описывают фотопроцесс, индуцированный ультракоротким электромагнитным импульсом, когда неприменимы понятия вероятности в единицу времени и интенсивности излучения. Полученные выражения могут быть использованы в расчетах излучательных явлений в рамках справедливости теории возмущений. С их помощью было установлено, что фазовый контроль фотопроцесса в дискретном спектре за счет изменения фазы несущей импульса возможен только для субцикловых возбуждающих импульсов.

8.2. Фазовые эффекты при фотовозбуждении двухуровневой системы ультракоротким импульсом

В случае резонансного воздействия на оптический переход достаточно интенсивного излучения для описания поведения квантовой системы может оказаться недостаточным использование теории возмущений. Зависимость населенностей от времени носит осциллирующий характер в виде осцилляций Раби. Существует наглядный способ описания временных осцилляций характеристик двухуровневой системы, обладающей ненулевым электрическим дипольным моментом перехода, с помощью вращения трехмерного вектора в некотором математи-

ческом пространстве. Этот способ заимствован из физики магнитного резонанса, когда указанный вектор представляет собой магнитный момент, а пространство является обычным геометрическим. При переходе к рассмотрению взаимодействия оптического излучения с двухуровневой системой роль магнитного момента играет электрический дипольный момент, и трехмерный вектор, изображающий двухуровневую систему, называется оптическим вектором Блоха.

Математическое определение оптического вектора Блоха \mathbf{R} удобно дать с использованием матриц Паули σ_j как среднее по состоянию двухуровневой системы $|t\rangle$:

$$|t\rangle = a_1(t) |1\rangle + a_2(t) |2\rangle, \quad (8.2.1)$$

где $|1\rangle$, $|2\rangle$ – кет-векторы Дирака, обозначающие нижнее и верхнее энергетические состояния. Энергии этих состояний равны E_1 , E_2 , а собственная частота – $\omega_0 = (E_2 - E_1)$ (рис. 8.1). Коэффициенты разложения $a_{1,2}(t)$ являются комплексными функциями, определяющими временную зависимость состояния квантовой системы. По предположению электрический дипольный момент перехода $d_0 \equiv \langle 2|\hat{d}|1\rangle$ не равен нулю. В дальнейшем будем опускать векторные обозначения у дипольного момента, предполагая напряженность электрического поля параллельной оси z . Формула (8.2.1) представляет собой разложение произвольного состояния двухуровневой системы по стационарным состояниям, в которых сохраняется энергия системы.

Эволюция состояний двухуровневой системы можно описать, используя матрицы Паули, применяемые, обычно, для частиц со спином $1/2$:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8.2.2)$$

Матрицы Паули удовлетворяют важному коммутационному соотношению:

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \quad (8.2.3)$$

где $[\hat{a}, \hat{b}] = \hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}$ – коммутатор; ε_{ijk} – абсолютно антисимметричный тензор третьего ранга (символ Леви–Чевита), равный нулю, если хотя бы два его индекса совпадают, единице, если они представляют

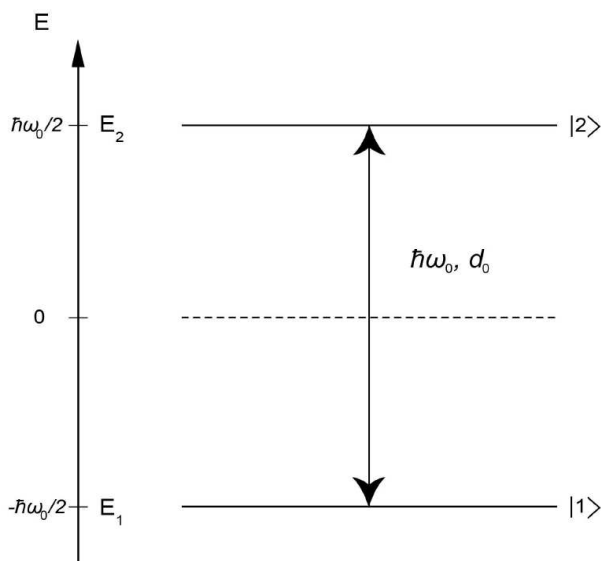


Рис. 8.1. Спектроскопический переход в двухуровневой системе

собой четную перестановку чисел 1, 2, 3, и минус единицы в противном случае. Справедливость (8.2.3) можно проверить непосредственно, воспользовавшись явным видом матриц Паули (8.2.2).

С использованием формул (8.2.2) можно дать следующее определение компонент так называемого оптического вектора Блоха:

$$R_j = \mathbf{a}^+ \sigma_j \mathbf{a} \equiv \langle \sigma_j \rangle, \quad (8.2.4)$$

где \mathbf{a} - двухмерный вектор-столбец с компонентами a_1, a_2 , \mathbf{a}^+ - эрмитовски сопряженный вектор (строка), угловые скобки обозначают усреднение по вектору состояния двухуровневой системы (8.2.1). Определение (8.2.4) можно переписать в виде:

$$R_1 = a_1 a_2^* + a_1^* a_2 = 2 \operatorname{Re} \{a_1 a_2^*\}, \quad (8.2.5)$$

$$R_2 = i (a_1 a_2^* - a_1^* a_2) = -2 \operatorname{Im} \{a_1 a_2^*\}, \quad (8.2.6)$$

$$R_3 = |a_1|^2 - |a_2|^2. \quad (8.2.7)$$

Если теперь ввести инверсию населенностей двухуровневой системы $N = N_2 - N_1$ ($N_j = |a_j|^2$), то вместо (8.2.7) имеем:

$$R_3 = -N \equiv N_1 - N_2, \quad (8.2.8)$$

т. е. третья компонента оптического вектора Блоха с точностью до знака равна инверсии населенностей.

Определим среднее значение дипольного момента двухуровневой системы, находящейся в состоянии $|t\rangle$, для которого справедливо разложение (8.2.1):

$$d(t) \equiv \langle t | \hat{d} | t \rangle = (a_1 a_2^* + a_1^* a_2) d_0 = R_1 d_0. \quad (8.2.9)$$

При записи (8.2.9) было учтено равенство $\langle 2 | \hat{d} | 1 \rangle = \langle 1 | \hat{d} | 2 \rangle$, которого можно добиться соответствующим выбором фазы волновых функций состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Таким образом, первая компонента оптического вектора Блоха определяет временную зависимость среднего дипольного момента двухуровневой системы. Чтобы выяснить физический смысл второй компоненты вектора Блоха, введем комплексный дипольный момент согласно равенству:

$$\tilde{d} \equiv \tilde{d}_1 + i \tilde{d}_2 = 2 d_0 a_2 a_1^*. \quad (8.2.10)$$

Тогда

$$d(t) = \text{Re} \left\{ \tilde{d}(t) \right\} = \tilde{d}_1(t) = d_0 R_1. \quad (8.2.11)$$

Мнимая часть \tilde{d}_2 позволяет определить фазу среднего дипольного момента, которая совпадает с углом в комплексной плоскости вектора \tilde{d} :

$$\varphi = \text{arctg} \left(\tilde{d}_2 / \tilde{d}_1 \right) = \arg \left(\tilde{d} \right). \quad (8.2.12)$$

В то же время \tilde{d}_2 выражается через вторую компоненту вектора Блоха:

$$\tilde{d}_2 = d_0 R_2. \quad (8.2.13)$$

Итак, формулы (8.2.8) – (8.2.13) дают физическую интерпретацию оптического вектора Блоха. Отметим, что комплексный вектор среднего дипольного момента (8.2.10) позволяет наглядно представить фазу дипольного момента как угол вращения вектора \tilde{d} в комплексной плоскости.

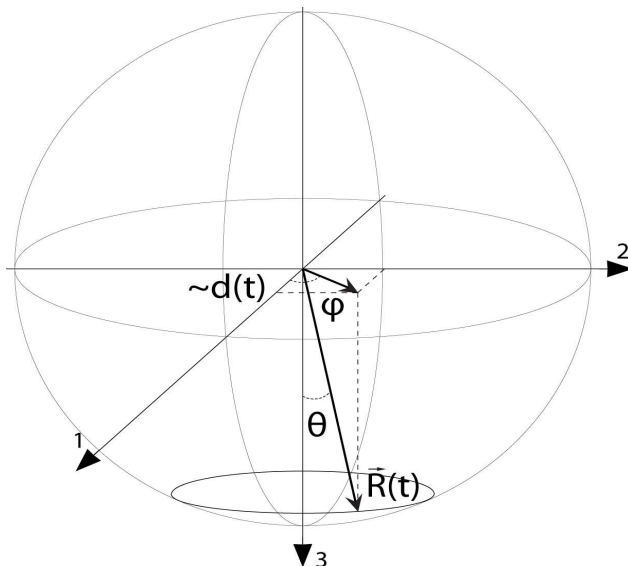


Рис. 8.2. Вектор Блоха и сфера Блоха

Третья компонента оптического вектора Блоха связана со средней энергией квантовой системы согласно равенству:

$$\langle E \rangle \equiv \langle t | \hat{H}_0 | t \rangle = E_1 |a_1|^2 + E_2 |a_2|^2 = -\omega_0 R_3/2, \quad (8.2.14)$$

где \hat{H}_0 – гамильтониан невозмущенной двухуровневой системы. При записи (8.2.14) было учтено, что по определению $\hat{H}_0 |j\rangle = E_j |j\rangle$ ($j = 1, 2$), а также выбрано начало отсчета энергии, такое, что $E_1 + E_2 = 0$.

Вследствие условия нормировки для вектора состояния $\langle t | t \rangle = 1$ оптический вектор Блоха также нормирован:

$$|R| = \sqrt{R_1^2 + R_2^2 + R_3^2} = |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1. \quad (8.2.15)$$

Нормировка (8.2.15) нарушается при учете возможности перехода электрона в другие квантовые состояния. Схематическое изображение вектора и сферы Блоха приведено на рис. 8.2.

Вектор Блоха двухуровневой системы является геометрическим образом такого важного понятия квантовой информатики как кванто-

вый бит или кубит (q-бит). Если в обычной (неквантовой) информатике единицей измерения информации является бит, который, как известно, может принимать всего два значения 0 или 1, единица измерения в квантовой информатике – кубит – принимает континуум значений. Этот континуум значений отвечает всем точкам на сфере Блоха (рис. 8.2), которые описывает конец вектора Блоха при изменении его азимутального φ и полярного θ углов.

Нетрудно показать, что временной эволюции невозмущенной двухуровневой системы соответствует свободная прецессия оптического вектора Блоха. Так называется вращение вектора вокруг третьей оси с угловой скоростью, равной собственной частоте перехода ω_0 . Свободная прецессия отвечает сохранению энергии квантовой системы в отсутствии возмущения. Свободная прецессия вырождается, если вектор Блоха находится в одном из стационарных состояний $|1\rangle$ или $|2\rangle$, в чем, в частности, отражается их стационарность.

При рассмотрении временной эволюции оптического вектора Блоха удобно представлять себе третью ось, направленной вниз, как это изображено на рис. 8.2. Тогда в случае, если квантовая система находится в нижнем (по энергии) стационарном состоянии $|1\rangle$, то вектор Блоха направлен вертикально вниз, если же она находится в верхнем стационарном состоянии $|2\rangle$, то вертикально вверх. Легко видеть, что в стационарных состояниях один из коэффициентов в разложении (8.2.1) равен нулю, поэтому равен нулю средний дипольный момент двухуровневой системы. Напротив, если оптический вектор Блоха лежит в горизонтальной плоскости, когда





$$|a_1(t)| = |a_2(t)| = 1/\sqrt{2}, \quad (8.2.16)$$

то амплитуда дипольного момента максимальна и равна (с учетом нормировки (8.2.15)) $1/\sqrt{2}$. Состояния, определяемые равенством (8.2.16), называются когерентными или суперпозиционными, в них инверсия населенностей равна нулю.

Если на двухуровневую систему действует электромагнитное поле, эволюция оптического вектора Блоха, естественно, отличается от свободной прецессии и может быть описана с помощью уравнения

$$\frac{d\mathbf{R}}{dt} = \mathbf{R} \times \mathbf{W}, \quad (8.2.17)$$

где $\mathbf{W} = (2\Omega(t), 0, \omega_0)$ – вектор обобщенной угловой скорости, $\Omega(t) = d_0 F(t)$ – зависящая от времени «мгновенная» частота Раби, $F(t)$ – напряженность электрического поля. Равенство (8.2.17) можно получить с помощью уравнения Шредингера для двухуровневой системы.

Из уравнения (8.2.17) следует, что существует механическая аналогия для оптического перехода во внешнем монохроматическом поле. Вектор Блоха аналогичен моменту количества движения гироскопа: он прецессирует вокруг мгновенного направления обобщенной угловой скорости $\mathbf{W}(t)$. Эта угловая скорость определяется собственной частотой двухуровневой системы и параметрами внешнего поля. В случае свободной прецессии, когда $\Omega(t) = 0$, вектор Блоха, как это следует из (8.2.17), вращается  против часовой стрелки вокруг положительного направления оси . Наложение внешнего поля приводит к дополнительному вращению вокруг оси  со значительно меньшей угловой скоростью, поскольку, как правило, $|\Omega(t)| \ll \omega_0$. Последнее неравенство означает, что внешнее поле существенно меньше собственного поля двухуровневой системы, определяющего частоту ω_0 . 

В случае окolorезонансного внешнего поля ($|\omega - \omega_0| \leq \gamma_0 \ll \omega$), который мы и будем предполагать в данном разделе, описанную выше картину движения оптического вектора Блоха можно существенно упростить. Для этого следует перейти в систему координат, вращающуюся вокруг оси z против часовой стрелки с угловой скоростью, равной частоте внешнего поля ω . Интуитивно понятно, что тогда можно в значительной степени куловить изменение во времени первой компоненты вектора обобщенной угловой скорости $\mathbf{W}(t)$, равной удвоенной мгновенной частоте Раби. Если при этом пренебречь в полученной системе уравнений слагаемыми, осциллирующими на удвоенной частоте внешнего поля (приближение кращающейся волны или резонансное приближение), то можно получить следующее уравнение для оптического вектора Блоха \mathbf{R}_0 во вращающейся системе координат:

$$\frac{d\mathbf{R}_0}{dt} = \mathbf{R}_0 \times \mathbf{W}_0, \quad \mathbf{W}_0 = (2\Omega_0, 0, \Delta), \quad (8.2.18)$$

где $\Omega_0 = d_0 F_0/2$ – резонансная частота Раби, $\Delta = \omega_0 - \omega$ – частотная отстройка от резонанса, а внешнее поле предполагается изменяющимся по закону $F = F_0 \cos(\omega t)$. Подчеркнем, что введенная в (8.2.18)

эффективная угловая скорость \mathbf{W}_0 является постоянной величиной в отличие от аналогичного вектора \mathbf{W} , фигурирующего в формуле (8.2.17). Именно это обстоятельство позволяет упростить картину временной эволюции оптического вектора Блоха. Действительно, из (8.2.18) следует, что вектор Блоха во вращающейся системе координат в резонансном приближении прецессирует вокруг вектора эффективной угловой скорости \mathbf{W}_0 , модуль которой равен:

$$|\mathbf{W}_0| = 2\Omega = \sqrt{4\Omega_0^2 + \Delta^2}, \quad (8.2.19)$$

где Ω – обобщенная частота Раби, учитывающая отстройку частоты внешнего поля от собственной частоты двухуровневой системы.

Остановимся подробнее на случае точного резонанса $\Delta = 0$, когда временная эволюция вектора \mathbf{R}_0 выглядит наиболее просто. Уравнение (8.2.18) при начальном условии $\mathbf{R} = (0, 0, 1)$, соответствующем нахождению системы в начальный момент времени в нижнем энергетическом состоянии, имеет следующее решение:

$$\mathbf{R}_0(t) = (0, -\sin(2\Omega_0 t), \cos(2\Omega_0 t)). \quad (8.2.20)$$

Отсюда вытекает, что в данном случае оптический вектор Блоха под действием внешнего резонансного поля вращается вокруг оси \mathbf{k} с угловой скоростью, равной удвоенной резонансной частоте Раби. Таким образом, двухуровневая система будет последовательно переходить из одного стационарного состояния в другое. В промежуточные между этими событиями моменты времени квантовая система будет находиться в суперпозиционном состоянии с отличным от нуля средним дипольным моментом. Поскольку энергия квантовой системы (8.2.14) пропорциональна третьей компоненте вектора Блоха, то согласно (8.2.20) она будет периодически изменяться во времени. Соответственно, интенсивность резонансного излучения, вызывающего вращение вектора Блоха, будет также периодически изменяться во времени. Это явление называется оптической нутацией.

Для описания импульсного электромагнитного воздействия на двухуровневую систему удобно ввести понятие площади импульса θ , равной по определению

$$\theta = 2 \int_0^{\Delta t} \Omega_0 dt, \quad (8.2.21)$$

где Δt – длительность импульса. В случае прямоугольного импульса из формулы (8.2.21) имеем: $\theta = 2\Omega_0\Delta t$. Теперь, как это следует из (8.2.20), если $\mathbf{R}_0 = (0, 0, 1)$, вектор Блоха в начальный момент времени направлен вертикально вниз, воздействие на систему к $\pi/2$ -импульса ($\theta = \pi/2$) переведет вектор \mathbf{R}_0 в горизонтальную плоскость. В результате двухуровневая система окажется в когерентном состоянии с максимально возможным средним дипольным моментом. Если же площадь импульса равна π (π -импульс), вектор Блоха \mathbf{R}_0 опишет развернутый угол, и двухуровневая система перейдет в верхнее стационарное состояние. Ясно, что 2π -импульс не изменит состояние двухуровневой системы.

Чтобы получить выражения для наблюдаемых величин, нужно от формул для вектора Блоха во вращающейся системе координат перейти в лабораторную систему отсчета. Тогда для инверсии населенностей и среднего дипольного момента одной двухуровневой системы находим

$$N = -R_3 = -R_{03} = -\cos(2\Omega_0 t), \quad (8.2.22)$$

$$d(t) = d_0 R_1(t) = d_0 (R_{01} \cos(\omega t) - R_{02} \sin(\omega t)). \quad (8.2.23)$$

При отсутствии переменного возмущения ($\omega = 0$ и $R_1 = R_{01}$) из последнего равенства следует формула (8.2.9), как и должно быть. Напомним, что (8.2.23) получено для электромагнитного возмущения, т. е. имеет ту же временную зависимость, что и первое слагаемое в круглых скобках (8.2.23). Поэтому данное слагаемое называется синфазной компонентой дипольного момента. Второе слагаемое в круглых скобках (8.2.23) сдвинуто по фазе на $\pi/2$ и описывает квадратурную компоненту дипольного момента. Поскольку средняя за период $T = 2\pi/\omega$ мощность электромагнитного взаимодействия равна $\langle \dot{d}(t) E(t) \rangle_T$, то отсюда и из (8.2.23) следует, что обмен энергией между излучением и квантовой системой определяется квадратурной компонентой дипольного момента, т. е. второй проекцией оптического вектора Блоха во вращающейся системе координат $R_{02}(t)$.

В случае точного резонанса $\Delta = 0$ формулы (8.2.20) и (8.2.23) дают:

$$d(t) = d_0 \sin(2\Omega_0 t) \sin(\omega t). \quad (8.2.24)$$

Отсюда видно, что временная зависимость среднего дипольного момента двухуровневой системы содержит быстро осциллирующую часть на частоте внешнего поля и амплитуду, медленно меняющуюся с удвоенной частотой Раби Ω_0 . В случае $\Delta \neq 0$ осцилляции компонент вектора R_0 будут происходить на частоте 2Ω с амплитудой, меньшей единицы. Важно отметить, что, как это следует из (8.2.22), в пренебрежении релаксационными процессами инверсия населенностей двухуровневой системы под воздействием резонансного поля с площадью импульса π может быть сделана равной единице.

При воздействии сверхкоротких импульсов излучения на двухуровневую систему (при выполнении соотношения $\Delta t \approx 1/\omega$, Δt – длительность импульса, ω – его несущая частота) приближение вращающейся волны может оказаться неадекватным. В этом случае спектральная ширина излучения становится порядка несущей частоты, поэтому, строго говоря, не удовлетворяется резонансное условие, и пренебрежение влиянием встречной волны становится некорректным [3]. Тогда необходимо исходить из точного векторного уравнения, которое в электрическом поле гауссовой формы эквивалентно следующей системе, записанной в безразмерных переменных:

$$\begin{cases} \dot{R}_1 = R_2 \\ \dot{R}_2 = -R_1 + 2\xi \exp\left(-\frac{\tau^2}{\eta^2}\right) \cos(r\tau + \varphi_0) R_3 \\ \dot{R}_3 = -2\xi \exp\left(-\frac{\tau^2}{\eta^2}\right) \cos(r\tau + \varphi_0) R_2 \end{cases}, \quad (8.2.25)$$

где точка обозначает дифференцирование по безразмерному времени $\tau = \omega_0 t$, $\xi = d_0 E_0 / \omega_0$, $\eta = \omega_0 \Delta t$, $r = \omega / \omega_0$, φ_0 – фаза несущей по отношению к огибающей импульса. Система (8.2.25) справедлива для времен, меньших времени продольной и поперечной релаксации, (подразумевается, что длительность импульса достаточно мала $\Delta t \ll T_{1,2}$). Обобщение на случай больших времен не представляет затруднений, но удлинняет запись формул. Система дифференциальных уравнений (8.2.25) не имеет в общем случае аналитического решения, но легко решается численно.

Если исключить вторую компоненту вектора Блоха из системы (8.2.25), то можно получить уравнение, левая часть которого совпадает с уравнением для гармонического осциллятора:

$$\ddot{R}_1 + R_1 = 2\xi R_3 \tilde{F}, \quad (8.2.26)$$

где $\tilde{F} = F/F_0$ – нормированная на амплитуду напряженность электрического поля. В данном случае роль константы силы связи между полем и двухуровневой системой играет величина $\gamma = 2\xi R_3$ или (с учетом определения третьей компоненты вектора Блоха) $\gamma = 2\xi(N_1 - N_2)$. Таким образом, связь с полем отсутствует, если населенности верхнего и нижнего уровня равны между собой. Любопытно, что это имеет место для когерентного состояния, когда собственный дипольный момент двухуровневой системы максимален. При слабом возбуждении первоначально невозбужденной двухуровневой системы в нулевом приближении можно считать $N_2 \ll 1$, $N_1 \approx 1$, тогда $\gamma \approx 2\xi$, и формула (8.2.26) преобразуется в уравнение для гармонического осциллятора. Отличие будет заключать в том, что в правой его части можно выделить силу осциллятора, учитывающую квантовый характер задачи. Таким образом, в пределе теории возмущений, когда $\xi < 0.1$, фазовые зависимости возбуждения двухуровневой системы описываются тем же коэффициентом модуляции, что и в случае гармонического осциллятора.

Система уравнений (8.2.25) имеет универсальный характер, поскольку описывает эволюцию произвольной двухуровневой системы, связанной дипольно разрешенным переходом, под действием электрического поля гауссовой формы. Возбуждение двухуровневой системы, первоначально находившейся на энергетическом уровне с меньшей энергией, можно характеризовать величиной населенности верхнего уровня энергии N_2 после завершения импульса электрического поля. Эта населенность связана простым соотношением с третьей компонентой вектора Блоха:

$$N_2 = \frac{1 - R_3}{2}. \quad (8.2.27)$$

При выводе (8.2.27) было использовано условие нормировки $N_1 + N_2 = 1$. Таким образом, численно определяя R_3 из системы (8.2.25), можно по формуле (8.2.27) найти населенность верхнего уровня двухуровневой системы в произвольный момент времени.

На рис. 8.3 представлены временные зависимости населенности верхнего уровня двухуровневой системы для различных значений фазы: $\varphi_0 = \pi/5, \pi/2$. Первоначально невозбужденная система возбуждалась импульсом длительностью $\eta = 6$ при большой величине пара-

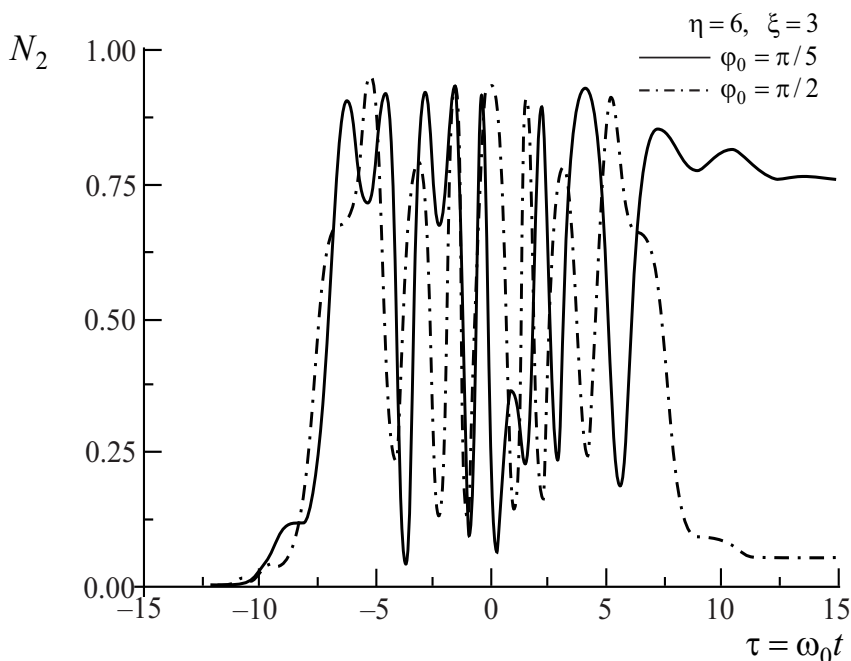


Рис. 8.3. Временная зависимость населенности верхнего уровня двухуровневой системы для различных значений фазы, $\eta = 6$, $\xi = 3$, $r = 1$

метра силы связи $\xi = 3$. Видно, что для меньшей величины фазы асимптотическое значение населенности верхнего уровня весьма велико $N_2(\tau \gg \eta) \approx 0.76$. В то же время для $\varphi_0 = \pi/2$ двухуровневая система после воздействия импульса остается практически невозбужденной $N_2(\tau \gg \eta) \approx 0.05$. Таким образом, при данных значениях параметров имеет место эффективный фазовый контроль возбуждения двухуровневой системы за счет изменения фазы импульса электрического поля гауссовой формы.

Сильные осцилляции населенности в течение импульса представляют собой оптическую нутацию двухуровневой системы, о которой говорилось выше в связи с геометрической интерпретацией эволюции двухуровневой системы с помощью вектора Блоха. Расчет показывает, что для меньшей силы связи $\xi = 1$ и тех же значений осталь-

ных параметров асимптотические населенности верхнего уровня для $\varphi_0 = \pi/5, \pi/2$ практически совпадают.

Приведем численные оценки параметров задачи для случая, когда двухуровневая система описывает переход $5s-5p$ в атоме рубидия, сила осциллятора которого f_0 близка к единице. Тогда энергия перехода $\omega_0 = 1.85$ эВ, длительность импульса для величины безразмерного параметра $\eta = 6$ равна $\Delta t_p \cong 3$ фс. Значение силы связи $\xi = 3$ соответствует интенсивности электромагнитного излучения на частоте ω_0 , равной $I = 4.3 \cdot 10^{15}$ Вт/см², что примерно на порядок меньше атомной интенсивности.

На рис. 8.4 представлена зависимость асимптотического значения населенности верхнего уровня двухуровневой системы, возбужденной полуцикловым импульсом при различных значениях параметра связи. Из рисунка следует, что заметная фазовая модуляция населенности наблюдается только в сильно нелинейном режиме даже для сверхкороткого импульса электрического поля. В линейном режиме $\xi < 0.1$ коэффициент модуляции для приведенных на рис. 8.4 значений параметров равен: $K = 0.01$. Отметим, что в линейном режиме он не зависит от силы связи между полем и двухуровневой системой.

После окончания действия импульса электрического поля дипольный момент двухуровневой системы на временах, меньших времени поперечной релаксации, будет осциллировать на собственной частоте ω_0 , вызывая тем самым излучение электромагнитных волн. Для характеристики ее зависимости от фазы можно ввести величину

$$K_\varphi = \frac{Q(\varphi_0 = 0) - Q(\varphi_0 = \pi/2)}{Q(\varphi_0 = 0) + Q(\varphi_0 = \pi/2)}, \quad (8.2.28)$$

где

$$Q(t \gg \Delta t, \varphi_0) \cong \frac{2\omega_0^4 d_{amp}^2(t \gg \Delta t, \varphi_0)}{3c^3} \quad (8.2.29)$$

и

$$d_{amp}^2(t \gg \Delta t, \varphi_0) \cong 4d_0^2 N_2(t \gg \Delta t, \varphi_0) [1 - N_2(t \gg \Delta t, \varphi_0)]. \quad (8.2.30)$$

При выводе последнего равенства использована формула

$$d(t) = d_0 \sqrt{1 - R_3^2} \cos(\omega_0 t + \varphi_0)$$

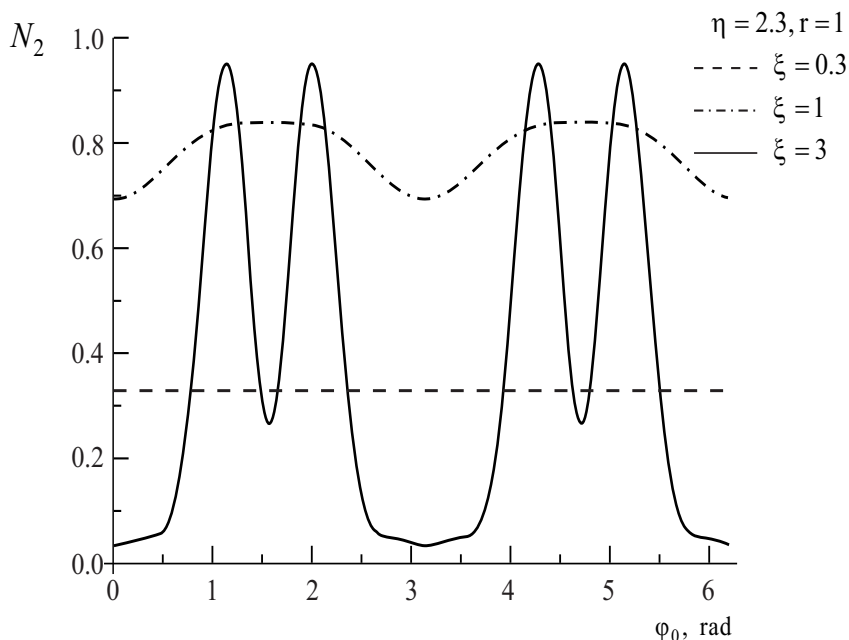


Рис. 8.4. Фазовая зависимость населенности верхнего уровня двухуровневой системы для $\tau \gg \eta$, возбужденной полужикловым импульсом ($\eta = 2.3$), при различных значениях параметра связи: $\xi = 0.3, 1, 3$

и (8.2.27). В равенстве (8.2.29) имеется дополнительный множитель 2 по сравнению с классической формулой, что отражает переход от классической к квантовой механике.

Расчетные зависимости коэффициента фазовой модуляции мощности излучения по окончании действия электрического поля от параметра силы поля ξ для различных длительностей импульса, соответствующих возбуждению двухуровневой системы полу-, одно- и двухцикловым импульсом, представлены на рис. 8.5. Из рис. 8.5 следует, что зависимость коэффициента фазовой модуляции от параметра силы связи ξ носит нерегулярный характер. Величина K_φ изменяется в интервале от -1 до 1 в отличие от коэффициента модуляции гармонического осциллятора, который всегда больше нуля и меньше

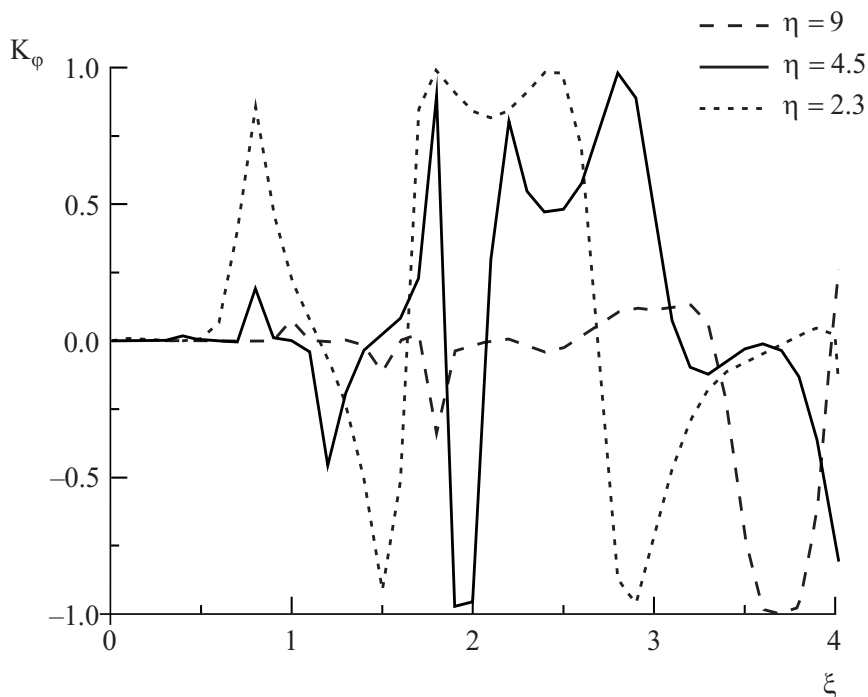


Рис. 8.5. Зависимость коэффициента фазовой модуляции мощности излучения двухуровневой системы после окончания возбуждающего импульса от параметра силы поля для различных длительностей импульса

единицы. Существенно, что в области сильной нелинейности $\xi > 1$ мощность излучения зависит от фазы даже для относительно больших длительностей импульса поля $\eta \geq 9$. В гармоническом приближении коэффициент фазовой модуляции имеет заметную величину только для субцикловых импульсов $\eta < 4$. Видно также, что зависимость $K_\phi(\xi)$ имеет широкие интервалы изменения аргумента, в которых $|K_\phi| \geq 0.5$, т. е. фазовая зависимость мощности излучения в принципе может быть наблюдаема. С ростом длительности импульса электрического поля широкие максимумы кривых рис. 8.5 сдвигаются в область больших значений параметра силы связи ξ . Так, например, для двухциклового импульса ($\eta = 9$) обсуждаемый максимум начинается при $\xi > 3.3$. Нужно иметь, однако, в виду, что в реальных квантовых системах при большой величине параметра ξ велика вероятность тун-

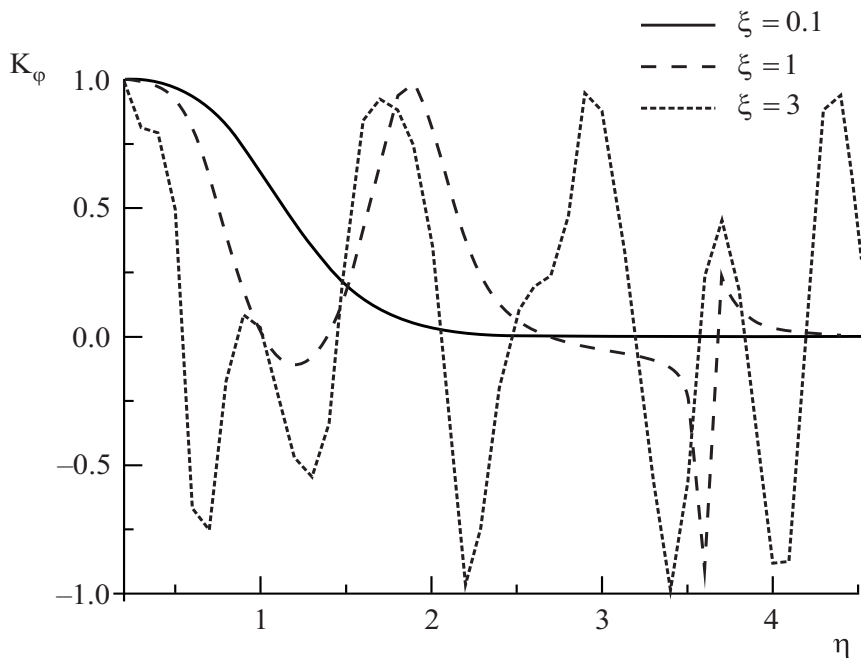


Рис. 8.6. Зависимость коэффициента фазовой модуляции мощности излучения двухуровневой системы от длительности импульса электрического поля после его окончания

нельной ионизации системы. В результате помимо фотовозбуждения нужно, вообще говоря, учитывать возможность разрушения двухуровневой системы вследствие туннельной ионизации, если ξ достаточно велико.

Рис. 8.6 характеризует фазовую чувствительность мощности излучения двухуровневой системы как функцию безразмерной длительности импульса η для различных величин параметра силы связи ξ . Анализ показывает, что заметное отличие зависимости коэффициента модуляции от гармонического приближения возникает в области $\xi \geq 0.4$, когда у функции $K_\varphi(\eta)$ появляется максимум при $\eta_{\max}(\xi = 0.5) \cong 3.5$, равный 0.14. С ростом параметра силы связи величина максимума увеличивается, а его положение сдвигается в об-

ласть меньших длительностей импульса. Так, при $\xi = 0.6$ расчет дает $K_\varphi (\eta_{\max} \cong 2.95) \cong 0.39$.

Таким образом, квантовое описание двухуровневой системы в рамках формализма вектора Блоха позволяет расширить границы исследования фазовых эффектов при возбуждении вещества сверхкоротким импульсом гауссовой формы на область больших значений параметра силы связи с полем, где не работает гармоническое приближение. При этом оказывается, что фазовая чувствительность возбуждения двухуровневой системы может сохраняться и для мультицикловых импульсов, если $\xi > 1$.

8.3. Рассеяние ультракороткого импульса на атоме

Большая часть работ по взаимодействию ультракоротких импульсов с веществом посвящена фотоионизации и фотовозбуждению атомных частиц. Описание фотопроцессов в рамках теории возмущений имеет ограниченную область применимости, поскольку для характерных значений интенсивности излучения, используемых в современных экспериментах, весьма велики нелинейные эффекты. В случае рассеяния излучения на атомных частицах из-за малой величины сечения процесса теория возмущений оказывается применимой в значительно более широкой области изменения параметров, чем при фотоионизации и фотовозбуждении. Однако, использование обычных формул теории возмущений, полученных в пределе длинных импульсов, в случае одно- и субцикловых импульсов становится, вообще говоря, некорректным. В данном разделе развивается адекватный метод описания рассеяния ультракоротких электромагнитных импульсов на атоме и в плазме, учитывающий возможное возбуждение мишени и недипольность электромагнитного взаимодействия.

Рассмотрим рассеяние ультракороткого электромагнитного импульса на атоме с учетом возможного возбуждения мишени [4]. Предполагаем, что пространственно-временная зависимость напряженности

электрического поля в импульсе имеет вид:

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{e} F_0 g\left(t - \frac{\mathbf{n}\mathbf{r}}{c}\right), \quad (8.3.1)$$

где \mathbf{e} – единичный вектор поляризации, F_0 – амплитуда поля, \mathbf{n} – единичный вектор в направлении распространения электромагнитного импульса, $g(\tau)$ – безразмерная функция, определяемая конкретной реализацией импульса, c – скорость света. Разложим напряженность (8.3.1) на плоские волны с частотами ω и волновыми векторами $\mathbf{k} = (\omega/c) \mathbf{n}$. Тогда рассеяние импульса электромагнитного поля можно представить как рассеяние совокупности плоских волн в плоскую волну с частотой ω' , единичным вектором поляризации \mathbf{e}' и волновым вектором $\mathbf{k}' = (\omega'/c) \mathbf{n}'$.

Исходя из вышеописанной картины, для дифференциальной вероятности рассеяния за все время действия импульса с одновременным возбуждением мишени из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$ можно записать равенство:

$$\frac{dW_{fi}}{d\Omega' d\omega'} = \int_0^\infty \frac{d\sigma_{fi}(\mathbf{k}', \mathbf{k})}{d\Omega' d\omega'} \frac{dN_{ph}}{d\omega dS} d\omega, \quad (8.3.2)$$

где

$$\frac{d\sigma_{fi}(\mathbf{k}', \mathbf{k})}{d\Omega' d\omega'} = \delta(\omega - \omega' - \omega_{fi}) \frac{\omega'^3 \omega}{c^4} |e_l'^* e_s c_{fi}^{ls}(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \quad (8.3.3)$$

– дифференциальное по телесному углу и частоте сечение рассеяния плоской волны на мишени, $c_{fi}^{ls}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ – тензор рассеяния излучения с учетом возбуждения мишени;

$$\frac{dN_{ph}}{d\omega dS} = \frac{c}{(2\pi)^2} \frac{|\mathbf{F}(\omega)|^2}{\omega} \quad (8.3.4)$$

– число фотонов, составляющих поле электромагнитного импульса, в спектральном интервале $(\omega, \omega + d\omega)$, прошедшее через единичную площадь за все время действия излучения, $\mathbf{F}(\omega)$ – фурье-образ напряженности электрического поля. Подставляя формулу (8.3.3) в правую часть равенства (8.3.2), приходим к выражению для дифференциальной вероятности фотопроцесса за все время действия поля:

$$\frac{dW_{fi}}{d\Omega' d\omega'} = \frac{\omega'^3}{c^3} \frac{F_0^2}{4\pi^2} |g(\omega' + \omega_{fi})|^2 |e_l'^* e_s c_{fi}^{ls}(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \quad \mathbf{k} =$$

$$= \frac{\omega' + \omega_{fi}}{c} \mathbf{n}, \quad (8.3.5)$$

где $g(\omega)$ – фурье-образ функции временной формы импульса $g(\tau)$, а по дважды повторяющимся индексам предполагается суммирование.

Формула (8.3.5) может быть также получена в рамках последовательного квантово-механического подхода во втором порядке теории возмущений. Пользуясь правилами диаграммной техники, для амплитуды спонтанного рассеяния электромагнитного импульса в плоскую волну $\{\mathbf{k}', \mathbf{e}'\}$ с возбуждением атома из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$ после интегрирования по времени можно получить следующее выражение

$$M_{fi} = \langle f | \hat{V}_{1'0} G(E_f + \omega') \hat{V}(\omega' + \omega_{fi}) | i \rangle + \\ + \langle f | \hat{V}(\omega' + \omega_{fi}) G(E_f - \omega') \hat{V}_{1'0} | i \rangle, \quad (8.3.6)$$

где $G(E)$ – функция Грина атома, $\hat{V}(\omega) = -\hat{\mathbf{d}} \mathbf{F}(\omega)$ – временной фурье-образ оператора возмущения атома электромагнитным импульсом, $\mathbf{F}(\omega) = \mathbf{F}_0 g(\omega) \exp(i \mathbf{k} \mathbf{r})$ – фурье-образ напряженности электрического поля в импульсе (8.3.1), $V_{1'0} = -\hat{\mathbf{d}} \mathbf{F}_{1'0}$ – матричный элемент, отвечающий спонтанному излучению фотона,

$$\mathbf{F}_{1'0} = \mathbf{e}'^* \sqrt{2\pi \omega' / V} \exp(-i \mathbf{k}' \mathbf{r})$$

– матричный элемент оператора квантованного электрического поля в шредингеровском представлении (без временной части), V – объем квантования. Подставляя вышеприведенные равенства в формулу (8.3.6), находим

$$M_{fi} = \frac{1}{V} \sqrt{\frac{2\pi \omega'}{V}} F_0 g(\omega' + \omega_{fi}) e_l'^* e_s c_{fi}^{ls}(\mathbf{k}', \mathbf{k}), \quad (8.3.7)$$

где $\mathbf{k} = \mathbf{n}(\omega' + \omega_{fi})/c$, $c_{fi}^{ls}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ – тензор рассеяния электромагнитного поля на атоме с учетом его возбуждения. Согласно известным квантово-механическим правилам для вероятности рассматриваемого процесса имеем

$$dW_{fi} = |M_{fi}|^2 d\Gamma', \quad (8.3.8)$$

где

$$d\Gamma' = V \frac{\omega'^2}{8\pi^3 c^3} d\omega' d\Omega_{\mathbf{k}'} \quad (8.3.9)$$

– статистический вес состояния электромагнитного поля, отвечающего рассеянному фотону. Подставляя выражения (8.3.7), (8.3.9) в формулу (8.3.8), находим для спектрально-угловой вероятности процесса (8.3.5) равенство:

$$\frac{dW_{fi}}{d\omega' d\Omega'} = \frac{\omega'^3}{4\pi^2 c^3} F_0^2 |g(\omega' + \omega_{fi})|^2 |e_l'^* e_s c_{fi}^{ls}(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2. \quad (8.3.10)$$

В дальнейшем будем полагать, что тензор рассеяния сводится к скаляру $c_{fi}^{ls} = \delta_{ls} c_{fi}$ ($c_{fi} = (1/3) c_{fi}^l$), тогда в правой части равенства (8.3.5) появляется скалярное произведение векторов поляризации падающей и рассеянной волны, которое усредняется стандартным образом для неполяризованного рассеянного излучения.

Рассмотрим далее два случая: (i) рассеяние без возбуждения мишени («упругое» рассеяние) и (ii) рассеяние с возбуждением мишени в произвольное состояние.

В случае рассеяния без изменения состояния атома в мультипликативном приближении имеем

$$c_{ii}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \simeq \beta_i(\omega') \tilde{F}_{ii}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}), \quad (8.3.11)$$

где $\beta_i(\omega')$ – динамическая поляризуемость атома в начальном состоянии, $\tilde{F}_{ii}(\mathbf{q}) = F_{ii}(\mathbf{q})/Z$ – нормированный на число электронов атомный форм-фактор. С учетом (8.3.11) из формулы (8.3.5) находим после суммирования по поляризациям рассеянного фотона следующее выражение:

$$\frac{dW_{ii}}{d\Omega' d\omega'} = \frac{1 - (\mathbf{e}\mathbf{n}')^2}{4\pi^2} \left(\frac{\omega'}{c}\right)^3 F_0^2 |g(\omega')|^2 |\beta_i(\omega')|^2 \tilde{F}_{ii}^2 \left(2 \frac{\omega'}{c} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\right), \quad (8.3.12)$$

где θ – угол рассеяния. Здесь при записи Δk в аргументе атомного форм-фактора учтено, что $\omega' = \omega$.

Формулу (8.3.12) можно переписать через поляризационный заряд атома

$$Z_{pol}(\omega) = \omega^2 |\beta(\omega)| \quad (8.3.13)$$

в виде

$$\frac{dW_{ii}}{d\Omega' d\omega'} = \frac{1 - (\mathbf{e}\mathbf{n}')^2}{4\pi^2} \left(\frac{1}{c}\right)^3 \left(\frac{I_0}{I_a}\right) \times \\ \times Z_{pol}^2(\omega') \frac{|\omega_a g(\omega')|^2}{\omega'} \tilde{F}_{ii}^2 \left(2 \frac{\omega'}{c} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\right), \quad (8.3.14)$$

где $I_a = c/8\pi^8 \simeq 3.5 \cdot 10^{16}$ Вт/см², $\omega_a = 1$ – атомные единицы интенсивности излучения и частоты, $I_0 = cF_0^2/8\pi$ – средняя интенсивность излучения. В высокочастотном пределе $\omega \gg \omega_t$ (ω_t – характерная собственная частота мишени) поляризационный заряд равен числу электронов в мишени.

Частотная зависимость поляризационного заряда атома криптона, вычисленная с помощью экспериментальных данных по фотопоглощению, представлена на рис. 8.7. Сплошная кривая получена путем расчета мнимой части поляризуемости атома криптона по оптической теореме и восстановления реальной части с помощью соотношения Крамерса–Кронига. В случае, когда несущая частота импульса ω_c близка к одной из собственных частот возбуждения атома в дискретном спектре $\omega_c \approx \omega_{ri}$ (при этом сила осциллятора соответствующего перехода не равна нулю $f_{ri} \neq 0$), можно использовать резонансное приближение для поляризуемости, в котором

$$|\beta_i(\omega' \approx \omega_{ri})|^2 \cong \frac{\pi}{2} \left(\frac{1}{\omega'^2}\right)^2 \frac{\omega'}{\delta_{ri}} f_{ri}^2 \omega' G_{ri}(\omega'), \quad (8.3.15)$$

где δ_{ri} , $G_{ri}(\omega)$ – ширина линии и форма линии резонансного перехода. Тогда вместо формулы (8.3.12) имеем

$$\frac{dW_{ii}(\omega_c \approx \omega_{ri})}{d\Omega' d\omega'} = \frac{1 - (\mathbf{e}\mathbf{n}')^2}{8\pi} \left(\frac{1}{c}\right)^3 \left(\frac{I_0}{I_a}\right) \frac{\omega'}{\delta_{ri}} |\omega_a g(\omega')|^2 f_{ri}^2 G_{ri}(\omega'). \quad (8.3.16)$$

При записи равенства (8.3.16) учтено, что в рассматриваемом спектральном диапазоне атомный форм-фактор может быть положен равным единице. Из полученной формулы, в частности, следует резонансное усиление рассеяния за счет наличия множителя ω'/δ_{ri} .

Для ультракороткого импульса с несущей частотой в оптическом диапазоне ширина спектра, как правило, существенно больше ширины

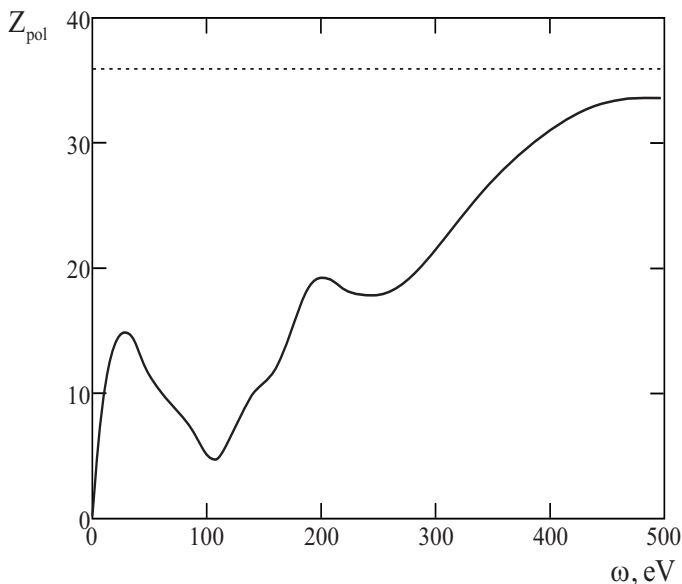


Рис. 8.7. Поляризационный заряд атома криптона как функция частоты. Пунктирной линией показано число электронов в атоме

линии резонансного перехода в атоме, так что спектральная зависимость вероятности рассеяния будет в основном определяться функцией формы линии резонансного перехода $G_{ri}(\omega')$. В общем случае на спектр рассеянного импульса будет также влиять функция $|g(\omega')|^2$.

Выражение для резонансной вероятности (8.3.16) может быть обобщено на случай возбуждения атома в процессе рассеяния, если частота рассеянного излучения близка к одной из собственных частот перехода атома из промежуточного в конечное состояние. Вероятность рассеяния с возбуждением мишени в произвольное состояние (полный спектр рассеяния) получается после суммирования вероятности (8.3.5) по всем возможным состояниям $|f\rangle$. Рассмотрим полный спектр рассеяния в высокочастотном диапазоне ($\omega \gg \omega_t$), когда справедливо приближенное выражение для тензора рассеяния:

$$c_{fi}^{(hf)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \simeq -\frac{1}{\omega' \omega} F_{fi}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}). \quad (8.3.17)$$

Подставляя правую часть равенства (8.3.17) в формулу (8.3.5) и суммируя по всем возможным конечным состояниям, находим следующее выражение для вероятности рассеяния с учетом возбуждения атома:

$$\frac{dW_{tot}^{(hf)}}{d\omega' d\Omega'} = \frac{c F_0^2}{4\pi^2} \left[1 - (\mathbf{e} \mathbf{n}')^2 \right] r_e^2 \int_0^\infty |g(\omega)|^2 S_i(\omega' - \omega, \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \frac{d\omega}{\omega}, \quad (8.3.18)$$

где

$$S_i(\Delta\omega, \Delta\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dt e^{-i\Delta\omega t} \langle i | n(\Delta\mathbf{k}, t) n(-\Delta\mathbf{k}) | i \rangle \quad (8.3.19)$$

– динамический форм-фактор атома в i -м состоянии. В простейшем приближении динамический форм-фактор водородоподобного атома

$$S(\Delta\omega, \Delta\mathbf{k}) \simeq \delta\left(\Delta\omega + \frac{\Delta\mathbf{k}^2}{2m}\right). \quad (8.3.20)$$

Подставляя правую часть равенства (8.3.20) в формулу (8.3.18), после интегрирования по частоте ω находим

$$\frac{dW_{tot}^{(hf)}}{d\omega' d\Omega'} \approx \frac{2}{\pi} \left[1 - (\mathbf{e} \mathbf{n}')^2 \right] I_0 r_e^2 \frac{|g[\omega(\omega', \theta)]|^2}{\omega(\omega', \theta)}, \quad (8.3.21)$$

где

$$\omega(\omega', \theta) = \omega_r + \omega' \cos \theta - \omega_r \sqrt{1 - 4 \frac{\omega'}{\omega_r} \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) - \left(\frac{\omega'}{\omega_r} \right)^2 \sin^2(\theta)} \\ \omega_r = c^2. \quad (8.3.22)$$

Для $\omega' \ll \omega_r$ имеем: $\omega(\omega', \theta) \cong \omega'$, тогда получаем

$$\frac{dW_{tot}^{(hf)}}{d\omega' d\Omega'} \approx \frac{1 - (\mathbf{e} \mathbf{n}')^2}{4\pi^2} \left(\frac{1}{c} \right)^3 \left(\frac{I_0}{I_a} \right) \frac{|\omega_a g(\omega')|^2}{\omega'}. \quad (8.3.23)$$

Данное выражение описывает полный спектр рассеяния ультракороткого импульса одноэлектронным атомом в высокочастотном приближении.

В высокочастотном пределе, когда $Z_{pol} \cong Z$, отношение вероятности «упругого» рассеяния ультракороткого импульса на водородоподобном атоме (8.3.14) к полной вероятности (8.3.23) равно квадрату нормированного форм-фактора атома

$$R^{(hf)}(\omega', \theta) \equiv \frac{dW_{ii}^{(hf)}}{dW_{tot}^{(hf)}} = \tilde{F}_{ii}^2 \left(2 \frac{\omega'}{c} \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) \right). \quad (8.3.24)$$

Рассмотрим рассеяние атомом ультракороткого электромагнитного импульса гауссовой формы. Тогда функция, определяющая временную зависимость напряженности электрического поля в формуле (8.3.1), имеет вид

$$g(\tau) = \exp(-\tau^2/\Delta t^2) \cos(\omega_c \tau + \varphi), \quad (8.3.25)$$

где ω_c – несущая частота, Δt – временной параметр, пропорциональный длительности импульса, φ – фаза несущей по отношению к огибающей. Параметр Δt удобно выразить через число периодов в импульсе на несущей частоте n_c : $\Delta t = 2\sqrt{2\pi} n_c / \omega_c$. С учетом этого квадрат модуля фурье-образа функции, фигурирующий в выражениях для вероятности рассеяния, можно представить в виде

$$|g(\omega)|^2 = 2\pi^2 \left(\frac{n_c}{\omega_c} \right)^2 G_E(\omega, \omega_c, n_c) [1 + K_{ph}(\omega, \omega_c, n_c) \cos(2\varphi)], \quad (8.3.26)$$

где

$$G_E(\omega, \omega_c, n_c) = \exp \left[-4\pi n_c^2 \left(1 - \frac{\omega}{\omega_c} \right)^2 \right] + \exp \left[-4\pi n_c^2 \left(1 + \frac{\omega}{\omega_c} \right)^2 \right] \quad (8.3.27)$$

– спектральная форма импульса и

$$K_{ph}(\omega, \omega_c, n_c) = \operatorname{sech} \left(8\pi n_c^2 \frac{\omega}{\omega_c} \right) \quad (8.3.28)$$

– величина, имеющая смысл параметра фазовой модуляции. Как следует из определения (8.3.18), параметр фазовой модуляции имеет заметную величину только для ультракоротких импульсов, когда $n_c \sim 1$.

На рис. 8.8 представлен спектр «упругого» (без возбуждения мишени) рассеяния одноциклового импульса на атоме криптона, рассчи-

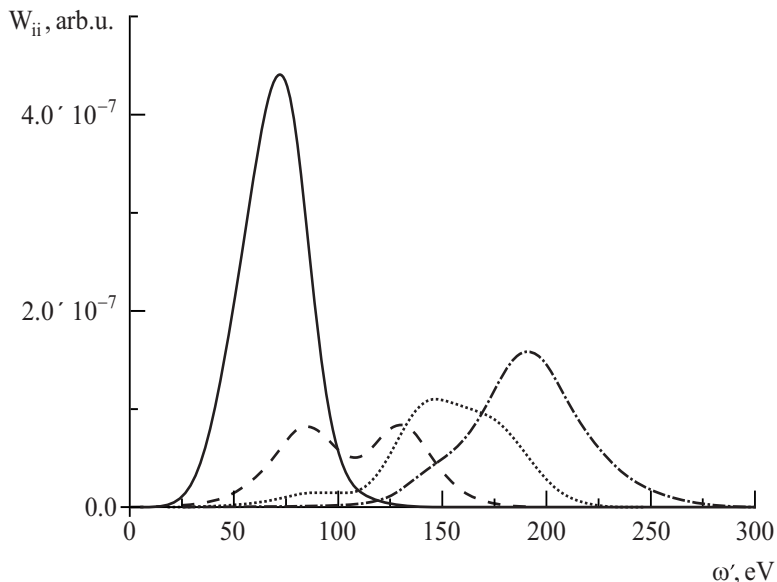


Рис. 8.8. Спектр «упругого» рассеяния одноциклового импульса на атоме криптона для различных значений несущей частоты: сплошная кривая – $\hbar\omega_c = 80$ эВ, штриховая кривая – $\hbar\omega_c = 110$ эВ, пунктир – $\hbar\omega_c = 140$ эВ, штрих-пунктир – $\hbar\omega_c = 180$ эВ

танный по формуле (8.3.12) для угла рассеяния 45° и нескольких значений несущей частоты. Как видно из этого рисунка, в случае одноциклового импульса форма спектра рассеянного излучения существенно зависит от несущей частоты. Вдали от минимума частотной зависимости поляризационного заряда атома криптона, приходящегося примерно на 107 эВ, спектральные кривые рассеяния имеют симметричную форму с максимумом в центре. Вблизи минимальной частоты ($\hbar\omega_c = 110$ эВ) в спектре рассеяния возникает провал. Как это следует из формулы (8.3.14), описанная эволюция спектра рассеяния объясняется наложением двух частотных зависимостей: спектра ультракороткого импульса (8.3.26) и спектра поляризационного заряда атома. Для одноциклового импульса, обладающего значительной спектральной шириной, сравнимой с масштабом спектральных особенностей поляризационного заряда атома криптона, это наложение изменяет форму спектральной кривой рассеяния. Ситуация изменяется при перехо-

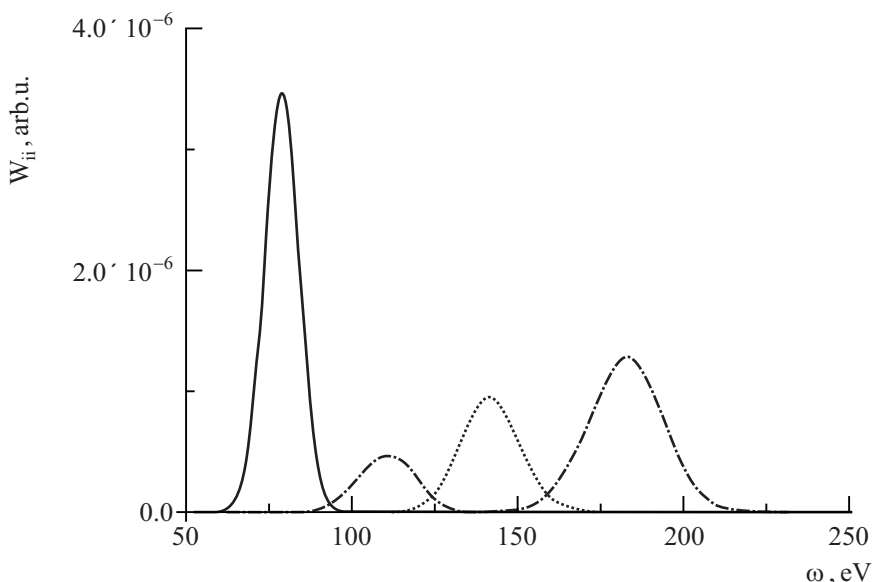


Рис. 8.9. Те же обозначения, что на рис. 8.8, для трехциклового импульса

де к более длинным импульсам, например, к трехцикловому, спектр рассеяния которого на атоме криптона для различных несущих частот представлен на рис. 8.9. Видно, что в случае трехциклового импульса спектр рассеянного излучения представляет собой колоколообразную кривую, форма которой определяется спектром падающего импульса (8.3.26), а амплитуда зависит от величины поляризационного заряда атома на несущей частоте.

На рис. 8.10 представлен результат расчета по формуле (8.3.24) отношения вероятности «упругого» рассеяния одноциклового импульса на атоме водорода в высокочастотном пределе, просуммированной по всем частотам рассеянного излучения, к аналогичной величине для процесса с произвольным возбуждением атома. Данное отношение рассчитано как функция несущей частоты импульса для различных углов рассеяния. На этом же рисунке сплошной кривой представлен вклад «упругого» процесса, просуммированного по углам рассеяния.

Из зависимости, представленной на рис. 8.10, следует, что для малых значений несущей частоты электромагнитного импульса рассея-

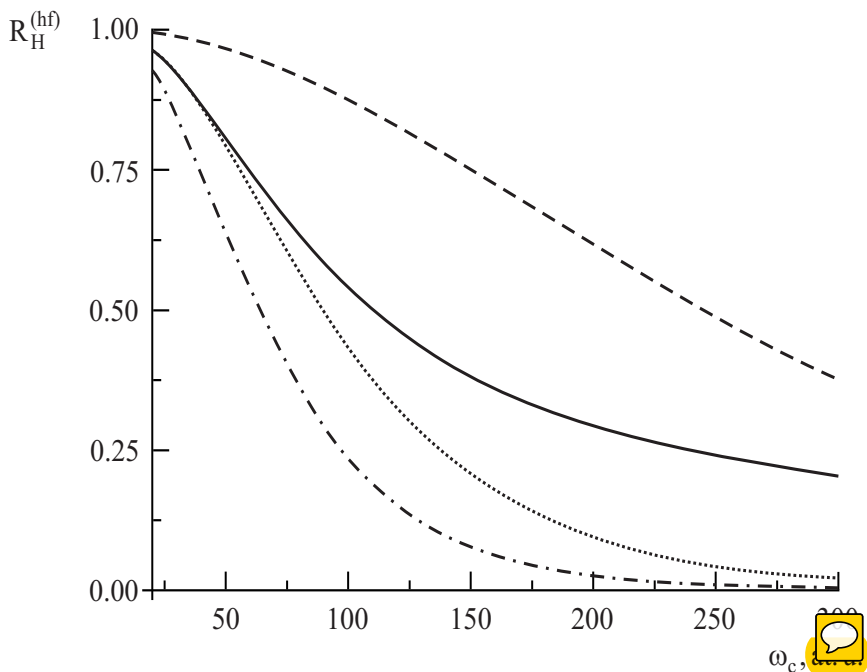


Рис. 8.10. Отношение вероятности «упругого» рассеяния одноциклового импульса на атоме водорода к полной вероятности, рассчитанное в высокочастотном пределе для трех углов рассеяния и для вероятностей, проинтегрированных по углам (сплошная кривая): штриховая кривая – $\theta = 30^\circ$, пунктир – $\theta = 90^\circ$, штрих-пунктир – $\theta = 180^\circ$

ние в основном происходит без возбуждения атома. Для больших углов рассеяния роль упругого канала быстрее уменьшается с ростом частоты. Для интегральной по углам вероятности процесса вклад упругого и неупругого каналов сравниваются для несущей частоты порядка 112 а.е., что соответствует энергии фотона около 3 кэВ.

8. 4. Рассеяние ультракороткого импульса в плазме

Используем развитый для атомной мишени подход для описания рассеяния ультракороткого импульса в плазме [5]. Воспользуемся формулой (8.3.18), которая была получена в высокочастотном приближении для атома. Напомним, что, поскольку плазменные электроны являются свободными, то для них условие высокочастотности $\omega \gg \omega_t = 0$ (ω_t – характерная собственная частота плазменного электрона) выполняется автоматически и, соответственно, применимо выражение (8.3.18). В этом выражении динамический форм-фактор атома должен быть заменен на динамический форм-фактор электронной компоненты плазмы.

Как известно, рассеяние электромагнитного излучения в плазме может быть двух типов: комптоновское и переходное. Комптоновское рассеяние отвечает большим изменениям волнового вектора $|\Delta \mathbf{k}| > r_D^{-1}$ ($\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$), когда электромагнитное взаимодействие происходит в одночастичном режиме. Это означает, что избыток энергии-импульса в ходе рассеяния передается одному плазменному электрону, как при комптоновском рассеянии рентгеновского излучения на атоме, когда атомный электрон выбивается из атома, унося с собой избыток энергии-импульса. В случае переходного рассеяния ситуация противоположная: выполняется неравенство $|\Delta \mathbf{k}| < r_D^{-1}$, означающее, что рассеяние электромагнитного поля происходит на дебаевской сфере, окружающей ион в плазме, как на едином целом. При этом избыток энергии-импульса передается плазменному иону.

После усреднения по поляризации падающего излучения и интегрирования по частоте рассеянного излучения можно получить следующее угловое распределение (в пересчете на один ион) для вероятности переходного рассеяния ультракороткого импульса

$$\frac{dw_i}{N_i d\Omega'} \simeq \frac{c F_0^2 r_e^2}{8 \pi^2} Z_i^2 (1 + \cos^2 \theta) \int_0^\infty \frac{|g(\omega')|^2 d\omega'}{\omega' \left[1 + (2 r_D (\omega'/c) \sin(\theta/2))^2 \right]^2}, \quad (8.4.1)$$

где $N_i = n_i \delta V$ – число ионов в объеме рассеяния δV .

Аналогичное выражение для комптоновского канала рассеяния в пересчете на один электрон имеет вид:

$$\frac{dw_e}{N_e d\Omega'} \simeq \frac{c F_0^2 r_e^2}{8 \pi^2} (1 + \cos^2 \theta) \int_0^\infty \frac{(2 r_D (\omega'/c) \sin(\theta/2))^4 |g(\omega')|^2 d\omega'}{\omega' \left[1 + (2 r_D (\omega'/c) \sin(\theta/2))^2 \right]^2}, \quad (8.4.2)$$

где $N_e = n_e \delta V$. При выводе формул (8.4.1), (8.4.2) была использована замена

$$\frac{\exp\left(-\frac{\Delta\omega^2}{2\Delta\mathbf{k}^2 v_T^2}\right)}{\sqrt{2\pi} v_T |\Delta\mathbf{k}|} \rightarrow \delta(\Delta\omega), \quad (8.4.3)$$

справедливая, если $|\Delta\omega| \gg v_T |\Delta\mathbf{k}|$, что здесь предполагается. Соотношение (8.4.3) отвечает равенству рассеянной частоты ω' частоте фурье-разложения ультракороткого импульса ω ($\omega' \cong \omega$), т. е. пренебрежению неупругими процессами в ходе рассеяния.

Для полной вероятности рассеяния ультракороткого импульса в плазме по переходному каналу, интегрируя правую часть равенства (8.4.1) по телесному углу рассеяния, находим

$$\frac{w_i}{N_i} \simeq \frac{c F_0^2 r_e^2}{4 \pi} Z_i^2 \int_0^\infty F_i \left[2 (r_D (\omega'/c))^2 \right] \frac{|g(\omega')|^2 d\omega'}{\omega'}, \quad (8.4.4)$$

где

$$F_i(x) = 2 \frac{1+x}{x^3} \left\{ \frac{2x(1+x)}{2x+1} - \ln(2x+1) \right\}.$$

Заметим, что $F_i(0) = 8/3$.

Аналогичное выражение для комптоновского рассеяния имеет вид

$$\frac{w_e}{N_e} \simeq \frac{c F_0^2 r_e^2}{4 \pi} \int_0^\infty F_e \left[2 (r_D (\omega'/c))^2 \right] \frac{|g(\omega')|^2 d\omega'}{\omega'}, \quad (8.4.5)$$

$$F_e(x) = 2 \frac{2x(4x^3 + 11x^2 + 15x + 6) - (4x^3 + 8x^2 + 7x + 2) \ln(2x+1)}{3x^3(2x+1)},$$

причем $F_e(\infty) = 8/3$.

Применим полученные выражения для описания рассеяния в плазме ультракороткого импульса гауссовой формы (8.3.25). Входящая в

вышеприведенные выражения величина $|g(\omega')|^2$ дается в этом случае равенствами (8.3.26)–(8.3.28). В пределе длинного импульса $n_c \gg 1$ из (8.3.26) – (8.3.28) имеем

$$|g(\omega)|^2 \rightarrow \pi^2 \frac{n_c}{\omega_c} \delta(\omega - \omega_c) . \quad (8.4.6)$$

В этом случае формулы (8.4.4), (8.4.5) упрощаются, и для суммарной вероятности рассеяния по обоим каналам, нормированной на число электронов $N_e = Z_i N_i$, имеем

$$\frac{w(n_c \gg 1)}{N_e} \simeq \frac{\pi c F_0^2 n_c}{4 \omega_c^2} r_e^2 F \left[2(d_e(\omega_c/c))^2 \right] , \quad (8.4.7)$$

где $F = F_e + Z_i F_i$. Анализ показывает, что отличие вероятности рассеяния ультракороткого импульса в плазме, рассчитанной по формулам (8.4.4), (8.4.5), от монохроматического предела (8.4.7) имеет место только для субцикловых импульсов $n_c \leq 1$. Это различие возрастает с ростом несущей частоты импульса и имеет немонотонную зависимость от дебаевского радиуса.

Результаты расчетов спектральной и угловой вероятности рассеяния электромагнитного импульса в плазме приведены на рис. 8.11 – 8.16. По оси ординат на этих рисунках отложена вероятность рассеяния за все время действия импульса, нормированная на интенсивность $I_0 = c F_0^2 / 8 \pi$. Всюду предполагаем, что $\omega_c > \omega_{pe}$, где ω_{pe} – электронная плазменная частота. Зависимость спектральной кривой рассеяния ультракороткого импульса от фазы проявляется только для субцикловых импульсов $n_c < 1$. При этом, как это видно из рис. 8.12, рост фазы в интервале от 0 до $\pi/2$ приводит к уменьшению вероятности рассеяния.

Зависимость вероятности рассеяния за все время действия полуволнового импульса от величины дебаевского радиуса представлена на рис. 8.13 для несущей частоты $\omega_c = 3 \cdot 10^{-4}$ а.е. и трех величин фазы. Видно, что соответствующие кривые имеют минимум вблизи значения $r_D \approx 5 \cdot 10^5$ а.е. . Расчет показывает, что с уменьшением несущей частоты минимум в зависимости вероятности рассеяния от дебаевского радиуса смещается в область больших значений. С ростом длительности импульса этот минимум слабо смещается в область меньших дебаевских радиусов.

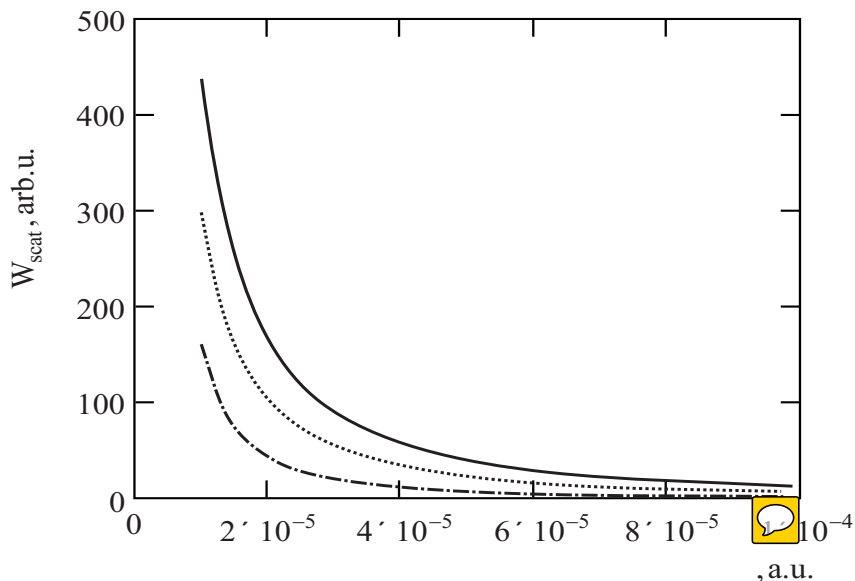


Рис. 8.11. Зависимость нормированной вероятности рассеяния четвертьциклового импульса в плазме от несущей частоты для трех значений фазы, $r_D = 10^5$ а.е. Сплошная кривая $\varphi = 0$, пунктир – $\varphi = \pi/4$, штрих-пунктир – $\varphi = \pi/2$

Рис. 8.13 и 8.14 демонстрируют величину двух каналов процесса в зависимости от угла рассеяния фотона для четвертьциклового (рис. 8.13) и пятициклового (рис. 8.14) импульсов. Видно, что с ростом угла вероятность комптоновского рассеяния возрастает, а вероятность переходного рассеяния имеет немонотонную зависимость. С уменьшением длительности импульса относительный вклад комптоновского рассеяния ультракороткого электромагнитного импульса в плазме уменьшается по сравнению с вкладом переходного рассеяния. Для характеристики зависимости вероятности рассеяния ультракороткого импульса от фазы удобно ввести коэффициент фазовой модуляции вероятности рассеяния по формуле:

$$K_{tot} = 2 \frac{w(\varphi = 0) - w(\varphi = \pi/2)}{w(\varphi = 0) + w(\varphi = \pi/2)}. \quad (8.4.8)$$

Результаты расчета этой величины для рассеяния полуволнового импульса в плазме приведены на рис. 8.15 и 8.16. На рис. 8.15 представ-

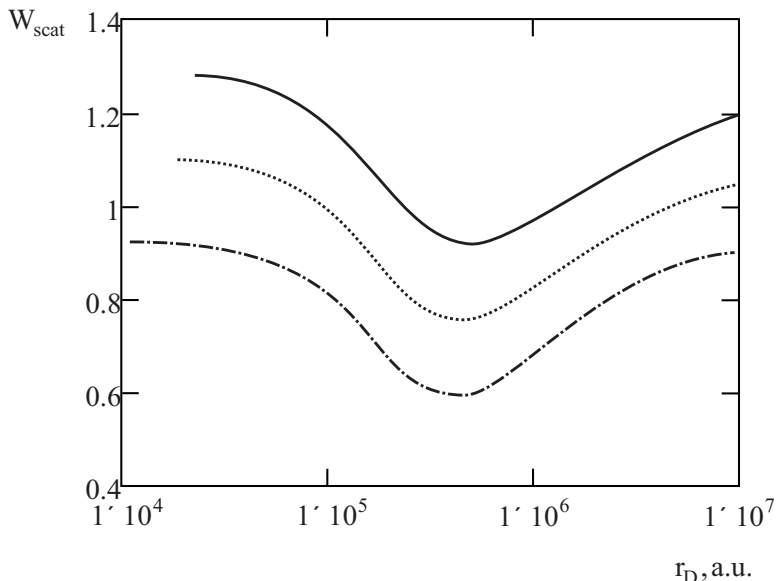


Рис. 8.12. Нормированная вероятность рассеяния полуциклового импульса как функция дебаевского радиуса для различных значений фазы, $\omega_c = 3 \cdot 10^{-4}$ а.е. . Сплошная кривая $\varphi = 0$, пунктир — $\varphi = \pi/4$, штрих-пунктир — $\varphi = \pi/2$

лена зависимость коэффициента фазовой модуляции (8.4.8) от величины дебаевского радиуса для различных значений несущей частоты импульса. Видно, что эта зависимость носит немонотонный характер с максимумом, смещающимся в область меньших радиусов с увеличением несущей частоты. Кроме того, из рис. 8.15 следует, что фазовая зависимость вероятности рассеяния возрастает с ростом несущей частоты ультракороткого импульса. Этот же факт вытекает из графиков рис. 8.16, на котором представлен коэффициент фазовой модуляции как функция несущей частоты для различных величин дебаевского радиуса.

Таким образом, проведенный анализ показал, что зависимость вероятности рассеяния ультракороткого электромагнитного импульса от величины дебаевского радиуса плазмы носит немонотонный характер. Минимум вероятности рассеяния импульса смещается в область мень-

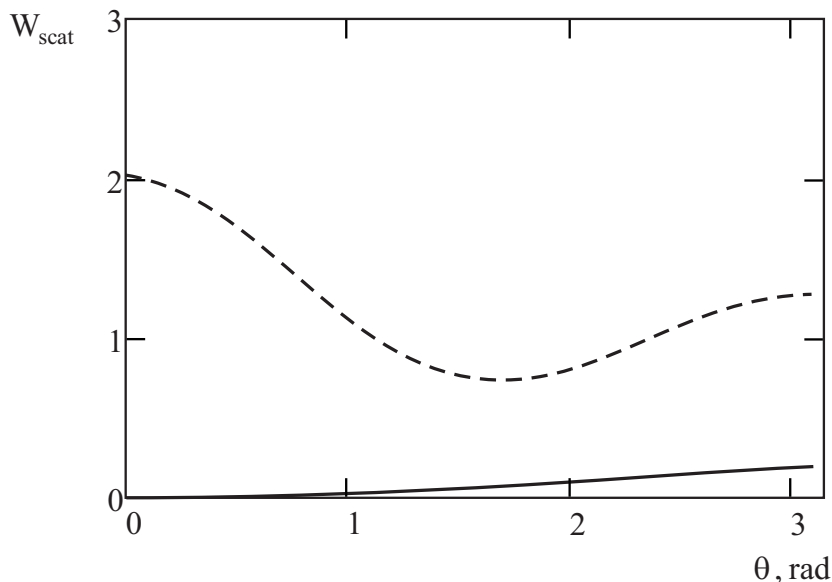


Рис. 8.13. Угловая зависимость нормированной вероятности рассеяния четвертьциклового импульса ($\omega_c = 10^{-4}$ а.е., $r_D = 10^6$ а.е.) по различным каналам: сплошная кривая – «комптоновское» рассеяние, пунктир – переходное рассеяние для $Z_i = 1$

ших значений дебаевского радиуса с уменьшением несущей частоты и ростом длительности импульса. Из анализа угловых зависимостей двух каналов рассеяния ультракороткого импульса в плазме следует, что с уменьшением длительности импульса уменьшается вклад комптоновского рассеяния в общую вероятность процесса, при этом увеличивается вероятность переходного рассеяния для больших углов. Установлено, что фазовая зависимость рассеяния проявляется только для субцикловых импульсов $n_c < 1$, причем рост фазы в интервале от 0 до $\pi/2$ приводит к уменьшению вероятности процесса, а увеличение несущей частоты – к увеличению коэффициента фазовой модуляции.

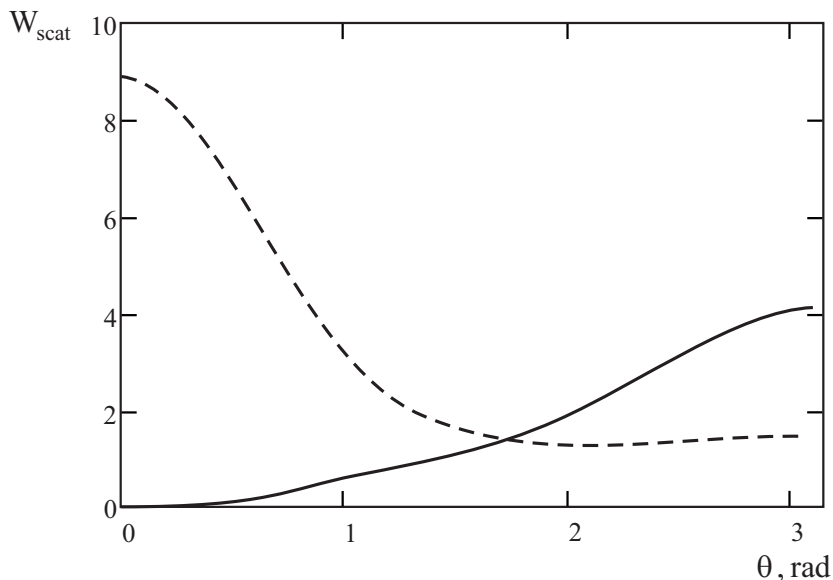


Рис. 8.14. Обозначения те же, что на рис. 8.14 для пятициклового импульса

8.5. Атомная антенна: рассеяние импульса сверхатомной интенсивности

Прогресс в создании ультракоротких лазерных импульсов высокой интенсивности привел к достижению качественно нового уровня технологии и появлению аттосекундной физики. Механизм получения аттосекундных импульсов тесно связан с генерацией высокочастотных гармоник исходного излучения [6]. Разработаны аналитические методы описания динамики оптического электрона для туннельного и многофотонного диапазонов параметров лазерного поля, определяемых несущей частотой Ω , амплитудой электрического поля F_0 и начальной энергией связи в атоме ε_0 . Переход от режима туннельной ионизации к многофотонной ионизации зависит от значения параметра Келдыша $\gamma = \omega\sqrt{|\varepsilon_0|}/F_0$. Если параметр $\gamma \ll 1$, то ионизация носит туннельный характер, а в противоположном пределе $\gamma \gg 1$ процесс является многофотонным.

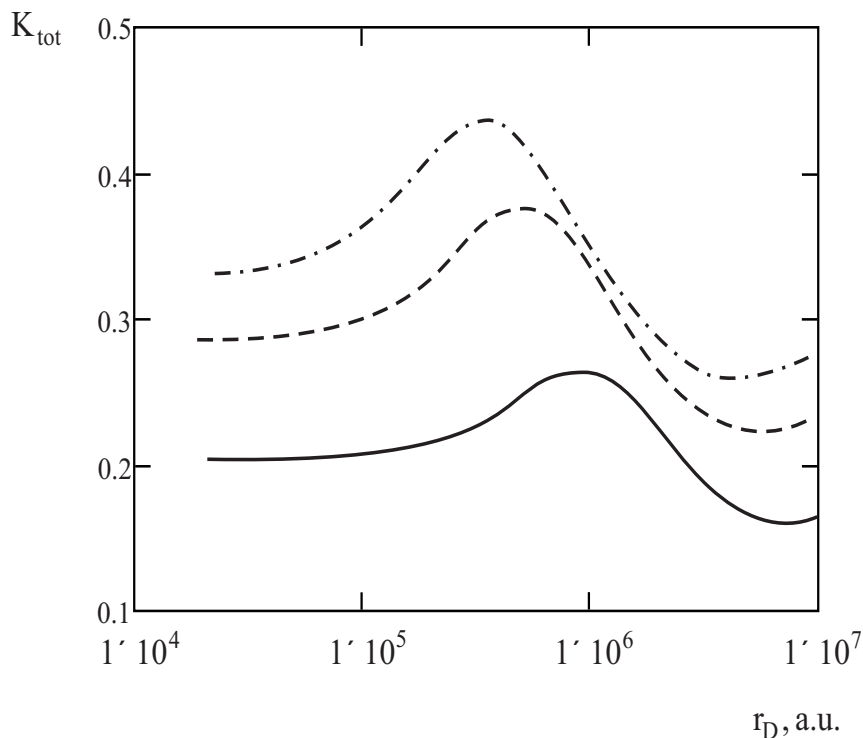


Рис. 8.15. Зависимость коэффициента фазовой модуляции от величины дебаевского радиуса для различных значений несущей частоты полувциклового импульса: сплошная кривая – $\omega_c = 10^{-4}$ а.е., пунктир – $\omega_c = 2 \cdot 10^{-4}$ а.е., штрих-пунктир – $\omega_c = 3 \cdot 10^{-4}$ а.е.

В режиме ионизации подавлением потенциального барьера сверхатомным лазерным полем такая классификация теряет смысл в связи с полным изменением физической картины процесса. Сформулируем полуклассическую модель нелинейного рассеяния лазерного излучения в процессе ионизации атома коротким лазерным импульсом сверхатомной интенсивности. В этом случае после достижения внешним полем значений, достаточных для ионизации поверх потенциального барьера, движение электрона происходит в непрерывном спектре. В ряде работ для описания такого движения использовалось квазиклассическое приближение [7, 8]. Дополнительно удалось учесть, как классический характер движения центра масс образующегося волнового

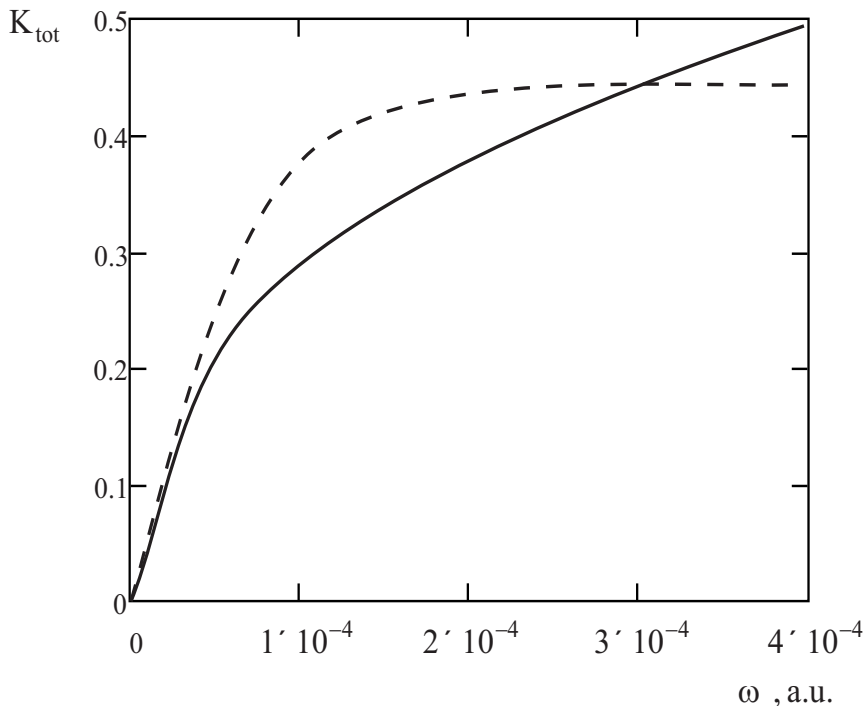


Рис. 8.16. Зависимость коэффициента фазовой модуляции рассеяния полуциклового импульса от несущей частоты для различных значений дебаевского радиуса: сплошная кривая – $r_D = 10^5$ а.е., пунктир – $r_D = 10^6$ а.е., штрих-пунктир – $r_D = 10^7$ а.е.

пакета так и его диффузионное распыление [9, 10]. Не преодолена в полной мере трудность определения начальных параметров сформированного в непрерывном спектре волнового пакета, вследствие чего дальнейшие уточнения, связанные с учетом распыления волнового пакета, в определенной мере, теряют свою ценность. Вопрос учета начальных условий в классическом приближении рассмотрен в [11].

При действии лазерных импульсов сверхатомной интенсивности электрон после ионизации атома можно считать почти свободным, так что его движение управляется лазерным полем, а взаимодействие с атомным остовом является возмущением. Такое приближение было предложено в работе [12] для объяснения механизма передачи энергии лазер-

ного поля внутренним электронам атома. Подобная модель рассмотрена также в работе [13], где получила название "атомная антенна". Эффективный механизм передачи энергии между электронами в процессе многоэлектронной нелинейной ионизации атомных электронов лазерными полями умеренной интенсивности действительно был действительно обнаружен экспериментально в двухэлектронной ионизации гелия и получил адекватное теоретическое объяснение [14].

Применим модель «атомной антенны» к описанию нелинейного рассеяния лазерного излучения. Рассмотрим атом водорода, поскольку процессы в более сложных атомах могут быть описаны подобным образом с использованием эффективного заряда атомного остова [15]. Будем считать поле волны линейно поляризованного лазерного излучения столь сильным, что движение электрона при надбарьерной ионизации близко к одномерному и происходит главным образом вдоль направления электрического поля ОХ, как показано на рис. 8.17. Классическая надбарьерная ионизация атома водорода с главным квантовым числом n возможна, если сумма потенциальной энергии атома $V(r) = -1/r$ и энергии электрона в поле волны $x F(t)$ в точке максимума станет меньше энергии начального связанного состояния $E_n = -1/(2n^2)$. Для точного кулоновского потенциала условие открытия канала надбарьерной ионизации выглядит следующим образом:

$$F_{min} = \frac{1}{16n^4}. \quad (8.5.1)$$

В дальнейших рассуждениях ограничимся рассмотрением электрона в начальном основном состоянии с $n = 1$. Отрыв от атома будет происходить в момент времени t_0 , когда лазерное поле в первый раз достигнет напряженности подавления барьера $F_{min} = 1/16$, и откроется канал надбарьерной ионизации. Этот момент определяет совпадение энергии связанного в атоме электрона с максимальной высотой потенциального барьера и начало классического движения в точке с координатами $|x| = 1/\sqrt{F_{min}} = 4, y = z = 0$ центра масс электронной волновой функции. Момент времени t_0 существенно зависит от характерной амплитуды электрического поля F_0 и формы лазерного импульса.

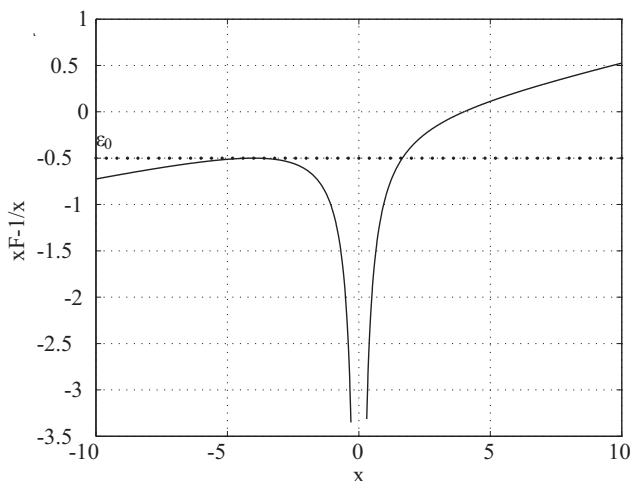


Рис. 8.17. Потенциальная энергия электрона в момент подавления барьера как функция координаты x вдоль направления поляризации лазерного поля

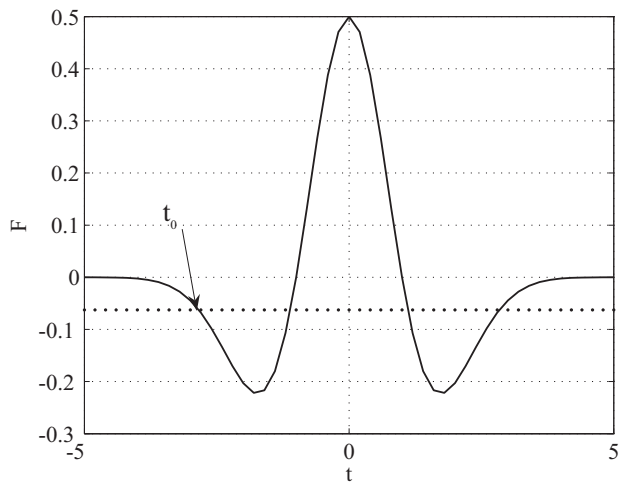


Рис. 8.18. Импульс "мексиканская шляпа" $F(t)$ и время t_0 открытия надбарьерной ионизации; пунктиром показана величина F_{min}

В качестве примера рассмотрим рассеяние импульса в виде вейвлета "мексиканская шляпа":

$$F(t) = F_0 \exp\left(-\frac{t^2}{2\tau^2}\right) \left(1 - \frac{t^2}{\tau^2}\right). \quad (8.5.2)$$

Здесь τ обозначает характерную длительность лазерного импульса. На рис. 8.18 показана форма импульса для $F_0 = 0.5, \tau = 1$ и момент времени, при котором удовлетворяется уравнение (8.5.1). Характер движения электрона после ионизации определяется не только временной формой импульса, но и начальной энергией связи электрона в атоме. Оба этих фактора влияют на момент открытия канала надбарьерного движения. Движение оторванного от атома электрона под действием симметричного падающего лазерного импульса, удовлетворяющего условию $\int_{-\infty}^{\infty} F(t)dt = 0$, выглядит асимметрично, и электрон, в отличие от исходно свободного, в конечном счете получает ненулевую энергию и импульс. Траектория электрона располагается вдоль оси ОХ, и смещение электрона $a(t)$ находится из классического уравнения движения с соответствующими начальными условиями ионизации:

$$\ddot{a} = -F(t), \quad a_0 = 4, \quad \dot{a}_0 = 0. \quad (8.5.3)$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$a(t) = F_0 \tau^2 \left[\exp\left(-\frac{t^2}{2\tau^2}\right) - \exp\left(-\frac{t_0^2}{2\tau^2}\right) \right] + F_0 \left(-\frac{t_0^2}{2\tau^2}\right) t_0(t - t_0) + a_0. \quad (8.5.4)$$

На рис. 8.19 показано смещение (8.5.4) электрона как функция времени. Как видно, траектория электрона частично возвращается назад под действием знакопеременной силы.

Подавление барьера наступает через некоторое время после начала действия импульса лазерного поля на атом. Для оценки вклада фронтальной части лазерного импульса до подавления барьера в общее излучение рассеяния воспользуемся известной формулой Аммосова–Делоне–Крайнова [16], согласно которой вероятность ионизации в единицу времени

$$w(F) = \frac{2 \exp(2)}{\pi |F|} \exp\left(-\frac{2}{3|F|}\right). \quad (8.5.5)$$

В формуле (8.5.5) учтено, что атом водорода находится в исходном основном состоянии. Надбарьерная ионизация происходит при условии

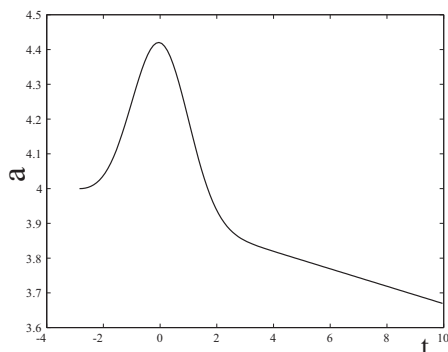


Рис. 8.19. Смещение электрона a как функция времени t

$F \geq 1/16$, а характерное время туннельной ионизации при доатомной напряженности лазерного поля на три порядка больше, чем период колебаний $T \geq 10$ этого поля в видимом диапазоне. Следовательно, начальная часть ультракороткого импульса, которая может содержать несколько периодов, за время $t < t_0$, т. е. до подавления барьера, не вносит значительного вклада в ионизацию атома. Этот механизм не рассматривается далее при обсуждении излучения электрона в процессе ионизации.

Поле излучения на больших расстояниях от атома, вычисленное в классическом дипольном приближении, пропорционально второй производной по времени от дипольного момента \mathbf{d} электрона [17]

$$\mathbf{E}(t) = \frac{1}{c^2 R_0} [[\ddot{\mathbf{d}}\mathbf{n}]\mathbf{n}], \quad (8.5.6)$$

где \mathbf{n} – единичный вектор вдоль направления излучения, R_0 – расстояние от точки излучения до точки наблюдения. Дипольное приближение следует использовать с определенной осторожностью, поскольку для его применимости необходимо выполнение условия $\omega d < c$. Здесь ω – частота излучения электромагнитной волны электроном, c – скорость света. Это означает, что дипольное приближение в данной задаче выполняется, если энергия излученного фотона не превосходит 1 кэВ. Уравнение (8.5.6) дает две составляющие рассеянного излучения, связанные с нелинейной трансформацией импульса и с линейным

когерентным рассеянием света на свободном электроне без изменения формы рассеянного импульса по отношению к форме падающего импульса. Важно отметить, что в существенно нелинейном случае эти компоненты невозможно разделить.

Задача определения временной зависимости всего рассеянного импульса в модели "атомной антенны" решается достаточно просто. Требуется определить временную зависимость электрического дипольного момента электрона, рассчитать его вторую производную, а спектр гармоник может быть найден с помощью преобразования Фурье. Для целого ряда квантовых процессов важен именно спектральный состав излучения $dw_\omega/d\omega$, т. е. функция распределения фотонов по частоте. Спектральное распределение фотонов может быть найдено также, как и в случае тормозного излучения, вызванного столкновением заряженных частиц [13]:

$$\frac{dw_\omega}{d\omega} = \frac{2}{3\pi c^3} |\ddot{\mathbf{d}}_\omega|^2, \mathbf{d}_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{d}(t) \exp(i\omega t) dt. \quad (8.5.7)$$

С момента надбарьерной ионизации и вплоть до окончания импульса главный механизм распада основного состояния атома связан с квантовомеханическим распылыванием электронного волнового пакета. В это время атомный потенциал не играет особой роли в динамике электрона. Этот факт позволяет описать квантовую эволюцию системы аналитически. Нестационарное уравнение Шрёдингера без учета потенциала атома имеет вид

$$i\dot{\Psi} = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{1}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi. \quad (8.5.8)$$

Его решение описывается волковской функцией волнового пакета, которая изначально совпадает с невозмущенной волновой функцией основного состояния и учитывает внешнее переменное поле векторного потенциала $\mathbf{A}(t)$, связанным с электрическим полем лазерной волны соотношением [17] $\mathbf{F}(t) = -\frac{1}{c} \partial \mathbf{A}(t) / \partial t$, $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$ – оператор импульса.

Динамика электронной волновой функции в этих условиях может быть описана как эволюция волнового пакета с помощью преобразо-

вания Крамерса [10]

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp(-\nabla \mathbf{a}) \exp \left(-i \int_0^t \frac{\mathbf{A}^2(\tau)}{2c^2} d\tau \right) \varphi_0(\mathbf{r}, 0). \quad (8.5.9)$$

Здесь $\mathbf{a}(t) = \frac{1}{c} \int_0^t \mathbf{A}(\tau) d\tau$ – вектор классического смещения электрона, $\varphi_0(\mathbf{r}, t)$ – волновой пакет электрона в лазерном поле, $\varphi_0(\mathbf{r}, 0)$ – волновая функция электрона в момент подавления барьера.

Для больших интенсивностей лазерного поля точный вид волнового пакета не имеет принципиального значения для выяснения основных особенностей нелинейного рассеяния. Для удобства вычислений начальное сферически симметричное s -состояние оптического электрона опишем гауссовым распределением

$$\varphi_0(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{(\pi \Gamma^2)^{3/2}} \exp \left(-\frac{r^2}{2\Gamma^2} \right), \quad (8.5.10)$$

нормированным на единицу. Для основного состояния атома водорода положим ширину $\Gamma \sim 1$. Если понадобится сделать расчет более точным, волновую функцию начального состояния можно представить в виде суперпозиции нескольких функций Гаусса. После преобразования Крамерса найдем выражение для эволюции волнового пакета в виде:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \chi(t) f(\mathbf{r}, t),$$

$$f(\mathbf{r} - \mathbf{a}(t)) = \exp \left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{a}(t))^2}{2(\Gamma^2 + it)} \right),$$

$$\chi(t) = \frac{1}{(\pi(\Gamma^2 + it))^{3/2}} \exp \left(-i \int_0^t \frac{\mathbf{A}^2(\tau)}{2c^2} d\tau \right). \quad (8.5.11)$$

Аналитическое выражение (8.5.11) для волновой функции показывает, что плотность вероятности электрона осциллирует вдоль направления поляризации поля вблизи начального распределения. Функция постепенно расплывается вследствие дисперсии волнового пакета. На рис. 8.20 расплывание электронной плотности $\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ показано в последовательные моменты времени $t = t_0$ и $t = t_0 + 3$.

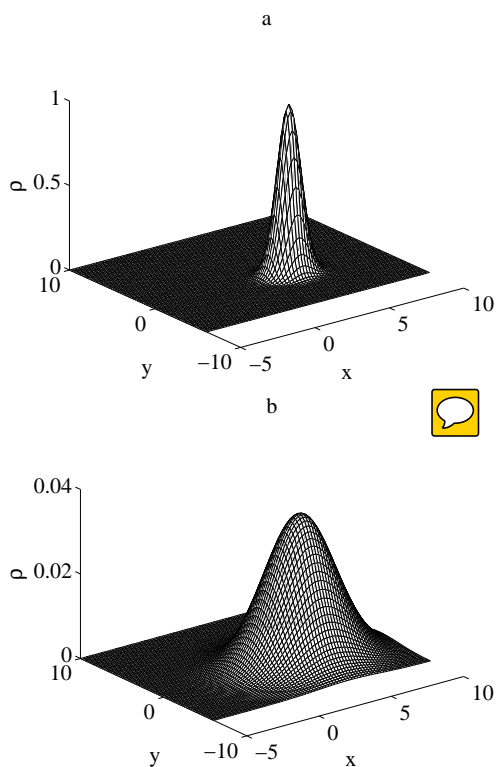


Рис. 8.20. Электронная плотность в последовательные моменты времени:
a – ($t = t_0$); b – ($t = t_0 + 3$)

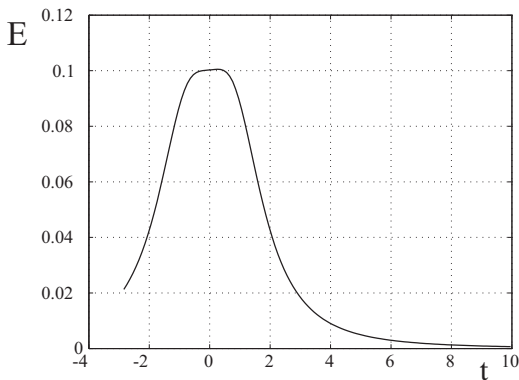


Рис. 8.21. Электрическое поле E рассеянного излучения как функция времени t

Для определения излучения электрона рассчитаем ускорение, которое пропорционально среднему значению силы взаимодействия электрона с лазерным полем и кулоновским центром. В результате имеем

$$\ddot{\mathbf{d}} = \int \frac{\mathbf{r}}{r^3} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} + \mathbf{F}(t). \quad (8.5.12)$$

Здесь учтено, что дипольный момент электрона отличается от радиус-вектора только знаком. Самосогласованное описание предполагает, что начальное условие обеспечивает выполнение равенства $\ddot{\mathbf{d}}(t_0) = 0$, которое означает, что излучение отсутствует, когда электрон находится на вершине барьера и обладает нулевым ускорением. Это позволяет установить соответствие полуклассического и полностью классического описания излучения фотона в случае ионизации за счет подавления потенциального барьера.

Для расчета интеграла по объему в уравнении (8.5.12), удобно применить преобразование Фурье кулоновского потенциала. Воспользуемся формулой

$$\int \frac{e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{r} d\mathbf{r} = -\frac{4\pi}{q^2}. \quad (8.5.13)$$

С учетом уравнения (8.5.13) будем иметь

$$\frac{\mathbf{r}}{r^3} = -\nabla \frac{1}{r} = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int \frac{i\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{q^2} d\mathbf{q}. \quad (8.5.14)$$

Подставляя уравнение (8.5.14) в (8.5.12) и принимая в расчет (8.5.11), имеем

$$\ddot{d}_x(t) = \frac{1}{2\pi^2} |\chi(t)|^2 \int \frac{iq_x}{q^2} \Phi(\mathbf{q}, \mathbf{a}) d\mathbf{q} + F(t). \quad (8.5.15)$$

Функция

$$\Phi(\mathbf{q}, \mathbf{a}) = \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} |f(\mathbf{r} - \mathbf{a}(t))|^2 d\mathbf{r} \quad (8.5.16)$$

представляет собой форм-фактор распределения $|f(\mathbf{r})|^2$, смещенный на расстояние $\mathbf{a}(t)$ от центра атома. Расчет внутреннего интеграла в уравнении (8.5.16), после замены переменной $\mathbf{r} - \mathbf{a} = \mathbf{r}'$, дает

$$\Phi(\mathbf{q}, \mathbf{a}) = [4\pi b^2]^{3/2} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{a} - q^2 b^2), \quad (8.5.17)$$

где введено обозначение $b^2 = (\Gamma^2 + t^2/\Gamma^2)/4$. Подставляя (8.5.17) в (8.5.15) и используя цилиндрическую симметрию задачи, имеем

$$\ddot{d}_x = I(a, b) + F(t), \quad (8.5.18)$$

где

$$I(a, b) = \frac{1}{2\pi^2 \Gamma^3} \int \frac{iq_x}{q^2} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{a} - q^2 b^2) d\mathbf{q}. \quad (8.5.19)$$

В уравнении (8.5.19) предполагается, что $|\chi(t)|^2 = 1/(4\pi\Gamma^2 b^2)^{3/2}$. В дальнейшем в уравнении (8.5.19) необходимо проинтегрировать по импульсу. Для этих целей преобразуем интеграл к виду

$$I(a, b) = \frac{2}{\pi\Gamma^3} \int_0^\infty \frac{qa \cos(aq) - \sin(qa)}{qa^2} \exp(-q^2 b^2) dq. \quad (8.5.20)$$

Здесь проведено интегрирование по угловым переменным. После интегрировании по модулю импульса получим:

$$I(a, b) = \frac{1}{\pi\Gamma^3 b a^2} \left[a\sqrt{\pi} \exp\left(-\frac{a^2}{4b^2}\right) - \pi b \operatorname{erf}\left(\frac{a}{2b}\right) \right], \quad (8.5.21)$$

где $\operatorname{erf}(u)$ – интеграл ошибок [18].

Формулы (8.5.18) и (8.5.21) позволяют легко рассчитать временную зависимость рассеянного поля для любой формы падающего лазерного импульса. На рис. 8.21 показано рассеянное поле импульса

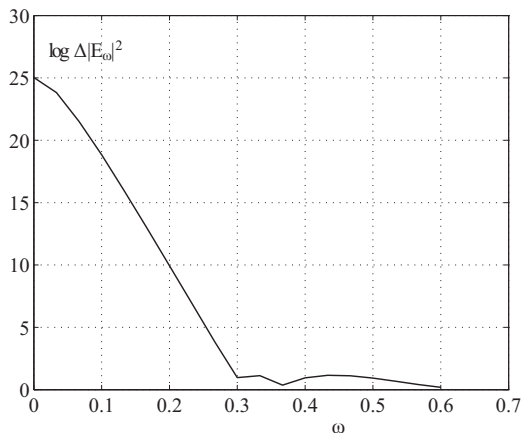


Рис. 8.22. Спектр рассеянного излучения

(8.5.2) как функция времени, а рис. 8.22 показывает его спектральное представление.

Данная модель является развитием полуклассического приближения для описания генерации высоких гармоник, сопровождающих нелинейную ионизацию атомов под действием сверхсильных лазерных полей. Отличительной особенностью полученного решения является аналитический учет взаимодействия электронного волнового пакета с атомным остовом. При этом не возникает проблема определения параметра удара, и нет особенности в сечении, возникающей при центральном ударе электрона в атомный остов, что обычно для классических моделей. В итоге получены универсальные аналитические выражения для временной формы рассеянного импульса.

Модель может быть применена для лазерных импульсов произвольной формы, поскольку использованная функция "мексиканская шляпа" является фреймом для разложения произвольного импульсного сигнала. Полученные в работе результаты позволяют достаточно просто оценить экспериментальную возможность наблюдения нелинейного преобразования ультракороткого сверхинтенсивного лазерного импульса и рассчитать его спектральное распределение в простых атомарных средах без использования серьезных компьютерных ресурсов в дополнение к методу расчета линейного рассеяния при низких

лазерных интенсивностях [19]. Используемая физическая модель та же, что в [20], однако имеются существенные отличия в деталях решения. Последовательно применяемая калибровка взаимодействия электрона с лазерным полем в форме импульса позволила представить все аналитические результаты в компактной и ясной форме, а описание импульсов с помощью вейвлетов вида "мексиканская шляпа" получить полностью аналитическое решение для формы рассеянного импульса. Кроме того, учтен снос, приобретаемый электроном за счет ускорения полем при ионизации. Важность этого эффекта отмечена в [21], но обсуждение носит качественный характер.

В данной модели описано воздействие очень короткого импульса, так, что существенного сокращения длительности рассеянного импульса не происходит. Однако проведенные расчеты объясняют механизм укорочения рассеянного импульса и в том случае, когда исходный лазерный импульс обладает большой интенсивностью, но длителен по времени действия, т. е. содержит много периодов колебаний. В этом случае электрон вырывается на фронте импульса, и волновая функция расплывается за атомные времена, так, что излучение вторичных фотонов происходит также, как и для короткого импульса за времена, соизмеримые с атомными. Особенностью рассмотренного нами основного состояния является отсутствие узлов в распределении электронной плотности. В общем случае произвольного s -состояния имеется $n - 1$ узловая поверхность. Это позволяет получать большее количество осцилляций рассеянного поля при отрыве электрона от атома, то есть путем предварительного заселения состояний управлять не только длительностью, но и структурой рассеянного импульса.

Литература

1. *Astapenko V.A.* Simple formula for photoprocesses in ultrashort electromagnetic field // *Phys. Lett. A.* 2010. V. 374. P. 1585–1590.
2. *Астапенко В.А.* Расчет вероятности фотопроцессов, индуцированных ультракороткими электромагнитными импульсами // *Известия Вузов. Физика.* 2010. Т. 53. С. 3–9.

3. *Arustamyan M.G., Astapenko V.A.* Phase control of two-level system excitation by short laser pulses // *Laser Phys.* 2008. V. 18.
4. *Астапенко В.А.* Рассеяние ультракороткого импульса электромагнитного излучения на атоме в широком спектральном диапазоне // *ЖЭТФ.* 2011. Т. 139. С. 228–234.
5. *Астапенко В.А.* Рассеяние ультракороткого электромагнитного импульса в плазме. // *Физика плазмы.* 2011. Т. 37. С. 1041–1046.
6. *Pukhov A., Gordienko S., Baeva T.* Temporal structure of attosecond pulses from intense laser-atom interactions // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91. P. 173002(1-4).
7. *Connerade J.P., Conen K., Dietz, K., Henkel J.A* theoretical discussion of strong laser field effects: intense short pulses interacting with atoms and molecules // *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.* 1992. V. 25. P. 3771–3796.
8. *Lewenstein M., Kulander K.C., Schafer K.J., Bucksbaum P.H.* Rings in above-threshold ionization: A quasiclassical analysis // *Phys. Rev. A.* 1995. V. 51. P. 1495–1507.
9. *Grobe R., Fedorov M.V.* Packet spreading, stabilization, and localization in superstrong fields // *Phys. Rev. Lett.* 1992. V. 68. P. 2592–2595.
10. *Golovinski P.A.* Classical stabilization of an atom in a superatomic laser field // *Laser Phys.* 1993. V. 3. P. 280–284.
11. *Головинский П.А., Михайлов Е.М., Преображенский М.А.* Полуклассическое описание генерации гармоник при надпороговой ионизации атомов // *Письма в ЖТФ.* 2009. Т. 35. С. 48–55.
12. *Головинский П.А., Бердышев А.В.* Отрыв внутренних электронов атомов сильным лазерным полем // *Письма в ЖТФ.* 1987. Т. 13. С. 208–211.
13. *Кучиев М.Ю.* Атомная антенна // *Письма в ЖЭТФ.* 1987. Т. 45. С. 319–321.
14. *Golovinski P.A.* Direct two-electron bound-free transition in an intense laser field // *Laser Phys.* 1997. V. 7. P. 655–659.

15. Головинский П.А., Михайлов Е.М. Атомная антенна: нелинейное рассеяние импульса сверхатомной интенсивности // ЖТФ. 2011. Т. 81. С. 1–9.
16. Ammosov M.A., Golovinski P.A., Kiyan I.Yu., Krainov, V.P., Ristich V.M. Tunneling ionization of atoms and atomic ions in an intense laser field with a nonhomogeneous space-time distribution // J. Opt. Soc. Am. B. 1992. V. 9. P. 1225–1230.
17. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. – М.: Физматлит. 2006.
18. Абрамовиц М., Стиган И.А. Справочник по специальным функциям. – М.: Наука. 1979.
19. Golovinski P.A., Mikhailov E.M. Scattering of ultrashort laser pulse by atomic systems // Laser Phys. Lett. 2006. V. 3. P. 259–262.
20. Fedorov M.V., Peatross J. Strong-field photoionization and emission of light in the wave-packet-spreading regime // Phys. Rev. A. 1995. V. 52. P. 504–513.
21. Емелин М.Ю., Рябикин М.Ю., Сергеев А.М. Генерация мощного аттосекундного всплеска при ионизации возбужденных атомов мощным сверхкоротким лазерным импульсом // ЖЭТФ. 2008. Т. 133. С. 243–259.

Глава 9

Процессы в лазерных полях релятивистской интенсивности

9. 1. Общие соотношения

С ростом интенсивностей полей выше характерной интенсивности 10^{16} Вт/см² атомы ионизируются, и на первый план выходит проблема взаимодействия быстрых свободных электронов с ионами. Реальные мишени – атомы, ионы и сами атомные ядра, являются составными системами, имеющими собственную внутреннюю структуру. Учет динамики частиц мишени может самым существенным образом отразиться на релятивистском рассеянии электронов в сверхсильных лазерных полях [1]. При рассмотрении этого эффекта мы будем иметь в виду процессы двух типов: реальные переходы, сопровождающиеся изменением состояния мишени, и виртуальные переходы, при которых конечное состояние не отличается по энергии от начального, но ко-

торые могут оказать существенное воздействие на процесс рассеяния налетающего электрона.

Физическая суть поляризационного тормозного эффекта и в этом случае заключается в том, что внешнее поле вызывает динамическую поляризацию мишени и тем самым создает ее дополнительное взаимодействие с налетающим электроном. За счет поляризации мишени в потенциале электрона появляется переменная составляющая, которая изменяется со временем с частотой внешнего поля ω . Это дополнительное взаимодействие вызывает переходы электрона в непрерывном спектре с изменением его энергии ($\pm n\omega$) и вносит вклад в амплитуду тормозного эффекта. Поляризационная амплитуда интерферирует с амплитудой, возникающей от тормозного эффекта при рассеянии электрона в статическом поле мишени, и в ряде случаев может ее превосходить. Таким образом, динамическая часть тормозного эффекта неотделима от его статической части, и они, вообще говоря, должны рассматриваться совместно. Сильное световое поле способно вызвать поляризацию мишени не только на основной частоте, но также и на кратных частотах. Соответствующие гармоники взаимодействия способны давать вклад в многофотонный вынужденный тормозной эффект.

Лазерные поля в современных экспериментах достигли интенсивностей свыше 10^{20} Вт/см², превысив релятивистскую интенсивность 10^{19} Вт/см², при которой кинетическая энергия электрона сопоставима с энергией покоя электрона. Релятивистский вынужденный тормозной эффект с учетом поляризационных эффектов рассматривался для однофотонных процессов в [2,3]. Мы покажем, как можно рассмотреть релятивистский вынужденный тормозной эффект с учетом поляризации мишени, а также рассчитать возбуждение мишени при рассеянии релятивистских электронов в присутствии сильного электромагнитного поля. Прежде чем переходить к решению этой задачи, остановимся на общих правилах расчета процессов в сильном световом поле, основываясь на методе континуального интегрирования [4]. Хотя эти правила могут быть получены методами, основанными на каноническом квантовании, использование континуального интегрирования дает те же результаты более коротким путем. Как известно, лагран-

жиан спинорной квантовой электродинамики имеет вид

$$L(x) = \bar{\psi}(x)\gamma^\mu(i\partial_\mu + eA_\mu(x)\psi_x) - m\bar{\psi}\psi - \frac{1}{4}(\gamma^\mu A_\nu(x) - \gamma^\nu A_\mu(x))^2. \quad (9.1.1)$$

В этом разделе мы используем релятивистскую систему единиц, в которой $\hbar = c$, а для заряда электрона $e^2 = 1/137$. Производящий функционал для функций Грина может быть записан в форме

$$\begin{aligned} W(\eta, \bar{\eta}, \eta_\mu) = \\ = \frac{1}{N} \int \exp \int i(L(x) + \eta\bar{\psi} + \bar{\eta}\psi + \eta^\mu A_\mu) d^4x \Pi \delta(\gamma^\mu A_\mu) dA d\psi d\bar{\psi}, \end{aligned} \quad (9.1.2)$$

где $1/N$ – нормировочный множитель.

Поскольку предполагается рассматривать сильные электромагнитные поля, то из вектор-потенциала A_μ целесообразно выделить классическую часть A_μ^c :

$$A_\mu = A_\mu^c + a_\mu. \quad (9.1.3)$$

Далее классическую часть поля A_μ^c мы будем считать заданной внешним сильным электромагнитным полем и интегрирование по нему в континуальном интеграле (9.1.2) не производить. Интегрируя по частям лагранжиан свободного электромагнитного поля и преобразуя функционал стандартным образом – сдвигом, уничтожающим линейные по $\bar{\psi}, \psi$ и a_μ члены в показателе экспоненты в формуле (9.1.2), получим производящий функционал для функций Грина в виде

$$\begin{aligned} W(\eta, \bar{\eta}, \eta_\mu) = \exp \left\{ i \int d^4x \left(-ie \frac{\delta}{\delta \bar{\eta}} \gamma^\alpha \frac{\delta}{\delta \eta} \frac{\delta}{\delta \eta^\alpha} \right) \times \right. \\ \times \int \exp \left[-i \int \bar{\eta}(x) G(x, y) \eta(y) d^4x d^4y - \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{2} \int d^4x d^4y \eta^\mu(x) D_{\mu\nu}(x - y) \eta^\nu(y) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (9.1.4)$$

Здесь функция Грина свободного электромагнитного поля $D_{\mu\nu}(x - y)$ в калибровке Фейнмана имеет обычный вид:

$$D_{\mu\nu}(x - y) = (2\pi)^{-4} \int d^4k \exp[ik(x - y)] \left(-\frac{g_{\mu\nu}}{k^2} \right). \quad (9.1.5)$$

Функция Грина $G(x, y) = D^{-1}$ для фермионов, в отличие от случая свободного электрон-позитронного поля, является решением уравнения

$$\gamma^\mu (i\partial_\mu + eA_\mu^c(x))G(x, y) = \delta^4(x - y), \quad (9.1.6)$$

в котором учтено наличие сильного внешнего поля. Явный вид волновой функции для электрона в поле плоской электромагнитной волны приведен в [5]. Приведенные выше соотношения дают картину Фарри для переменного поля. Далее все процессы можно рассчитывать в координатном представлении точно так же, как и в отсутствие внешнего поля с учетом замены функции Грина свободного электрона функцией Грина электрона во внешнем поле A_μ^c .

Рассмотрим рассеяние релятивистского электрона на мишени в поле электромагнитной волны. Выражение (9.1.4) для производящего функционала позволяет сразу записать амплитуду рассеяния с переходом рассеивающегося электрона из состояния i в состояние f в первом порядке теории возмущений по взаимодействию электрона с четырехтоком j_μ^{ba} перехода мишени из состояния a в состояние b в виде

$$S_{fi} = -ie \int d^4x \bar{\psi}_f(x) \hat{A}_{ba}(x) \psi_i(x), \quad (9.1.7)$$

где вектор-потенциал A_{ba}^μ , создаваемый мишенью, связан с четырех-вектором j_μ^{ba} соотношением

$$A_{ba}^\mu = \int d^4y D^{\mu\nu}(x - y) j_\mu^{ba}(y). \quad (9.1.8)$$

Учитывая квазиэнергетический характер состояний мишени в периодическом по времени сильном поле, ток перехода можно представить в виде следующего разложения в ряд Фурье по квазиэнергетическим гармоникам:

$$j_\mu^{ba}(y) = \sum j_\mu^{ba(n)}(y) \exp(i(\omega_{ba} + n\omega)t), \quad (9.1.9)$$

где $\omega_{ba} = \varepsilon_b - \varepsilon_a$ — частота перехода между начальным состоянием мишени с квазиэнергией ε_a и конечным состоянием с квазиэнергией ε_b . Таким образом, мишень в конечном состоянии может как сохранить исходное, так и перейти в другое квазиэнергетическое состояние, в первом случае мы имеем упругое ($b = a$) рассеяние на мишени с

учетом ее поляризуемости. Во втором случае состояние мишени при столкновении с электроном меняется ($b \neq a$). Очевидно, что оба случая имеют общую физическую природу, и их целесообразно рассматривать, по-возможности, совместно.

Подставляя (9. 1.9) в (9. 1.8) с учетом (9. 1.5), получим

$$A_{ba}^{\mu} = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(i\Omega_n t) \int A_{ba}^{(n)\mu}(k) \exp(-ikx) dk, \quad (9. 1.10)$$

где

$$A_{ba}^{(n)\mu}(k) = D^{\mu\nu}(k_n) \int dy \exp(-iky) j_{\nu}^{ba(n)}(y),$$

$$\Omega_n = \omega_{ba} + n\omega, k_n = (k, \Omega_n).$$

Эффектами запаздывания можно пренебречь, если характерные импульсы $k \gg \Omega_n/c$.

При рассеянии электрона невозмущенным потенциалом мишени ($\Omega_n = \omega_{ba} = 0$) ее поле воспринимается как статическое. При рассеянии на поляризационном потенциале или рассеянии с изменением состояния мишени запаздыванием можно пренебречь только при малой фотонности процесса и малых частотах, когда период осцилляции частиц мишени намного превышает время распространения электромагнитного взаимодействия на характерное расстояние мишени l ($l/c \approx 1/c k \ll 1/\Omega_n$).

Рассмотрим, какими будут выражения для дифференциальных сечений процессов в поле линейно поляризованной волны лазерного излучения с вектором-потенциалом

$$A_{\mu}^c = a_{\mu} \cos \varphi, \quad \varphi = kx. \quad (9. 1.11)$$

Воспользовавшись решением уравнения Дирака для линейно поляризованной волны [5], получим амплитуду перехода $p - p'$ в виде

$$S_{fi} = \sum_m \sum_{m=n+s} S_{fi}^{(n,s)},$$

$$S_{fi}^{(n,s)} = -\frac{ie}{(p_0 p'_0)^{1/2}} (\bar{u}_{p'r'} \Gamma u_{pr}) 2\pi \cdot \delta(s\omega + q_0 - q'_0 + \Omega_n), \quad (9. 1.12)$$

где

$$\begin{aligned} \Gamma = \hat{A}_n(\mathbf{k})B_0 + e \left(\frac{\hat{a}\hat{k}\hat{A}_n(\mathbf{k}_s)}{2kp'} + \frac{\hat{A}_n(\mathbf{k}_s)\hat{k}\hat{a}}{2kp} \right) B_1 - \\ - \frac{e^2 a^2 (kA_n(\mathbf{k}_s))\hat{k}}{2(kp)(kp')} B_2, \quad \mathbf{k}_s = s\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{q}'. \end{aligned} \quad (9.1.13)$$

Здесь использованы обозначения:

$$\begin{aligned} B_n(s\alpha\beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi \cos^n \varphi \exp(f(\varphi)), \quad f(\varphi) = \\ = -(\alpha \sin \varphi - \beta \cos 2\varphi - s\varphi), \end{aligned} \quad (9.1.14)$$

$$q_\mu = p_\mu - \frac{e^2 a^2}{4kp} k_\mu \quad (9.1.15)$$

– средний кинетический импульс или квазиимпульс,

$$\alpha = e \left(\frac{ap}{kp} - \frac{ap'}{kp'} \right), \quad \beta = \frac{e^2 a^2}{8} \left(\frac{1}{kp} - \frac{1}{kp'} \right). \quad (9.1.16)$$

Отметим, что парциальные амплитуды $S_{fi}^{(m)}$ имеют вид, подобный амплитуде излучения в поле волны, с тем отличием, что вектор-потенциал является распределенной функцией в пространстве импульсов и не обладает свойством поперечности. Условие $q'_0 = q_0 + s\omega + \Omega_n$ дает связь между квазиэнергиями начального и конечного состояния.

Сечение m -фотонного вынужденного тормозного эффекта, просуммированное по конечным состояниям и усредненное по начальным, по общим правилам [5] будет иметь вид

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma^{(m)}}{do} = \frac{4\alpha^2 m^2}{2(4\pi^2)} \sum_{rr'} |U_{p'r'}^-| \sum_{m=n+s} \Gamma^{(n,s)} |U_{pr}|^2 = \\ = 2\alpha^2 m^2 \text{Sp} \left[\Gamma \left(\frac{\hat{p} + m}{2m} \right) \Gamma \left(\frac{\hat{p}' + m}{2m} \right) \right]. \end{aligned} \quad (9.1.17)$$

Вычисление следа проводится стандартным образом, но является весьма громоздким, но вполне элементарным. Окончательный результат имеет вид

$$\begin{aligned} d\sigma^{(n)}/do = & \frac{2\alpha^2}{(4\pi)^2} \{ 2(Dp)(Dp') - D^2(pp') + 2(C_1 - C_2)[p(-\overline{k(aA)D} + \\ & + \overline{a(kA)D} + \overline{a(AD)k} + \overline{A(kD)a} + \overline{k(aD)A}p')] - 2C_2a^2(Ak)^2pp'] + \\ & + 2a^2(kp')(A^2(kp) - 2(pA)(kA)(C_1 - C_2)^2 + m^2D^2 + \\ & + 4m^2C_2(C_1 - C_2)(Ak)^2a^2) \}. \end{aligned} \quad (9.1.18)$$

Символ $\overline{\overline{}}$ над слагаемым в формуле (9.1.18) указывает на наличие в формуле, кроме данного члена, также члена со знаком плюс, отличающегося перестановкой крайних стоящих под знаком множителей. Символом $\overline{}$ мы обозначили наличие, кроме данного члена, также перестановочного члена со знаком минус. Например, $\overline{\overline{k(aA)D}} = k(aA) - D(aA)k$. В формуле (9.1.18) введены обозначения

$$\begin{aligned} D_\mu &= A_\mu C_0 + k_\mu C_3 + 2C_2[(Ak)a_\mu - (Aa)k_\mu], \\ C_0 &= B_0, \quad C_1 = B_1/2kp, \quad C_2 = B/2kp', \quad C_3 = -e^2a^2B_2/2(kp)(kp'). \end{aligned} \quad (9.1.19)$$

Индексы n и s в формулах (9.1.18) и (9.1.19) опущены, поскольку они легко восстанавливаются по предыдущим выражениям (9.1.12) и (9.1.17). Если внешнее поле отсутствует ($a = 0$) и рассеяние происходит на чисто кулоновском потенциале, то $A = (0, A_0)$, $A_0(\mathbf{k}) = 4\pi/k^2$. В этом случае $D = A$ и сечение (9.1.18) переходит в формулу для рассеяния релятивистского электрона на кулоновском центре, вычисленную в первом борновском приближении.

Для циркулярно поляризованной плоской электромагнитной волны ее 4-потенциал можно записать в виде

$$a = a_1 \cos \varphi + a_2 \sin \varphi, \quad \varphi = kx, \quad (9.1.20)$$

a_1, a_2 одинаковы по величине и ортогональны друг другу: $a_1^2 = a_2^2$, а $a_1 a_2 = 0$. Соответствующая волновая функция является решением уравнения Дирака. Амплитуду перехода можно преобразовать к виду (9.1.13), где

$$B_0 = F_0; \quad B_1 = 1; \quad B_2 = -F_0; \quad \hat{a} = \hat{a}_1 F_1 + \hat{a}_2 \hat{F}_2. \quad (9.1.21)$$

Здесь введены обозначения:

$$\begin{aligned} F_0(s) &= J_{-S}(z) \exp(is\varphi_0) , \\ F_1(s) &= [J_{S+1}(z) \exp(i(l+s)\varphi_0) + J_{S+1}(z) \exp(i(s-l)\varphi_0)]/2 , \\ F_1(s) &= [J_{S+1}(z) \exp(i(s+l)\varphi_0) - J_{S+1}(z) \exp(i(s-l)\varphi_0)]/2i . \end{aligned} \quad (9.1.22)$$

Кроме того,

$$\begin{aligned} q_\mu &= p_\mu - e^2 \frac{a^2}{2(kp)} k_\mu , \\ \alpha_1 &= e \left(\frac{a_1 p}{kp} - \frac{a_1 p'}{kp'} \right) , \quad \alpha_2 = e \left(\frac{a_2 p}{kp} - \frac{a_2 p'}{kp'} \right) . \end{aligned} \quad (9.1.23)$$

При этом формула для дифференциального сечения рассеяния сохраняет вид (9.1.17).

Таким образом, полученные результаты позволяют производить расчеты различных процессов столкновения электронов со сложными мишенями в полях релятивистской интенсивности. К числу таких процессов могут быть отнесены столкновения с возбуждением многозарядных ионов и возбуждение тяжелых ядер. Аналогичные соотношения могут быть получены и для сечения рождения электрон-позитронных пар при столкновении электронов с ядрами в поле лазерной волны.

9. 2. Приближение мгновенного удара

Важнейшей особенностью столкновений электронов с различными элементарными мишенями в лазерных полях с релятивистской интенсивностью является малая энергия отдельного кванта лазерного излучения по сравнению с энергиями переходов, возникающих в результате столкновения. На временном языке это означает, что столкновение происходит за время, которое намного меньше характерного времени изменения поля лазерного излучения. Наличие таких несоизмеримых по величине параметров позволяет развить приближенное описание процессов столкновения электронов с мишенями, считая, что в каждый момент времени энергия электрона вполне определяется полем лазерного излучения.

Перенесение приближения мгновенного удара на описание релятивистских процессов в рамках квантовой теории поля требует учета возможности изменения числа частиц, как в реальных, так и в виртуальных процессах. В нерелятивистской теории, если речь идет о частицах, а не о квазичастицах, их число не меняется, а меняются состояния за счет взаимодействия между частицами: электронов с электронами, электронов с фотонами, электронов с ядрами и т.д. Изменение числа частиц в теории поля можно описывать либо в формализме вторичного квантования с применением техники операторов рождения и уничтожения частиц, либо в формализме функционального интегрирования по всем возможным конфигурациям полей. Нашей целью в данном разделе является получение максимально простых расчетных формул для процессов в лазерных полях релятивистской интенсивности за счет выделения главных вкладов в амплитуду перехода. Поскольку лазерное поле является сильным, то можно выделить классическую составляющую в поле лазерного излучения, а остальные степени свободы электромагнитного поля считать малыми возмущениями.

Выражение (9.1.4) для производящего функционала позволяет записать амплитуду рассеяния с переходом электрона из состояния i в состояние f в первом порядке теории возмущений по взаимодействию электрона с четырех-током j_μ^{ba} перехода мишени из состояния a в состояние b в виде

$$S_{fi} = -ie \int d^4x j_\mu^{fi} A_{ba}^\mu, \quad (9.2.1)$$

где вектор-потенциал A_{ba}^μ , создаваемый мишенью, связан с четырех-вектором j_μ^{ba} соотношением

$$A_{ba}^\mu = \int d^4x j_\mu^{fi} A_{ba}^\mu, \quad (9.2.2)$$

а ток перехода электрона

$$j_\mu^{fi} = e \bar{\psi}_f(x) \gamma_\mu \psi_i(x). \quad (9.2.3)$$

Для жестких столкновений динамика процессов разыгрывается за время, малое в сравнении с периодом внешнего поля. Это позволяет воспользоваться приближением мгновенного удара и получить вероятность того или иного события в единицу времени, после чего ее следует

проинтегрировать по длительности всего лазерного импульса. Характерную скорость изменения энергии электрона внешним полем можно оценить как eA_0/τ_0 , и она за время столкновения $1/\Omega$ должна привести к малому изменению энергии налетающего электрона на фоне энергии изменения энергии Ω при столкновении, т. е.

$$\frac{eA_0}{\tau_0\Omega^2} \ll 1, \quad (9.2.4)$$

что выполняется для жестких процессов в полях релятивистской интенсивности.

Для дальнейшего анализа приближения мгновенного удара воспользуемся тем, что движение электрона в поле лазерной волны носит квазиклассический характер. Тогда ток перехода электрона j_μ^{fi} можно записать в виде

$$j_\mu^{fi} = e\bar{u}_{\mathbf{p}'}\gamma_\mu u_{\mathbf{p}} \exp(-i(S_f - S_i)), \quad (9.2.5)$$

где S_f и S_i – классическое действие для электрона в конечном и начальном состоянии соответственно, а $\bar{u}_{\mathbf{p}'}, u_{\mathbf{p}}$ – медленно меняющиеся во времени дираковские спиноры. Действие в поле плоской электромагнитной волны

$$S = -px - \int_0^{kx} \frac{e}{(kp)} [(\mathbf{p}\mathbf{A}_0) - e\mathbf{A}_0^2/2] d\varphi, \quad (9.2.6)$$

где \mathbf{A}_0 – вектор-потенциал поля электромагнитной волны, \mathbf{p} – квазиимпульс. Интегрирование ведется по фазе электромагнитной волны. Соответственно,

$$S_f - S_i = -\Delta px - \int_0^{kx} \frac{(\Delta\mathbf{p}\mathbf{A}_0)}{(kp)} d\varphi. \quad (9.2.7)$$

С учетом этого, вектор-потенциал, создаваемый током рассеивающегося электрона можно записать как

$$A_\mu(x) = (2\pi)^{-4} e \int d^4y d^4k \exp[ik(x-y)] \left(-\frac{g_{\mu\nu}}{k^2 + i\varepsilon} \right) \bar{u}_{\mathbf{p}'}\gamma_\mu u_{\mathbf{p}} \times \\ \times \exp \left(-i \left(-\Delta px - \int_0^{kx} \frac{(\Delta\mathbf{p}\mathbf{A}_0)}{(kp)} d\varphi \right) \right). \quad (9.2.8)$$

Учтем, что $\mathbf{A}_0(\varphi)$ медленно меняющаяся функция, в том смысле, что характерная частота внешнего поля намного меньше частот перехода электрона и мишени. Если выполняется условие $l/c\tau_0 \ll 1$, то в этом случае можно пренебречь эффектами запаздывания и считать, что на интервале интегрирования поле не успевает существенно измениться, а соотношение, задающее изменение энергии и импульса при столкновении, определяется интегралом

$$(2\pi)^{-4} \int d^3y \int dt \exp \left(-i \left(-(q - \Delta p)x - \int_0^{t/\tau_0} \frac{(\Delta \mathbf{p} \mathbf{A}_0)}{(kp)} d\varphi \right) \right) \approx \\ \approx \delta(\mathbf{q} - \Delta \mathbf{p}) \delta \left(\varepsilon_b - \varepsilon_a + \varepsilon_{\mathbf{p}}(0) - \varepsilon_{\mathbf{p}_0}(0) - \frac{\Delta \mathbf{p} \mathbf{A}_0(0)}{(kp)\tau_0} \right), \quad (9.2.9)$$

возникающим при вычислении матричного элемента (9.2.1). Формула (9.2.9) выражает закон сохранения энергии и импульса в системе электрон-мишень с адиабатической точностью. В нерелятивистском пределе $kp \approx m/\tau_0$. С учетом того, что $A_0 \approx F\tau_0/c$, определим, что полученная от поля энергия в одном столкновении есть $\Delta\varepsilon \approx |\Delta \mathbf{p}| eF\tau_0/m$, где $\Delta \mathbf{p}$ – переданный импульс. Эта оценка согласуется с нерелятивистской теорией мгновенного удара Дыхне [6]. Таким образом, для расчета жестких процессов, вызванных электронным ударом, можно полагать, что в каждый момент времени налетающий на мишень электрон имеет определенную энергию и импульс, зависящие от начальных значений этих величин и текущей фазы внешнего поля.

Дальнейшее существенное упрощение при расчетах скоростей процессов связано с описанием движения электрона в поле лазерной волны как классического [7]. Совокупность сделанных приближений позволяет свести расчет процесса, вызванного столкновением электрона с мишенью в лазерном поле высокой интенсивности, к вычислению интеграла

$$K = \int_0^t v(\tau) \sigma(\tau) d\tau, \quad (9.2.10)$$

который дает вероятность рассматриваемого процесса в расчете на один электрон и одну элементарную мишень в единице объема за лазерный импульс, при этом $v(\tau)$ – скорость электрона, получаемая из

решения классических уравнений движения, $\sigma(\tau)$ — сечение реакции в данный момент времени при заданной скорости налетающего электрона. Полное число реакций в единице объема за время импульса t вычисляется через концентрацию электронов n_e , атомных ядер n_0 и равно величине $K n_e n_0$.

Нами сформулировано приближение мгновенного удара для описания столкновения электронов в полях лазерных импульсов различной интенсивности. Лазерное поле в этом приближении рассматривается как классическое, и его квантовые флуктуации не учитывались. Это дает простой метод расчета выхода реакций, вызываемых электронными столкновениями в сильном поле, в том числе для случая ультракоротких лазерных импульсов релятивистской интенсивности [8], что является обобщением более ранних результатов, сформулированных для монохроматических лазерных полей. Наиболее важным приложением рассмотренного метода является расчет ядерных реакций, стимулированных лазерными полями релятивистской интенсивности. Аналогичное приближение лежит в основе расчета нелинейного томсоновского рассеяния [9].

9.3. Классическое движение электрона в лазерном поле

Для описания ультракоротких импульсов воспользуемся базисом вейвлетов в виде производных от функции Гаусса:

$$a_m(t) = -\frac{d^m}{dt^m} \exp(-t^2/\tau^2). \quad (9.3.1)$$

На рис. 9.1 показаны функции a_m для $m = 1$ и $m = 2$ («мексиканская шляпа»). Мы остановим выбор на функции «мексиканская шляпа», которая является хорошим приближением для импульса, подвергнутого предельной временной компрессии. Кроме того, что этот базис является полным, он обеспечивает, как это будет видно позднее, аналитическое интегрирование уравнений движения. Для проведения соответствующих численных процедур разложения имеются хорошо разработанные стандартные компьютерные средства. Рис. 9.2 показывает возможность представления с помощью всплесков более длинных

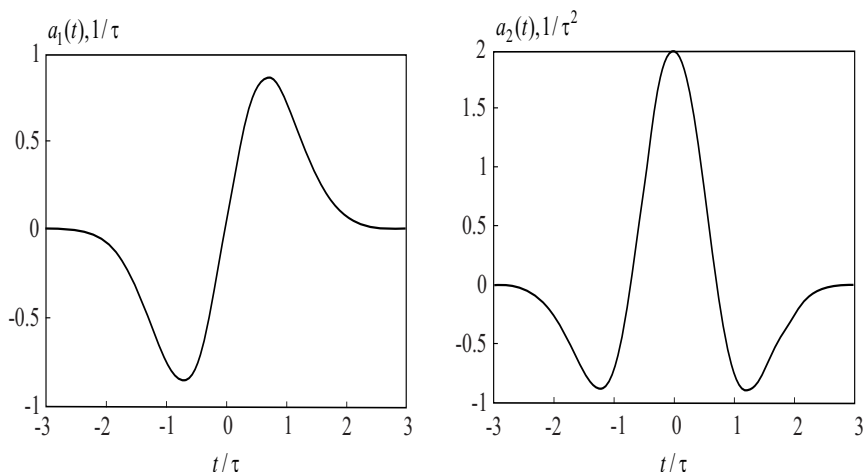


Рис. 9.1. Графики вейвлетов первой и второй производной функции Гаусса ($\tau = 5$ фс)

импульсов. В данном примере аппроксимация с точность выше одного процента достигнута при использовании пяти базисных функций.

Далее будем работать в рамках модели плоских электромагнитных волн ультракороткой длительности. Это означает пренебрежение поперечной неоднородностью лазерного пучка и влиянием пондеромоторной силы, которая может быть довольно большой при использовании жесткой фокусировки. Уравнение движения частицы с зарядом e в поле плоской электромагнитной волны допускает точное решение в квадратурах [7]. Рассмотрим движение заряда во внешнем поле, которое описывается потенциалом

$$A^\mu(x) = h(\varphi)e^\mu, \quad \varphi = (kx). \quad (9.3.2)$$

Здесь $e^\mu = (1, 0, 0, 0)$ – вектор поляризации, $n^\mu = (1, 0, 0, 1)$ – единичный направляющий вектор волны, $k^\mu = n^\mu$, $(kx) = t - z$ – фаза волны, $h(\varphi)$ – функция, задающая форму всплеска. Тензор электромагнитного поля

$$F^{\mu\nu} = f^{\mu\nu} \frac{\partial h}{\partial \varphi}, \quad f^{\mu\nu} = k^\mu e^\nu - k^\nu e^\mu. \quad (9.3.3)$$

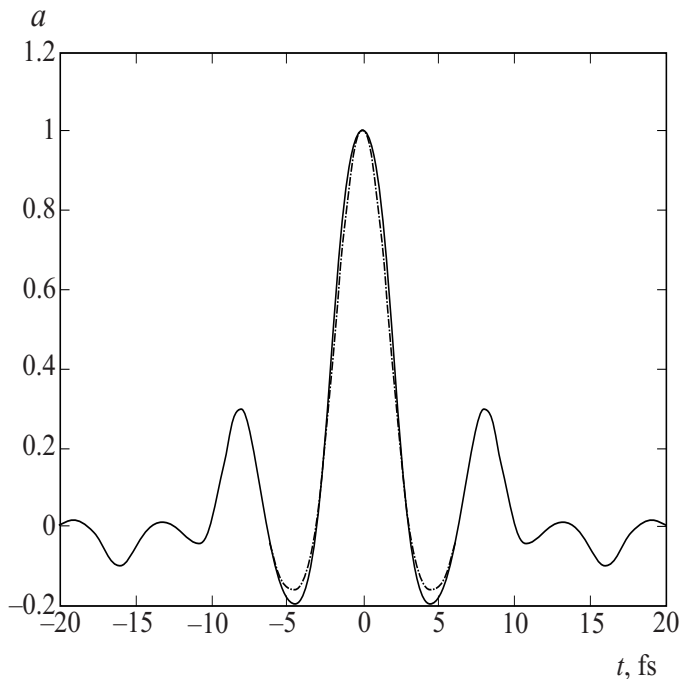


Рис. 9.2. График временной зависимости короткого импульса: исходный импульс – пунктирная линия с точками; его представление с помощью базисных функций «мексиканская шляпа» – сплошная линия

Соотношения $n^2 = 0$, $e^\mu e_\mu = -1$, $n^\mu e_\mu = 0$ позволяют существенно упростить интегрирование уравнения движения, имеющего исходную форму

$$m\ddot{x}^\mu = eF^{\mu\nu}(x)\dot{x}_\nu. \quad (9.3.4)$$

Выберем начальные условия в виде $x^\mu(0) = 0$, $\dot{x}^\mu(0) = v^\mu$, и запишем уравнение (9.3.4) с учетом (9.3.2) как

$$\frac{d}{ds} (m\dot{x}^\mu + ehe^\mu) = q \frac{\partial h}{\partial \varphi} k^\mu (e^\nu \dot{x}_\nu), \quad (9.3.5)$$

где s – собственное время. Свчртка (9.3.5) с вектором k_μ дацт первый интеграл движения

$$(k^\nu \dot{x}_\nu) = (k^\nu v_\nu). \quad (9.3.6)$$

Следовательно, $\dot{\varphi} = (k^\nu v_\nu)$ и $\varphi = (k^\nu v_\nu)s$. Умножая уравнение (9.3.5) скалярно на e_μ , будем иметь

$$\frac{d}{ds} (m(e^\nu \dot{x}_\nu) - eh) = 0 \quad (9.3.7)$$

и

$$(e^\nu \dot{x}_\nu) = \frac{e}{m} h(\varphi) + (e^\nu v_\nu). \quad (9.3.8)$$

Это соотношение позволяет исключить неизвестную величину $(e\dot{x})$ в правой части уравнения (9.3.5):

$$\frac{d}{ds} (m\dot{x}^\mu + eh e^\mu) = e \frac{\partial h}{\partial \varphi} k^\mu \left(\frac{e}{m} h(\varphi) + (e^\nu v_\nu) \right). \quad (9.3.9)$$

После интегрирования получим

$$\dot{x}^\mu = v^\mu - \frac{e}{m} h e^\mu + \frac{e}{m} k^\mu \frac{(e^\nu v_\nu)}{(k^\nu v_\nu)} h + \frac{e^2 k^\mu}{2m^2 (k^\nu v_\nu)} h^2. \quad (9.3.10)$$

Найденное точное решение для 4-х скоростей допускает произвольную форму импульса.

Через тензор $f^{\mu\nu}$ 4-скорость в формуле (9.3.10) можно записать компактнее как

$$\dot{x}^\mu = v^\mu + \frac{eh}{m(k^\alpha v_\alpha)} f^{\mu\beta} v_\beta + \frac{e^2 h^2}{2m^2 (k^\alpha v_\alpha)^2} f^{\mu\nu} f_{\nu\beta} v^\beta. \quad (9.3.11)$$

Получим теперь конкретный вид решения для движения электрона в поле плоской волны с потенциалом вида «мексиканская шляпа» a_2 :

$$A^\mu(\varphi) = b \left(\frac{2}{\tau^2} - \frac{4}{\tau^4} \varphi^2 \right) \cdot \exp \left(-\frac{\varphi^2}{\tau^2} \right) e^\mu. \quad (9.3.12)$$

Здесь τ – характерная длительность лазерного импульса, b – нормировочная постоянная, определяемая из интенсивности электромагнитного излучения в максимуме импульса. На рис. 9.3 показана зависимость интенсивности лазерного излучения от времени для потенциала (9.3.12).

Мы считаем, что электрон первоначально покоился. Тогда выражение для энергии электрона приобретает вид

$$E = m\dot{x}^0 = m + \frac{e^2}{2m} h^2 ((k^\alpha v_\alpha)s), \quad (9.3.13)$$

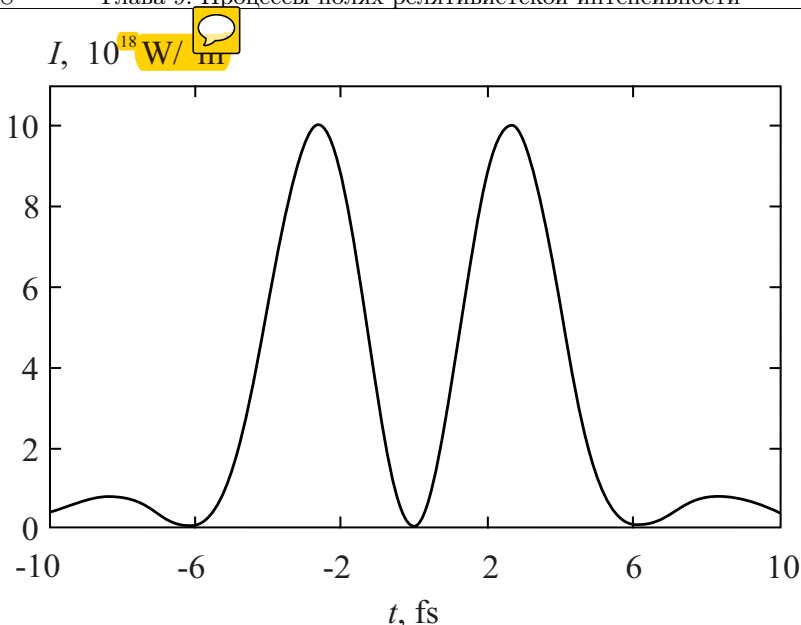


Рис. 9.3. Зависимость интенсивности лазерного излучения от времени
($I_{\max} = 10^{19}$ Вт/см², $\tau = 5$ фс)

а максимальная кинетическая энергия электрона определяется соотношением

$$E_{\max} = \frac{2e^2 b^2}{m \tau^4}. \quad (9.3.14)$$

Для значения $I_{\max} = 10^{19}$ Вт/см² величина $E_{\max} = 21.7$ МэВ, а зависимость (9.3.13) как функция лабораторного времени изображена на рис. 9.4. Величина энергии приблизительно пропорциональна квадрату потенциала поля, а растяжение энергетической зависимости в центральной части графика связано с замедлением времени для релятивистского электрона.

Закон движения электрона можно записать как

$$x^\mu = v^\mu s - e^\mu \frac{e}{m} \int h((k^\alpha v_\alpha)s) ds + \quad (9.3.15)$$

$$+ \frac{e}{m} k^\mu \frac{(e^\alpha v_\alpha)}{(kv)} \int h((k^\beta v_\beta)s) ds + \frac{e^2 k^\mu}{2m^2 (k^\alpha v_\alpha)} \int h^2((k^\beta v_\beta)s) ds.$$

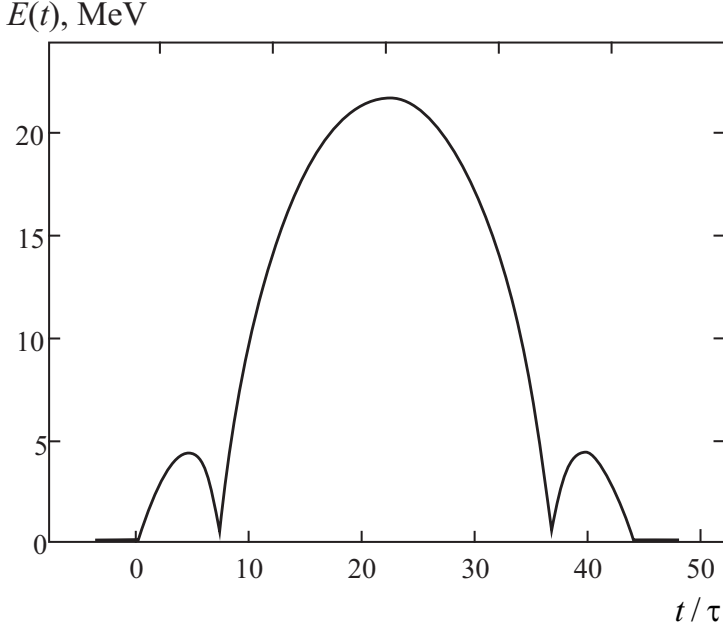


Рис. 9.4. Зависимость энергии электрона от времени ($I_{\text{max}} = 10^{19}$ Вт/см², $\tau = 5$ фс)

Для выбранного нами импульса (9.3.12) и нулевых начальных условий получим

$$\int h((k^\alpha v_\alpha)s) ds = 2b \frac{s}{\tau^2} \exp\left(-\frac{((k^\alpha v_\alpha)s)^2}{\tau^2}\right), \quad (9.3.16)$$

$$\begin{aligned} \int h^2((k^\alpha v_\alpha)s) ds = \\ = \frac{b^2}{4\tau^8} \left(4 \exp\left(-\frac{2((k^\alpha v_\alpha)s)}{\tau^2}\right) s\tau^2 (\tau^2 - 4((k^\alpha v_\alpha)s)^2) + \right. \\ \left. + \frac{3\sqrt{2}\pi\tau^5 \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}(k^\alpha v_\alpha)s}{\tau}\right)}{(k^\beta v_\beta)} \right). \end{aligned} \quad (9.3.17)$$

Здесь функция $\operatorname{erf}(x)$ – интеграл вероятностей [10]. Таким образом, получено точное классическое решение уравнения движения электро-

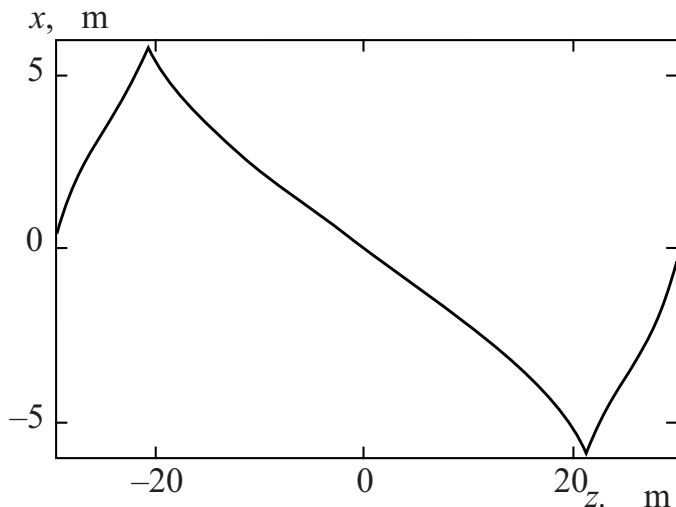


Рис. 9.5. Траектория электрона в поле импульса электромагнитной волны с потенциалом (9.3.12) при интенсивности $I_{\max} = 10^{19}$ Вт/см², $\tau = 5$ фс

на в поле волны, имеющей потенциал в виде отдельного всплеска «мексиканская шляпа». Характерная траектория электрона показана на рис. 9.5. Подобный вид имеют и траектории в полях гармонической волны с внезапным включением.

Из формулы (9.3.10) непосредственно следует, что после прохождения любого импульса в виде плоской волны $\hbar \rightarrow 0$, и первоначально покоящийся электрон снова останавливается. Это свойство справедливо только для произвольной плоской волны, и оно нарушается в фокусе лазерного излучения, а также при учете радиационного трения. В то же время, при учете этих эффектов в уравнениях движения не удается найти замкнутые аналитические решения. В таком виде задача еще далека от полного исследования, а основные результаты основываются на прямом численном моделировании. Для описания движения электронов в полях импульсов более сложной формы можно использовать линейную декомпозицию вектора потенциала по всплескам «мексиканская шляпа».

9. 4. Нелинейное томсоновское рассеяние

Задача об излучении заряда, движущегося по заданной произвольной траектории, в принципиальном отношении решена в классической электродинамике [11]. Спектральная компонента векторного потенциала, создаваемого точечным зарядом e , движущимся по траектории $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$ со скоростью $\mathbf{v}(t) = d\mathbf{r}/dt$, может быть записана в виде

$$\mathbf{A}_\omega = \frac{e^{ikR}}{R} \int_{-\infty}^{\infty} e \mathbf{v} \exp [i (\omega t - \mathbf{k} \mathbf{r}(t))] dt. \quad (9.4.1)$$

где R – расстояние от области, где движется заряд до точки наблюдения, ω – частота излучения, k – волновое число. Вектор $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ задает направление излучения. Формула для двойного дифференциального распределения энергии излучения по частоте и телесному углу излучения имеет вид

$$\frac{d^2 \varepsilon_{\mathbf{n}\omega}}{d\omega d\Omega} = \frac{cR^2}{4\pi^2} |[\mathbf{k} \mathbf{A}_\omega]|^2. \quad (9.4.2)$$

Аналогичное соотношение является основой и для расчета магнитно-тормозного излучения с тем отличием, что движение в магнитном поле является периодическим, и ответ выражается не через интеграл Фурье, а через компоненты ряда Фурье.

Вычисление распределения по энергии нелинейного томсоновского рассеяния по всем направлениям обычно сводится к расчету спектральной компоненты \mathbf{A}_ω по формуле (9.4.1), а затем, после подстановки полученного результата в формулу (9.4.2), к интегрированию по телесному углу $d\Omega$. Для сложных законов движения этот прямой путь является долгим и связан со значительными вычислительными трудностями.

Поэтому дальнейшие вычисления основаны на приближении мгновенного спектра, первоначально развитом в применении к задаче о синхротронном излучении ультрарелятивистских частиц со значениями параметра $\gamma = E/m = (1 - v^2)^{-1/2} \gg 1$. Основное предположение данного приближения состоит во введении мгновенного спектра мощности излучения, определяемого скоростью $\mathbf{v}(t)$ и ускорением $\mathbf{a}(t)$ в

заданный момент времени t . Тогда спектрально-угловое распределение сводится к интегралу

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega d\Omega} = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) dt. \quad (9.4.3)$$

Здесь $f(t)$ – спектрально-угловое распределение излучения в момент времени t :

$$f(t) = \frac{e^2\omega^2}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt' (\mathbf{e}_\lambda^* \mathbf{v}_1) (\mathbf{e}_\lambda \mathbf{v}_2) \times \exp[i\omega(t_1 - t_2) - i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)], \quad (9.4.4)$$

$$\mathbf{v}_{1,2} = \mathbf{v}(t \mp t'/2), \quad \mathbf{r}_{1,2} = \mathbf{r}(t \mp t'/2), \quad t_1 = t - t'/2, \quad t_2 = t + t'/2,$$

\mathbf{e}_λ^* – единичные комплексные векторы поляризации тормозного излучения. Главное отличие рассматриваемого случая от синхротронного излучения состоит в наличии в ускорении как нормальной, так и тангенциальной составляющих, в то время как в случае магнитно-тормозного излучения имеется только нормальная компонента.

Подробное изложение приближения мгновенного спектра можно найти в [11]. Фактическим условием применимости этого приближения является возможность пренебречь изменением величины внешнего лазерного поля на длине излучения, что определяется неравенством $R/\gamma\tau \ll 1$, где R – характерный радиус кривизны траектории, τ – характерное время изменения поля. Для параметров релятивистского движения в электромагнитном поле этот критерий можно выразить через отношение u импульса $p = eF\tau$, получаемого частицей от поля с напряженностью F , к релятивистскому масштабу импульса m в виде неравенства $u/(1+u^2) \ll 1$, которое хорошо выполняется в полях ультрарелятивистской интенсивности.

Выражению (9.4.4) можно придать более удобный для вычислений вид, если не учитывать поляризацию поля излучения:

$$f_1(t) = \frac{e^2\omega^2}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt' [\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 - 1] \times \exp[i\omega(t_1 - t_2) - i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)]. \quad (9.4.5)$$

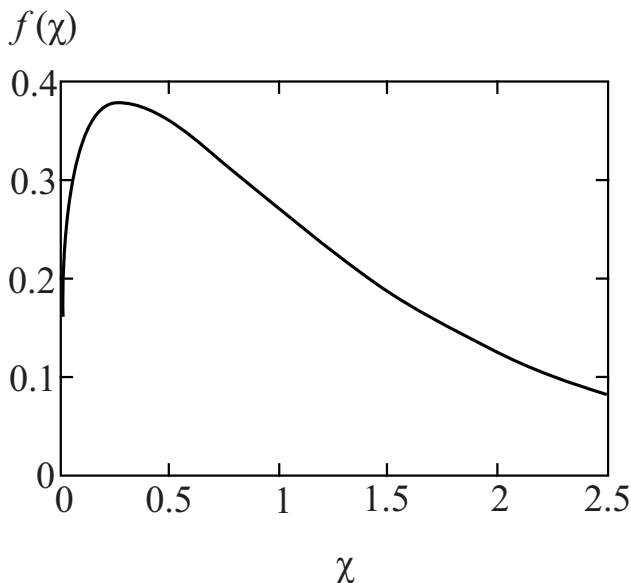


Рис. 9.6. Вид спектральной функции

Дальнейшие упрощения возможны для ультррелятивистского случая, которым мы ограничиваемся ($\gamma \gg 1$). Тогда

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega dt} = \frac{e^2\omega}{\sqrt{3}\pi\gamma^2} \int_{\chi}^{\infty} K_{5/3}(\xi) d\xi, \quad (9.4.6)$$

где $\chi = 2\omega/3w\gamma^3$, $w = |\dot{\mathbf{v}}|$ – модуль ускорения. Явный вид входящей в формулу безразмерной зависимости $\frac{3\sqrt{3}\chi}{4\pi} \int_{\chi}^{\infty} K_{5/3}(\xi) d\xi$ приведен на рис. 9.6.

Спектральное распределение за весь импульс находится интегрированием

$$\frac{d\varepsilon(\omega)}{d\omega} = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d^2\varepsilon}{d\omega dt} \right) dt. \quad (9.4.7)$$

Таким образом, при наличии решения классической задачи о движении электрона во внешнем поле в ультррелятивистском пределе распределение излучения по частотам находится интегрированием мно-

венного спектра излучения (9.4.6) по времени импульса. Вск, что необходимо знать для такого приближенного расчтца – это зависимость скорости электрона и его ускорения от времени.

Произведем вычисление спектра нелинейного томсоновского рассеяния электроном лазерного излучения релятивистской интенсивности с использованием точного решения для импульса в виде «мексиканской шляпы». Формулы (9.4.5), (9.3.10), (9.3.15) задают скорость электрона и его ускорение в параметрической форме как функции собственного времени s . Первая компонента $u^\mu(s) = \dot{x}^\mu$ даёт производную $dt/ds = u^0(s)$. Следовательно, обычная скорость ($c = 1$)

$$v_i(t) = \frac{u^i(s)}{u^0(s)}, \quad (9.4.8)$$

а ускорение

$$a_i = \frac{\dot{u}^i(s)}{u^0(s)^2} - \frac{u^i(s) \cdot u^0(s)}{[u^0(s)]^3}. \quad (9.4.9)$$

Подставляя (9.4.8) и (9.4.9) в формулу (9.4.6), а затем, интегрируя полученное выражение по времени, можно определить спектральное распределение излучения электрона за весь импульс.

На рис. 9.7 показано спектральное распределение излучения электрона, соответствующее интенсивности лазерного излучения $I_{\max} = 10^{19}$ Вт/см². Из рисунка видно, что распределение имеет максимум на определённой частоте. Для значений пиков интенсивности лазерного поля в диапазоне $I_{\max} = 10^{19} - 10^{25}$ Вт/см² частоты, соответствующие максимуму спектрального распределения излучения электрона, лежат в диапазоне от 0.65 эВ до 1583 эВ. Полученные значения весьма малы, если их сравнивать с величинами энергий, необходимых для ядерных реакций, однако распределения имеют достаточно протяжённые «хвосты», что позволяет говорить о возможности создания перестраиваемого источника, вплоть до получения жесткого рентгеновского излучения. Для иллюстрации, изменения спектрального распределения рассеянной энергии для разных интенсивностей лазерного излучения представлены на рис. 9.8.

Рассчитаем радиационные потери за время движения электрона в целом. Заряженная частица, движущаяся в поле электромагнитной волны, испытывает действие силы радиационного трения. Эта сила

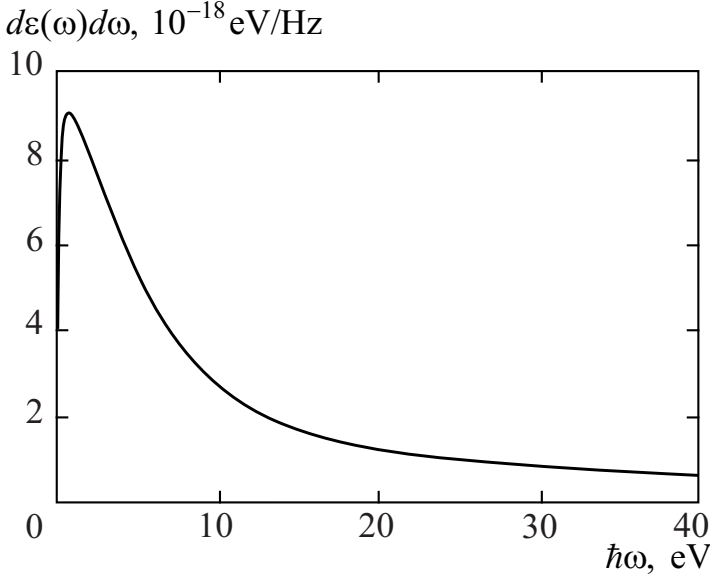


Рис. 9.7. Спектральное распределение излучения электрона, соответствующее интенсивности лазерного излучения $I_{\max} = 10^{19}$ Вт/см²

изменяет как характеристики траектории частицы, так и зависимость энергии от времени. Именно последняя зависимость определяет возможность участия электрона в ядерных реакциях с пороговыми энергиями до нескольких МэВ.

Классическое описание радиационного трения приведено в [12]. Нашей целью в данном разделе является расчет излученной энергии за весь импульс. Для этого достаточно использовать апробированную для магнитотормозного излучения релятивистскую версию формулы Лармора:

$$\frac{d\varepsilon_r}{dt} = \frac{2e^2\gamma^6}{3} \left(\dot{\mathbf{v}}^2 - (\mathbf{v} \times \dot{\mathbf{v}})^2 \right). \quad (9.4.10)$$

После элементарных преобразований она приобретает более удобный для расчетов вид:

$$\frac{d\varepsilon_r}{dt} = \frac{2e^2}{3(1-\mathbf{v}^2)} \left[\mathbf{a}^2 + \frac{(\mathbf{a}\mathbf{v})^2}{1-\mathbf{v}^2} \right], \quad (9.4.11)$$

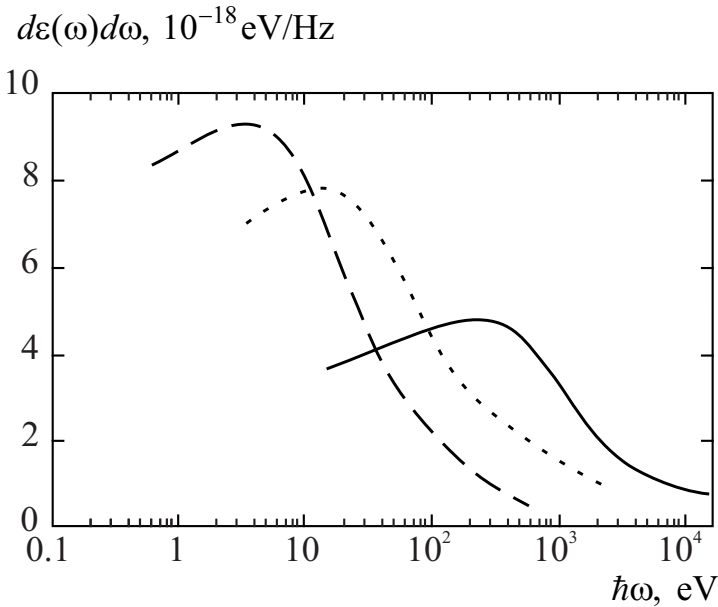


Рис. 9.8. Спектральное распределение энергии излучения электрона по частотам за весь импульс: пунктирная линия соответствует значению $I_{\max} = 10^{20}$ Вт/см², точечная линия – $I_{\max} = 10^{21}$ Вт/см², сплошная линия – $I_{\max} = 10^{22}$ Вт/см²

где \mathbf{a} и \mathbf{v} — обычные трехмерные ускорение и скорость. Очевидно, что согласно этому выражению радиационные потери не могут быть отрицательными. Отметим также релятивистскую инвариантность формулы (9.4.11).

Для расчета по формуле (9.4.11) нужно воспользоваться зависимостями $\mathbf{a}(t)$ и $\mathbf{v}(t)$, рассчитанными ранее без учета действия силы радиационного трения. Ясно, что в результате влияния радиационного трения в соответствии с формулой (9.4.11) энергия электрона на всех участках траектории будет меньше, чем без его учета. Такой расчет носит характер поправки в первом порядке теории возмущений по силе радиационного трения и не претендует на описание радиационных потерь, сопоставимых по величине с кинетической энергией электрона.

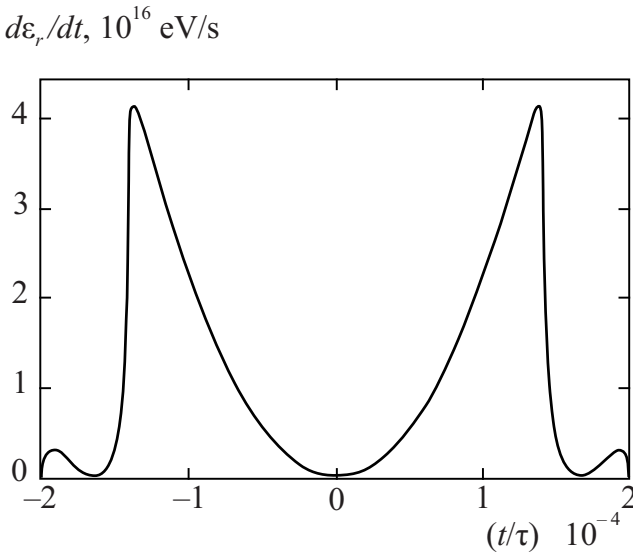


Рис. 9.9. Мощность радиационного излучения электрона в зависимости от времени для интенсивности лазерного излучения 10^{22} Вт/см^2 ($\tau = 5 \text{ фс}$)

При проведении численных расчтгов учтем, что полученные ранее решения дают зависимости величин координат и ускорений от собственного времени: $u^\mu = dx^\mu/ds$, $\dot{u}^\mu = du^\mu/ds$, где $ds = dt\sqrt{1-\mathbf{v}^2}$. В силу этого уравнение (9.4.11) запишется в виде

$$\frac{d\varepsilon_r}{dt} = \frac{2e^2}{3} \left[\dot{\mathbf{u}}^2(s) + (\dot{\mathbf{u}}(s) \cdot \mathbf{u}(s))^2 \right]. \quad (9.4.12)$$

где $\mathbf{u}(s) = d\mathbf{x}/ds$, $\dot{\mathbf{u}}(s) = d\mathbf{u}/ds$. При численном интегрировании уравнения (9.4.12) следует использовать известную из точного решения зависимость $t = t(s)$. Вид рассчитанной зависимости $d\varepsilon_r/dt$ от времени представлен на рис. 9.9. Результаты получены по формуле (9.4.11) без дополнительных приближений. Их сравнение с расчетами, получаемыми путём интегрирования формулы (9.4.6) по всему спектру частот, позволяют проверить точность приближения мгновенного спектра.

Полные потери энергии электрона для различных интенсивностей лазерного излучения приведены в табл. 1. Значения энергетических потерь, приведённые в таблице, являются малыми в сравнении с мак-

симальной кинетической энергией электрона и практически пропорциональны интенсивности лазерного излучения. Максимум кинетической энергии также пропорционален интенсивности лазерного поля, т. е. отношение максимума кинетической энергии электрона к полным радиационным потерям остается почти постоянным. Видно, что результаты расчетов потерь с использованием двух существенно различных подходов приблизительно одинаковы и сближаются с ростом интенсивности излучения. Это подтверждает ожидаемое улучшение точности приближения мгновенного спектра с ростом релятивистского фактора γ .

Поскольку величины потерь энергии являются малыми по сравнению с максимумом кинетической энергии электрона, то рассмотрение тормозного излучения как поправки, ранее принятое нами без оценки, является оправданным. Можно сделать вывод, что для большинства вычислений движения электронов, излучения и столкновений в присутствии лазерного импульса релятивистской интенсивности можно пренебрегать радиационными поправками или учитывать их по теории возмущений.

Расчеты базировались на классической модели взаимодействия отдельного электрона с плоской волной. В результате вычислен энергетический выход рассеянного излучения, являющийся интегральным по углам и дифференциальным по спектру. Основное сделанное допущение состоит в приближении заданной траектории классического движения электрона в поле плоской волны и приближении мгновенного спектра излучения. Эти приближения позволяют получить достаточно простые аналитические формулы, удобные для проведения конкретных расчетов. Для описания ультракороткого лазерного импульса использованы всплески вида «мексиканская шляпа», которые дают компактное и ясное представление ультракороткого лазерного импульса при описании явлений рассеяния.

Эффект конечности фокусного пятна лазерного излучения требует специального учета при описании томсоновского рассеяния, поскольку поперечное движение электронов может стать сопоставимым по размеру с пятном. Этот эффект ведет к возможной потере электрона из плосковолновой части поля еще до окончания импульса. Дальнейшие исследования должны учитывать также многоэлектронные эффекты

Таблица 1. Полные потери энергии электрона из-за радиационного трения для различных нормировок интенсивностей лазерного излучения

I , Вт/см ²	ε_r , эВ (теория возмущений)	ε_r , эВ (интеграл по спектру)	E_{max} , МэВ (максимальная энергия электрона)
10^{19}	0.256	0.19	$2.225 \cdot 10^1$
10^{20}	2.562	2.27	$2.179 \cdot 10^2$
10^{21}	$2.5616 \cdot 10^1$	$2.429 \cdot 10^1$	$2.175 \cdot 10^3$
10^{22}	$2.562 \cdot 10^2$	$2.455 \cdot 10^2$	$2.174 \cdot 10^4$
10^{23}	$2.562 \cdot 10^3$	$2.435 \cdot 10^3$	$2.174 \cdot 10^5$
10^{24}	$2.62 \cdot 10^4$	$2.404 \cdot 10^4$	$2.174 \cdot 10^6$

в плазме. Ситуация, соответствующая излучению от различных электронов, расположенных в различных местах, означает последовательное суммирование рассеянных волн, если расстояние между точками меньше, чем длина волны. При расчетах высокоэнергетической составляющей спектра электронов необходимо использовать более последовательный подход, основанный на квантовой электродинамике и учитывающий отдачу электрона в после рассеяния.

9. 5. Излучение гамма-квантов и рождение электрон-позитронных пар

Для выяснения точности используемых приближений при расчете стимулированных электронным ударом ядерных процессов, рассмотрим вначале чисто электродинамические явления образования гамма-квантов и электрон-позитронных пар при столкновении электронов с атомными ядрами. Столкновения электронов с ядрами вещества способны приводить к интенсивному тормозному излучению. В рассматриваемом нами случае релятивистских электронов дифференциальное сечение тормозного излучения без учета экранировки имеет вид [5]

$$d\sigma_\gamma(\omega) = 4Zr_e^2\alpha \frac{d\omega}{\omega} \frac{E'}{E} \left(\frac{E}{E'} + \frac{E'}{E} - \frac{2}{3} \right) \left[\ln \left(\frac{2EE'}{m\omega} \right) - \frac{1}{2} \right], \quad (9.5.1)$$

где Z – зарядовое число ядра, r_e – классический радиус электрона, $\alpha = 1/137$ – постоянная тонкой структуры, E и $E' = E - \omega$ – энергия электрона до и после испускания гамма-кванта соответственно. Из формулы (9.4.9) следует, что спектральное распределение гамма-квантов простирается вплоть до максимума кинетической энергии электрона, и в спектре тормозного излучения может также присутствовать небольшое число гамма-квантов с энергиями достаточными для инициирования различных ядерных реакций.

Излучение гамма-квантов плазмой, образующейся при действии длинного квазимонохроматического лазерного импульса, за счет столкновения электронов с атомными ядрами рассчитано в [13] и согласуется с экспериментом. Рассмотрение основывалось на приближении мгновенного удара, что подтверждает возможности применения этого метода. Спектральное распределение числа фотонов, рожденных в единице объема за время импульса, дается соотношением

$$\frac{dN_\gamma}{d\omega} = n_e n_i \int_0^T V(t) \frac{d\sigma_\gamma(\omega, E(t))}{d\omega} dt. \quad (9.5.2)$$

На рис. 9.10 приведен результат расчета спектрального распределения тормозного излучения по энергиям гамма-квантов для двух случаев: гармонической волны и импульса в форме «мексиканской шляпы» при одной и той же средней интенсивности лазерного излучения 10^{20} Вт/см². Приведенные значения получены умножением формулы (9.4.10) на экспериментальный объем, занимаемый плазмой, пределы интегрирования в первом случае соответствуют периоду колебаний гармонической волны, а во втором – длительности лазерного импульса. Представленные на рис. 9.10 зависимости показывают, что энергия тормозных фотонов излучаемых электроном при одной и той же средней интенсивности лазерного излучения, заметно отличается за счет вариаций в максимально достижимых энергиях электрона при разных формах импульса. Подобный эффект может возникать за счет биений и в поле бигармонических лазерных импульсов.

На рис. 9.11 приведены результаты расчетов, взятые из работы [13], для монохроматического излучения в сравнении с экспериментальными данными, а также результаты расчета для ультракоротких импульсов с учетом поглощения гамма-квантов свинцовым фильтром.

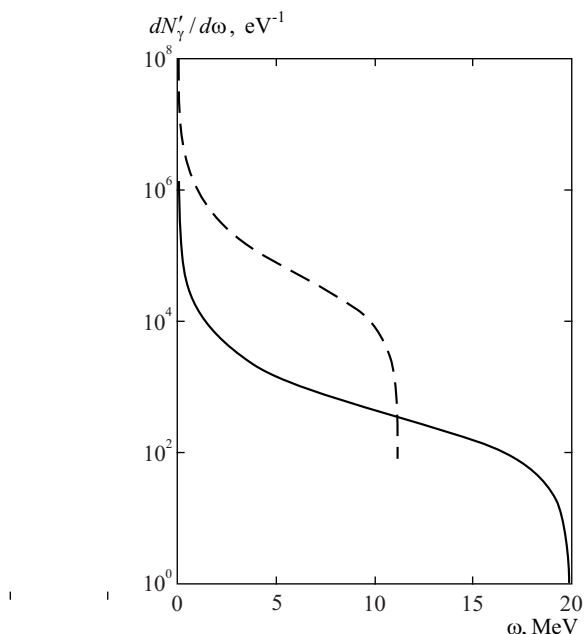


Рис. 9.10. Спектральное распределение тормозного излучения по энергиям гамма-квантов: пунктирная линия соответствует распределению по энергиям гамма-квантов тормозного излучения, инициированного монохроматической лазерной волной ($\lambda = 807 \text{ нм}$); сплошная линия – лазерному импульсу ($\tau = 0.85 \text{ фс}$) в форме «мексиканской шляпы»

В эксперименте мишень из тантала облучалась титан-сапфировым лазером с длительностью импульсов 120 фс и средней интенсивностью излучения – $3 \times 10^{18} \text{ Вт/см}^2$. Период электромагнитной волны в данном случае много меньше полной длительности импульса. Такого рода импульсы можно также составить в виде набора всплесков со сдвигом на период, каждый из которых имеет длительность порядка периода электромагнитной волны, а нормировку выбрать в соответствии со средним значением интенсивности лазерного импульса за рассматриваемый период волны. Соответствующие расчеты дополняют результаты [13] и показывают, что более сложной структуры лазерного импульса может объяснить наличие в спектре тормозного излучения гамма-квантов с энергией выше 1.5 МэВ. Другим важным при-

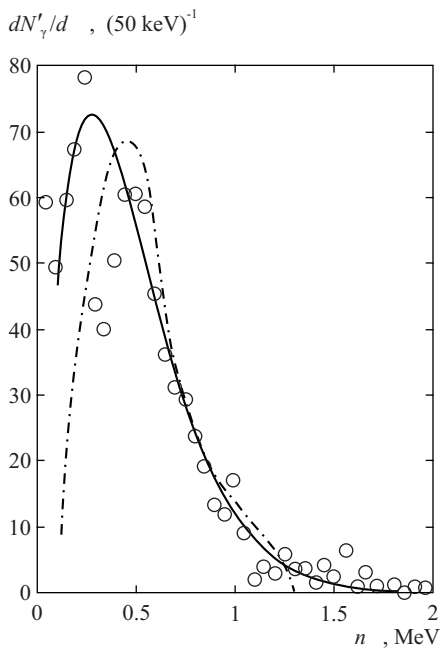
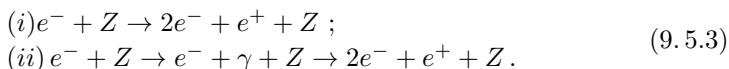


Рис. 9.11. Спектральное распределение тормозного излучения по энергиям гамма-квантов с учетом поглощения свинцовым фильтром: кружками показаны экспериментальные данные, штрих-пунктирная линия соответствует результатам работы [13], сплошная линия получена путем представления импульса в виде набора более коротких импульсов в форме «мексиканской шляпы» с последующим суммированием вкладов отдельных импульсов

мером электродинамического процесса является рождение электрон-позитронных пар при рассеянии электрона на ядре. Взаимодействие релятивистских электронов с веществом может приводить к образованию электрон-позитронных пар в следующих двух процессах:



Полное сечение процесса (i) можно описать аппроксимационными формулами [14]

$$\sigma_{e \rightarrow 2ee^+} = 5.22 \times 10^{-6} \cdot Z^2 \ln^3 \left(\frac{3.6 + E/m}{6.6} \right) \text{ барн},$$

$$\sigma_{e \rightarrow 2ee^+} = 5.22 \times 10^{-6} \cdot Z^2 \ln^3 \left(\frac{3.6 + E/m}{6.6} \right) \text{ барн}. \quad (9.5.4)$$

Количество электрон-позитронных пар, образующихся при столкновении электрона с ядром (процесс (i)) за один лазерный импульс в единице объема вещества считается согласно общей формуле (9.2.10).

Концентрация ионов n_i в области взаимодействия определяется по атомной массе и плотности вещества, концентрация же электронов, движущихся в поле лазерного импульса, зависит от степени ионизации атомов вещества. Для ее оценки учтем механизм ионизации за счет прямого подавления электрическим полем лазерного излучения потенциального барьера, удерживающего электроны в атоме. Будем считать, что k -ый отрываеваемый от атома электрон находится в суммарном кулоновском поле иона и электрическом поле лазерного излучения. В направлении x поляризации лазерного излучения имеет вид

$$U(x) = -\frac{ke^2}{x} - xeF(t), \quad (9.5.5)$$

где F – модуль вектора электрической напряженности лазерного поля. Условием отрыва k -го электрона будем считать превышение энергии основного состояния электрона $\varepsilon = -m e^4 k^2 / 2$ над потенциалом (9.4.12), т. е.

$$\varepsilon \geq U_{\max}, \quad (9.5.6)$$

где $U_{\max} = -2\sqrt{kFe^3}$ – значение потенциала в максимуме. Таким образом, в пренебрежении подбарьерным туннелированием получена оценка, являющаяся нижней границей степени ионизации. Из (9.5.5) следует, что максимальное число оторванных электронов

$$k(\bar{I}) = 4.783 \times 10^{-3} \cdot \left(\frac{\bar{I}}{\text{Вт/см}^2} \right)^{1/6}. \quad (9.5.7)$$

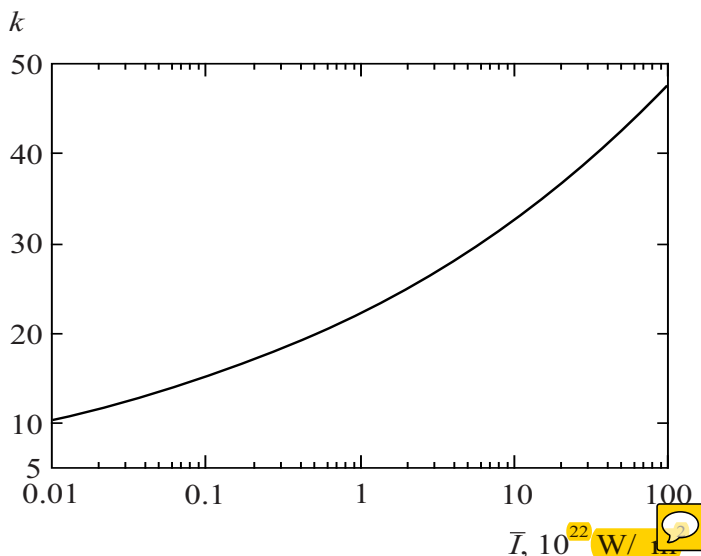




Рис. 9.12. Зависимость степени ионизации атома от средней интенсивности лазерного излучения

На рис. 9.12  график зависимости степени ионизации тяжелых атомов от средней интенсивности лазерного излучения. В соответствии с полученной оценкой для вычисления концентрации электронов n_e следует умножать концентрацию ионов n_i на меньшую из величин Z и k .

Рассмотрим теперь процесс образования электрон-позитронных пар при рассеянии электрона на ядре как двухступенчатый процесс, идущий через рождение тормозных гамма-квантов. Исходный поток электронов при взаимодействии с ядром приводит к образованию гамма-квантов согласно уравнению (9.5.2). Затем образовавшиеся гамма-кванты, разлетаясь, вызывают ядерные реакции в объеме взаимодействия. Мы рассматриваем ядерные реакции внутри фокальной области лазерного излучения, которая для простоты полагается цилиндрической с поперечными размерами $d \sim 10\lambda$, а  продолжные размеры порядка длины продольного переноса электрона l лазерным импульсом. Число реакций, вызванных гамма-квантами, пропорционально средней длине пробега фотона, которая для данной геометрии составляет

$\bar{l} \sim ld/(l+d)$, т. е. определяется наименьшим из размеров области взаимодействия. В результате, выход электрон-позитронных пар за время одного лазерного импульса в единице объема вещества в ступенчатом процессе (ii) составляет

$$N^{(ii)} = n_i \bar{l} \int \frac{dN_\gamma}{d\omega} \sigma_{\gamma \rightarrow ee^+}(\omega) d\omega. \quad (9.5.8)$$

Далее в конкретных расчетах мы полагаем, что параметр \bar{l} имеет величину длины переноса релятивистского электрона лазерным импульсом. Он прямо пропорционален средней интенсивности лазерного излучения, и, например, для титан-сапфирового лазера при $\bar{I} = 10^{19}$ Вт/см² составляет 1.6 мкм.

Для ультрарелятивистского случая полное сечение образования пары гамма-квантом в поле ядра можно записать в виде [5]

$$\sigma_{\gamma \rightarrow ee^+}(\omega) = \frac{28}{9} Z^2 \alpha r_e^2 \left[\ln \frac{2\omega}{m} - \frac{109}{42} - f(\alpha Z) \right], \quad (9.5.9)$$

$$f(x) = x^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n(n^2 + x^2)}.$$

Расчеты выхода электрон-позитронных пар в результате прямого электронного удара по формулам (9.4.10), (9.5.4) и по формуле (9.5.8), учитывающей предварительное испускание гамма-кванта, представлены на рис. 9.13 для тонкой (с толщиной порядка \bar{l}) литиевой мишени ($Z=3$) в виде функции интенсивности лазерного излучения. Для атомов с порядковым номером $Z < 10$ уже при $I = 10^{20}$ Вт/см² происходит полная ионизация, поэтому в проведенном расчете $n_e = Z n_i$. Из рис. 9.13 видно, что процесс (i) доминирует над процессом (ii), однако, при увеличении средней интенсивности \bar{I} , величина выхода продуктов реакции в процессе (ii) растет быстрее величины выхода в прямом процессе (i). Отметим, что зависимость (9.5.8) для процесса (ii) содержит множитель Z^4 , а выход продуктов реакции в процессе (i) пропорционален Z^3 , поэтому, выбирая мишени с более высоким Z относительную эффективность процесса (ii) можно увеличить. Штрих-пунктирная линия на рис. 9.13. соответствует расчету, в котором сечение $\sigma_{e \rightarrow 2ee^+}$ взято в приближении эквивалентных фотонов

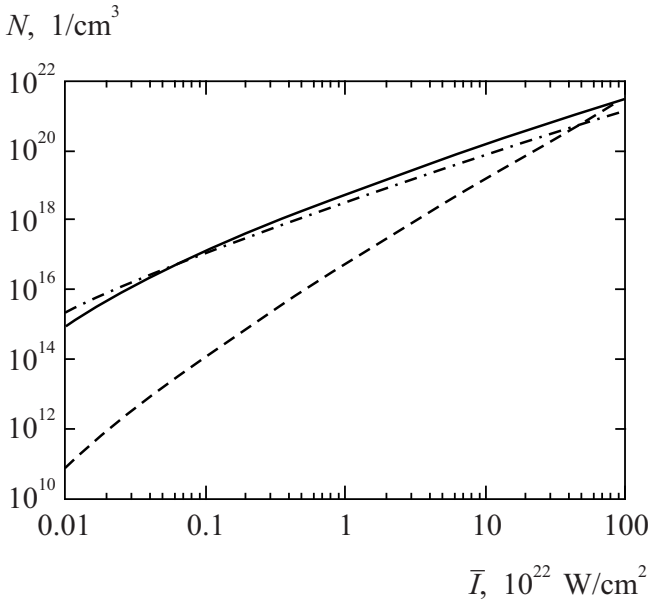


Рис. 9.13. Выход электрон-позитронных пар из единицы объема вещества мишени за один лазерный импульс. Сплошная линия соответствует процессу (i) ; пунктирная – процессу (ii) ; штрих-пунктирная соответствует процессу (i) , рассчитанному с использованием сечения рождения электрон-позитронных пар, полученного в приближении эквивалентных фотонов

[5]:

$$\sigma_{e \rightarrow 2ee^+}^{eph} = \frac{28}{27\pi} r_e^2 (Z\alpha)^2 \ln^3 \left(\frac{E}{m} \right). \quad (9.5.10)$$

Полученные с использованием (9.5.10) результаты выхода электрон-позитронных пар при $\bar{I} \sim 10^{20} \text{ Вт/см}^2$ незначительно отличаются от расчета по формуле (9.5.4). Увеличение средней интенсивности до 10^{24} Вт/см^2 приводит к росту разницы в результатах, полученных при различном выборе сечений, примерно до двух раз. Это показывает приемлемую точность приближения эквивалентных фотонов в рассматриваемых процессах, и дает основания для его использования при расчетах более сложных электростимулированных ядерных реакций.

9. 6. Электростимулированные ядерные реакции

Релятивистские электроны, образуемые в веществе мишени под действием ультракороткого лазерного импульса со средней интенсивностью выше 10^{19} Вт/см², приобретают энергию достаточную для инициирования самых различных ядерных реакций.

Рассмотрим задачу о резонансном тормозном излучении и возбуждении мишени при рассеянии электронов в сверхсильных полях с релятивистской интенсивностью. Мы ограничимся процессами, в которых полная энергия электрона в поле электромагнитной волны меняется на малую величину Δ , так что $\Delta/E \ll 1$. При этом траекторию движения электрона можно считать заданной. Если степень нелинейности процесса $n = \Delta/\omega \gg 1$ (ω – частота внешнего поля), то поле, в котором двигается электрон, можно считать изменяющимся адиабатически медленно. Поэтому при полуклассическом описании можно положить, что в каждый момент времени взаимодействие электрона с мишенью зависит от текущего значения его энергии в поле волны. Кроме того, траектория движения электрона существенно меняется на макроскопических расстояниях порядка длины волны внешнего поля λ . Поскольку $\lambda \gg (1/m\omega)^{1/2} \gg (1/m\Delta E)^{1/2}$, то область взаимодействия, характеризующая рассматриваемые ударные процессы, такова, что на ее протяжении движение электрона может считаться прямолинейным.

Сечения процессов, стимулированных ударом ультрарелятивистского электрона, легко вычисляются с помощью приближения эквивалентных фотонов. Воспользовавшись им, можно получить сечение тормозного эффекта в области частот, соответствующей резонансной поляризации мишени, в виде [15]

$$\frac{\sigma_T}{d\omega} = \frac{2\omega^3\alpha}{\Gamma_n} \sum_{\nu=1,2} \int |(\mathbf{d}_{2n}\mathbf{e}_\mu^*)(\mathbf{d}_{n1}\mathbf{e}_\nu)|^2 d\omega \ln(E(t)/\omega), \quad (9.6.1)$$

где n – резонансный уровень, Γ_n – его ширина, d_{n1} – матричный элемент дипольного перехода из основного состояния $|1\rangle$ в резонансное состояние $|n\rangle$, d_{2n} – матричный элемент перехода из состояния $|n\rangle$ в конечное состояние $|2\rangle$, \mathbf{e}_ν – вектор поляризации эквивалент-

ного фотона, \mathbf{e}'_μ – вектор поляризации тормозного фотона. В формуле (9.6.1) проведено усреднение по направлениям поляризации эквивалентных фотонов и интегрирование по возможным направлениям поляризации тормозного фотона. При ее выводе мы воспользовались известным выражением [5] для сечения резонансного рассеяния фотонов.

Аналогичным образом сечение возбуждения состояния $|2\rangle$ (без учета прямого многофотонного возбуждения) можно найти как сечение поглощения эквивалентных фотонов с частотой, близкой к частоте перехода и

$$\sigma_{21} = \frac{64\pi^2\alpha}{3} |\mathbf{d}_{21}|^2 \cdot \ln(E(t)/\omega_{21}) . \quad (9.6.2)$$

Зависимость энергии электрона от частоты и величины поля плоской электромагнитной волны с произвольной поляризацией для электрона, который в среднем покоится, т. е. энергия которого определяется полностью внешним полем в данный момент времени, имеет вид

$$E = \gamma + \frac{e^2}{2\gamma}(A^2 - \bar{A}^2), \quad \gamma^2 = m^2 + e^2\bar{A}^2, \quad (9.6.3)$$

где A – вектор-потенциал поля волны, зависящий от величины $\xi = t - x$ при распространении волны вдоль оси x , \bar{A}^2 – среднее по периоду колебаний значение квадрата вектор-потенциала. Вероятности процессов зависят от поляризации внешнего поля. На рис. 9.14 показано отношение средней за период вероятности возбуждения иона Са при разной поляризации поля. Видно, что с ростом интенсивности зависимость вероятности возбуждения от поляризации уменьшается.

Далее, аналогично предыдущему разделу рассмотрим два механизма с помощью которых инициируются ядерные реакции в лазерной плазме: прямое столкновение ускоренного полем электрона с ядром (процесс (i)) и взаимодействие ядра с тормозным излучением электрона (процесс (ii)). Отметим, что экспериментально установлено эффективное инициирование ядерных реакций вторичными гамма-квантами в процессе (ii) в поле лазерного излучения релятивистской интенсивности. В отличие от явлений, являющихся предметом изучения квантовой электродинамики, рассматриваемые процессы идут непосредственно с участием ядерных сил и рассчитываются с использованием экспериментально установленных сечений. Количество экс-

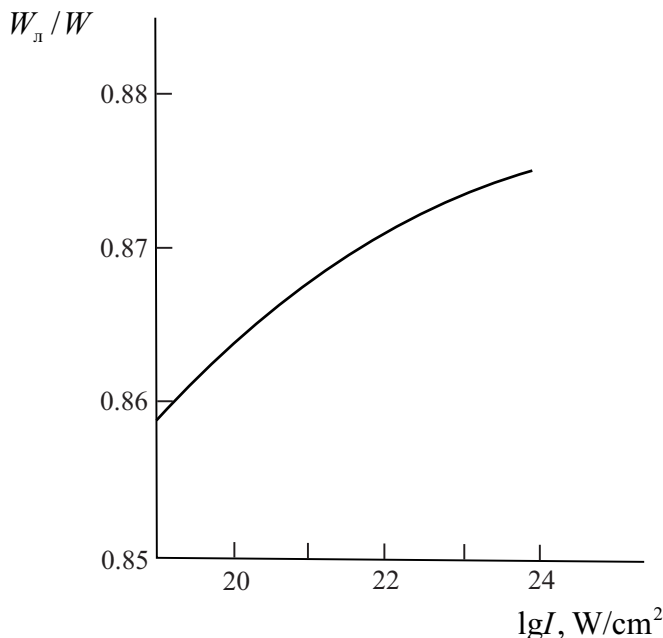


Рис. 9.14. Отношение вероятностей возбуждения водородоподобного иона Са при линейной поляризации (W_L) к соответствующей величине при циркулярной поляризации (W_L) в зависимости от интенсивности внешнего поля неодимового лазера ($\omega = 9440\text{см}^{-1}$)

периментальных данных по фотоядерным реакциям [16] многократно превышает количество данных по электроядерным реакциям. Поэтому мы используем приближение эквивалентных фотонов, позволяющее перейти от известного сечения фотоядерной реакции к сечению электроядерной реакции. В этом случае не учитываются мультипольные переходы, и приходится говорить о заниженных оценках выходов соответствующих процессов, точность которых можно выяснить, произведя сравнительные расчтты с использованием известных полных сечений электроядерных реакций.

Зная экспериментальное сечение фотоядерной реакции $\sigma_{ph}^{\text{exp}}(\omega)$ взаимодействия гамма-квантов с ядром, можно вычислить полное сечение электроядерной реакции $\sigma_e(E)$ взаимодействия электронов с этим же

ядром, вычислив свертку $\sigma_{ph}^{\text{exp}}(\omega)$ со спектром эквивалентных фотонов (9.3.11) от порога фотоядерной реакции E_t до значения кинетической энергии электрона E

$$\sigma_e(E) = \int_{E_t}^E n(\omega) \sigma_{ph}^{\text{exp}}(\omega) d\omega. \quad (9.6.4)$$

Далее выход ядерной реакции рассчитывается по формуле (9.3.10), которая приводит к оценке выхода реакции $N^{(i)} \approx kn_i^2 c \langle \sigma \rangle T$. Величины k и T зависят от интенсивности лазерного излучения, и их приближенные значения легко определить из рис. 9.12 и формулы (9.4.8). Среднее по продолжительности лазерного импульса эффективное значение сечения электроядерной реакции $\langle \sigma \rangle$ можно оценить как

$$\langle \sigma \rangle = n(\omega_{\text{max}}) \sigma_{int}. \quad (9.6.5)$$

где σ_{int} – интегральное сечение фотоядерной реакции, ω_{max} – характерная частота в спектре эквивалентных фотонов, соответствующая положению максимума в сечении фотоядерной реакции $\sim 10\text{--}15$ МэВ. Получаемые таким образом оценки вполне согласуются с точными расчетами. Выход продуктов ядерной реакции в процессе (ii) из единицы объема облучаемого вещества находится по формуле, получающейся из (9.5.8) заменой сечения рождения пары на сечение соответствующей фотоядерной реакции. Прделанные таким образом вычисления позволяют сравнить вклады процесса (i) и процесса (ii) в образование продуктов ядерных реакций.

Современные лазерные системы рассматриваются, в том числе, как возможный инструмент утилизации ядерных отходов. Облучая мощным лазером радиоактивное вещество можно ожидать получения новых изотопов с меньшим периодом полураспада. Поясним сказанное на примере реакции $(e, e'n)$ для изотопов ^{129}I и ^{87}Rb , образующихся при делении ядер урана. Результат расчетов выхода нейтронов за один лазерный импульс для двух конкурирующих процессов взаимодействия ядра с релятивистскими электронами при различных интенсивностях излучения приведен в [14]. Содержащиеся в табл.2. периоды полураспада $T_{1/2}$ для начального и конечного ядер, позволяют оценить скорости распадов ядер до и после облучения. Видно, что для образующихся радиоактивных изотопов скорости распадов существенно

выше, чем у исходных изотопов. Также можно заключить, что процесс (i) более эффективен, чем процесс (ii), однако с ростом средней интенсивности лазерного излучения величина выхода приведенных ядерных реакций в процессе (ii) растет быстрее чем в процессе (i).

Кроме выбивания из ядра отдельных нуклонов рассматриваемый формализм распространяется и на описание стимулированного деления атомных ядер в лазерной плазме. Результаты вычисления числа инициированных делений ядра в единице объема вещества за один лазерный импульс для ряда практически значимых ядер ^{235}U , ^{236}U , ^{238}U и ^{232}Th приведены в табл. 3. Сечения соответствующих фотоядерных реакций взяты из [16], а характерная для тв-лазера плотность атомов составляет величину $\sim 10^{22} \text{ 1/см}^3$. Из данных табл. 3, можно заключить, что при средней интенсивности лазерного излучения 10^{22} Вт/см^2 за один лазерный импульс примерно каждое тысячное ядро в лазерной плазме испытает деление. Процесс (i) является доминирующим, однако рост величины выхода ядерной реакции в этом процессе для ядра ^{238}U уступает росту величины выхода в процессе (ii) при увеличении средней интенсивности лазерного излучения, что иллюстрирует рис. 9.15. При средней интенсивности лазерного излучения $\bar{I} \sim 10^{22} \text{ Вт/см}^2$ оба рассматриваемых процесса имеют почти одинаковую эффективность.

Имеется ряд электроядерных реакций, для которых известны экспериментальные значения полных сечений σ^{exp} . Эти данные можно использовать для оценки точности расчетов процессов инициирования ядерных реакций в лазерной плазме, произведенных на основе сечений фотоядерных реакций. Для вычисления выхода реакции с использованием полного экспериментального сечения, достаточно в (9.3.10) вместо σ подставить σ^{exp} . В табл. 4 приведены результаты, полученные путем расчета сечений фотоядерных реакций в приближении эквивалентных фотонов для процесса (i), и результаты расчетов с использованием полного экспериментального сечения электроядерных реакций.

Согласно табл. 3 величины выходов электроядерных реакций, полученные непосредственно с использованием σ^{exp} , превосходят значения, рассчитанные с использованием сечений σ , определенных на основании данных по фотоядерным реакциям, в 3 – 7 раз. Тем са-

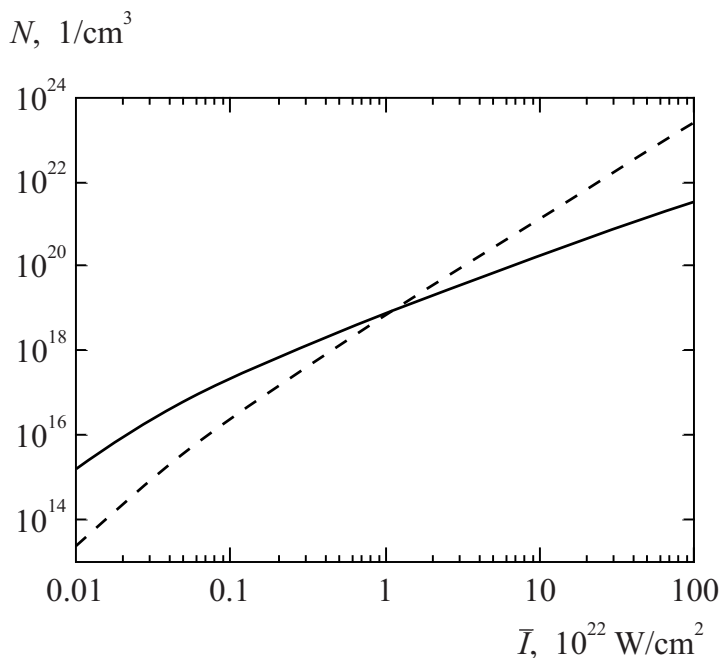





Рис. 9.15. Число инициируемых делений ^{238}U в единице объема вещества мишени за один лазерный импульс в зависимости от средней интенсивности лазерного излучения. Сплошная линия соответствует процессу (i), пунктирная – процессу (ii)

мым расчеты с использованием фотоядерных сечений  так и следовало ожидать, занижают результат, поскольку не учитывают вклад в сечение мультипольных переходов. Несмотря на это, в совокупности подходов предложенный формализм вычисления выходов продуктов ядерных реакций инициируемых в фемтосекундной лазерной плазме дает возможность достаточно уверенно оценить возможность протекания тех или иных ядерных процессов.

Приближение мгновенного удара, приближение эквивалентных фотонов и использование классического описания  движения релятивистского электрона существенно упростили  рас- процессов столкновения электрона с ядром в поле лазерной волны. Результатом такого столкновения является инициирование различных процессов, начиная

от рождения электрон-позитронных пар в поле ядра и заканчивая делением тяжёлых ядер. Сравнение механизмов как прямого взаимодействия электрона с ядром в поле лазерной волны, так и ступенчатого процесса с первоначальным рождением гамма-квантов, показывает доминирование прямого процесса непосредственно в фокусе лазерного импульса. Это утверждение верно для средних интенсивностей лазерного излучения не превосходящих 10^{22} Вт/см². Согласно проведенным расчётам для $\bar{I} = 10^{22}$ Вт/см² и длительности импульса ~ 3.5 фс ($\tau = 0.85$ фс) каждое тысячное ядро ^{238}U в лазерной плазме испытает деление за один импульс, что означает генерацию короткоимпульсных потоков ядерного излучения. При интенсивностях порядка $10^{23} - 10^{24}$ Вт/см² роли рассматриваемых процессов должны поменяться местами, и превалирующим станет ступенчатый процесс. В целом, следует иметь в виду, что гамма-кванты, образуемые в лазерной плазме, имеют возможность проникать далеко в глубь вещества и инициировать там различные реакции. В итоге общий выход продуктов реакций может оказаться существенно больше. Для его вычисления следует учитывать как проникающую способность гамма-квантов, так и толщину облучаемого образца. Приведённые в [14] оценки общего количества делений ^{238}U для $\bar{I} = 10^{21}$ Вт/см², длительности импульса 100 фс и несущей частоты лазерного излучения, соответствующей длине волны 248 нм, стимулированных тормозными гамма-квантами больше, чем делений, инициируемых в лазерной плазме электронным ударом, в 10^6 раз. Иными словами, в мишенях с толщиной много больше величины продольного переноса электрона лазерным импульсом доминирующим является ступенчатый процесс (ii).

Инициирование ядерных реакций в фемтосекундной лазерной плазме открывает возможность создания импульсных источников различных видов ядерного излучения с микронными размерами для технологий синтеза и диагностики наноматериалов и наноустройств, а также для высокоселективной противораковой терапии.

Таблица 2. Выходы нейтронов в реакции $(e, e'n)$ для изотопов ^{129}I и ^{87}Rb

Нач. ядро ($T_{1/2}$)	Кон. ядро ($T_{1/2}$)	$\bar{I}, 10^{20} \text{ Вт/см}^2$					
		1		10		100	
		$N^{(i)}, 1/\text{см}^3$	$N^{(ii)}, 1/\text{см}^3$	$N^{(i)}, 1/\text{см}^3$	$N^{(ii)}, 1/\text{см}^3$	$N^{(i)}, 1/\text{см}^3$	$N^{(ii)}, 1/\text{см}^3$
^{129}I ($1.57 \cdot 10^7 \text{ г}$)	^{128}I (24.99м)	$2.96 \cdot 10^{14}$	$1.31 \cdot 10^{12}$	$5.03 \cdot 10^{16}$	$1.56 \cdot 10^{15}$	$1.80 \cdot 10^{18}$	$4.43 \cdot 10^{17}$
^{87}Rb ($4.75 \cdot 10^{10} \text{ г}$)	^{86}Rb (18.631д)	$1.99 \cdot 10^{12}$	$2.76 \cdot 10^9$	$4.67 \cdot 10^{14}$	$4.82 \cdot 10^{12}$	$1.75 \cdot 10^{16}$	$1.41 \cdot 10^{15}$

Таблица 3. Число инициируемых делений атомных ядер в единице объема вещества за один лазерный импульс

Нач. ядро	$I, \quad 10^{20} \text{ Вт/см}^2$						$\sigma_{int},$ МэВ· барн
	1		10		100		
	$N^{(i)},$ $1/\text{см}^3$	$N^{(ii)},$ $1/\text{см}^3$	$N^{(i)},$ $1/\text{см}^3$	$N^{(ii)},$ $1/\text{см}^3$	$N^{(i)},$ $1/\text{см}^3$	$N^{(ii)},$ $1/\text{см}^3$	
^{235}U	$3.06 \cdot 10^{15}$	$4.67 \cdot 10^{13}$	$4.26 \cdot 10^{17}$	$4.52 \cdot 10^{16}$	$1.47 \cdot 10^{19}$	$1.26 \cdot 10^{19}$	2.16
^{236}U	$2.06 \cdot 10^{15}$	$3.10 \cdot 10^{13}$	$2.84 \cdot 10^{17}$	$3.03 \cdot 10^{16}$	$9.80 \cdot 10^{18}$	$8.45 \cdot 10^{18}$	1.45
^{238}U	$1.54 \cdot 10^{15}$	$2.30 \cdot 10^{13}$	$2.12 \cdot 10^{17}$	$2.26 \cdot 10^{16}$	$7.33 \cdot 10^{18}$	$6.31 \cdot 10^{18}$	1.09
^{232}Th	$2.38 \cdot 10^{14}$	$2.15 \cdot 10^{12}$	$3.07 \cdot 10^{16}$	$3.00 \cdot 10^{15}$	$1.05 \cdot 10^{18}$	$5.58 \cdot 10^{17}$	0.37

9.7. Рождение пар на встречных пучках электронов и фотонов

При взаимодействии лазерного излучения с электронами возможно ударное рождение электрон-позитронных пар на атомных ядрах при интенсивностях поля $10^{20-21} \text{ Вт/см}^2$. В то же время прямого воздействия лазерного излучения на вакуум недостаточно для рождения электрон-позитронных пар. Для осуществления этого процесса необходима, по крайней мере, интенсивность 10^{28} Вт/см^2 , при которой работа поля на комптоновской длине волны соответствует энергии рождения электрон-позитронной пары, что вряд ли достижимо в обозримом будущем. С другой стороны, использование для этой цели электрон-лазерных пучков позволяет уменьшить требования к ин-

Таблица 4. Выход продуктов ядерных реакций за один лазерный импульс

Реакция	$\bar{I},$ 10^{20} Вт/см^2	$N^{(i)}, 1/\text{см}^3$	Выход с учетом $\sigma_e^{exp}, 1/\text{см}^3$
$^{63}\text{Cu}(e, e'n)$	1	$7.93 \cdot 10^{14}$	$3.93 \cdot 10^{15}$
$^{64}\text{Zn}(e, e'n)$	1	$2.87 \cdot 10^{14}$	$1.82 \cdot 10^{15}$
$^{56}\text{Fe}(e, e'p)$	5	$1.19 \cdot 10^{16}$	$7.80 \cdot 10^{16}$
$^{59}\text{Co}(e, e'p)$	5	$2.67 \cdot 10^{16}$	$7.72 \cdot 10^{16}$

тенсивности лазерного излучения. Одна из возможных схем при этом заключается в применении геометрии встречных пучков [16], которая типична для электронных и протонных ускорителей. При этом лазерное излучение в собственной системе частицы станет жестким за счет эффекта Доплера.

Как известно, сечение σ инвариантно относительно преобразований Лоренца. Сечение рождения пар при столкновении фотона с электроном в системе отсчета, где электрон первоначально покоился, есть [5]

$$\sigma = \sigma_0 \left(\ln \frac{\omega}{m} - 3.47 \right), \quad (9.7.1)$$

где $\sigma_0 = 28/9 \alpha r_e^2$, где r_e – классический радиус электрона, ω – частота лазерного фотона в собственной системе отсчета.

Переходя к лабораторной системе отсчета, для ультрарелятивистских электронов с энергией E получим

$$\sigma = \sigma_0 \left(\ln \frac{2\omega_0 E}{m^2} - 3.47 \right), \quad (9.7.2)$$

где ω_0 – частота лазерного излучения в лабораторной системе отсчета. Характерная начальная энергия электрона, требуемая для эффективного осуществления процесса, составляет $E_0 = 20m^2/\omega_0 = 800$ ГэВ при длине волны лазерного излучения $\lambda = 248$ нм. Импульс такого электрона в лабораторной системе отсчета намного больше импульса лазерного фотона. Это означает, что вторичные частицы будут

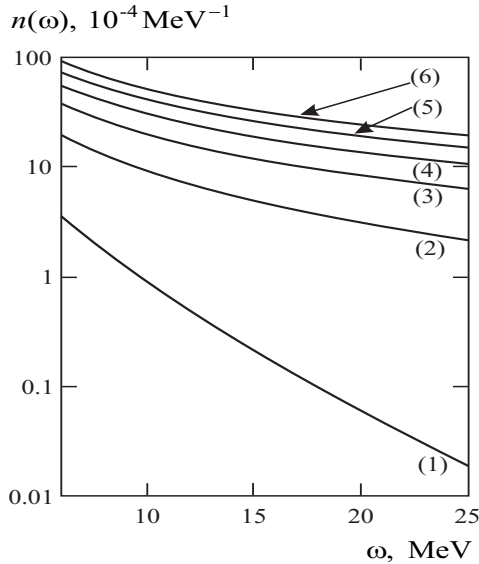


Рис. 9.16. Плотность распределения эквивалентных фотонов по энергии для значений энергиям электрона $E = 0.1 \cdot 10^n$ МэВ (n – номер кривой)

лететь в направлении исходного электрона с понижением энергии после каждого столкновения с фотонами.

Следуя теории ливней, рассмотрим модель, в которой в результате столкновения γ -кванта с электроном рождается электрон-позитронная пара и энергия перераспределяется так, что на каждую частицу приходится по $\beta = 1/3$ энергии исходной частицы. Далее происходит столкновение этих частиц с фотонным потоком лазерного излучения с рождением новых пар и т. д. Занумеруем индексом k поколение частиц в энергетическом слое с энергией $E_k = \beta^k E$. Тогда для $k + 1$ слоя можно записать кинетическое уравнение

$$\frac{dN_{k+1}}{dt} = -W_{k+1}N_{k+1} + W_k N_k / \beta, \quad (9.7.3)$$

где N_k – полное число частиц в k -м энергетическом слое, W_k – вероятность процесса рождения электрон-позитронной пары в единицу времени. Воспользуемся явным видом для $W_k = \rho_{ph}\sigma = a - bk$, где

$a = \sigma_0 \rho_{ph} (\ln(2\omega_0 E/m^2) - 3.47)$, $b = \sigma_0 \rho_{ph} \ln(\beta - 1)$, ρ_{ph} – плотность потока лазерных фотонов.

Выразив в уравнении (9.7.3) разность через производную, перейдем к дифференциальному уравнению в частных производных, заменив дискретный индекс k на непрерывный параметр x :

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [W(x)N] + W(x)N. \quad (9.7.4)$$

Произведем замену переменных $n(x, t) = W(x)N(x, t)$. Тогда

$$\frac{1}{W(x)} \frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial n}{\partial x} + 2n. \quad (9.7.5)$$

Для решения уравнения (9.7.5) необходимо задать начальное распределение, которое мы выберем моноэнергетическим и опишем при помощи δ -функции в виде

$$N(x, 0) = \delta(x) = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} g(x, \gamma), \quad (9.7.6)$$

где $g(x) = 1/(\gamma\sqrt{\pi}) \exp(-x^2/\gamma^2)$ – начальное распределение, нормированное на один электрон.

Решение квазилинейного уравнения (9.7.5) с начальным условием $n(x, 0) = g(x, \gamma)W(x)$ можно найти методом характеристик, и оно имеет вид

$$N_\gamma(x, t) = \frac{1}{\gamma\pi} e^{2x+bt} \exp \left[-f(x, t) \left(2 + \frac{f(x, t)}{\gamma^2} \right) \right], \quad (9.7.7)$$

где $f(x, t) = [a - (a - bx)e^{bt}] / b$.

Полное количество образовавшихся к моменту времени t частиц, соответствующих одному затравочному электрону, есть

$$\tilde{N}(t) = \lim_{\gamma \leftarrow \infty} \int_0^\infty N_\gamma(x, t) dx. \quad (9.7.8)$$

Определенный интеграл в формуле (9.7.8) вычисляется аналитически, и после перехода к пределу получим

$$\tilde{N}(t) = \exp \left[\frac{2a}{b} (1 - e^{-bt}) \right]. \quad (9.7.9)$$

Оценим число частиц, образующихся при начальной энергии E_0 в расчете на один электрон. Параметры сфокусированного лазерного излучения возьмем в соответствии с данными для мощного эксимерного лазера [17]: интенсивность в фокусном пятне $I = 10^{20}$ Вт/см², длительности лазерного импульса $\tau = 300$ фс. При этом полная плотность потока фотонов за время импульса τ составит $\rho_{ph}\tau = I\tau/\omega_0 = 3 \cdot 10^{27}$ см⁻². В этих условиях $b\tau \gg 1$ и рождается $\tilde{N} \approx 60$ частиц на один затравочный электрон. Таким образом, рассмотренное явление имеет все характерные черты нового физического явления – пробоя вакуума.

На базе линейного ускорителя Станфордского центра (SLAC) проводятся исследования взаимодействия пучков электронов высокой энергии и сфокусированного лазерного излучения. Уже зарегистрировано нелинейное комптоновское рассеяние при энергии электронов в пучке 46.6 эВ и интенсивности сфокусированного лазерного излучения 10^{18} Вт/см² с длинами волн 1054 нм и 527 нм. Дальнейшее совершенствование системы предполагает также эксперименты по наблюдению рождения электрон-позитронных пар. Это позволяет надеяться на постановку эксперимента с конфигурацией встречных пучков, рассмотренной в данной работе, с целью изучения явления пробоя вакуума.

Среди столкновительных процессов рождения электрон-позитронных пар, носящих характер каскадного размножения частиц, интересным и перспективным является размножение пар в электрон-позитронной плазме [18]. Соответствующие процессы возможно будет наблюдать уже в относительно близком будущем, поскольку требуемые для этого интенсивности составляют около 10^{24} Вт/см².

Литература

1. Головинский П.А., Долгополов М.А. Рассеяние релятивистских электронов в сильном электромагнитном поле с учетом внутренней динамики мишени // Теор. мат. физ. 1993. Т. 95. С. 418–425.
2. Амусья М.Я., Кучиев Ю.М., Король А.В., Соловьев А.В. Тормозное излучение релятивистских частиц с учетом поляризуемости атом-мишени // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. С. 383–389.

3. Астапенко В.А., Комаров Л.И., Кротов Ю.М. и др. Динамическое тормозное излучение релятивистской заряженной частицы на атоме // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. С. 1560–1569.
4. Попов В.Н. Континуальный интеграл в квантовой теории поля и статистической физике. – М.: Атомиздат, 1976.
5. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика. – М.: Физматлит, 2006.
6. Дыхне А.М., Юдин Г.Л. Внезапные возмущения. – М.: УФН, 1996.
7. Павленко Ю.Г. Лекции по теоретической механике. – М.: Физматлит, 2002.
8. Головинский П.А., Михин Е.А. Инициирование ядерных реакций в фемтосекундной лазерной плазме // ЯФ. 2012. Т. 75. С. 1–12.
9. Головинский П.А., Михин Е.А. Нелинейное томсоновское рассеяние ультракороткого лазерного импульса // ЖЭТФ. 2011. Т. 140. С. 627–636.
10. Абрамовиц М., Стиган И.А. Справочник по специальным функциям. – М.: Наука, 1979.
11. Байер В.Н., Катков В.М., Фадин В.С. Излучение релятивистских электронов. – М.: Атомиздат, 1973.
12. Батыгин В.В., Топтыгин И.Н. Современная электродинамика. – М.: НИИ РХД, 2005.
13. Golovinski P. A., Dolgoplov M. A., Khlebostrov V. G. Hard X-ray generation in laser field of relativistic intensity // Physica Scripta. 1995. V. 51. P. 759–761.
14. Грязных Д.А. Расчет сечений образования электрон-позитронных пар электронами в поле ядра // ЯФ. 1998. Т. 61. С. 454–460.
15. Головинский П.А. Столкновение электронов с ионами в лазерных полях с релятивистской интенсивностью // Письма ЖЭТФ. 1992. Т. 12. С. 82–85.

16. *Caldwell J. T., Dowdy E. J., Berman B. L., Alvarez R. A., Meyer P.* Giant resonance for the actinide nuclei: Photoneutron and photofission cross sections for ^{235}U , ^{236}U , ^{238}U , and ^{232}Th // *Phys. Rev. C*. V. 21. P. 1215–1231.
17. *Головинский П.А.* Рождение пар на встречных электрон-лазерных пучках // *Письма в ЖТФ*. 1997. Т. 23. С. 72–75.
18. *Nerush E. N., Kostyukov I. Yu., Fedotov A. M., Narozhny N. B., Elkina N. V., Ruhl H.* Laser field absorption in self-generated electron-positron pair plasma // *Phys. Rev. Lett.* 2011. V. 106. P. 035001(4).

Заключение

Несмотря на уже достаточно длинную историю развития лазеров и их применений, число фундаментальных лазерных явлений и их приложений неуклонно и стремительно растет. Это связано в первую очередь с тем, что экспериментально удастся изменять параметры лазерного излучения в широчайшем диапазоне, варьируя частоты, длительности импульсов и их интенсивность, а также управляя поляризацией излучения. Еще одна принципиальная особенность лазерного воздействия на вещество – это его когерентность, позволяющая согласованно управлять волновой динамикой квантовых систем. Все это в совокупности делает лазерное излучение незаменимым, как при тонком манипулировании отдельными атомами, молекулами и квантовыми размерными структурами, так и для высокоэнергетического воздействия на электронные пучки и плазму.

Рассмотренные в книге теоретические модели в совокупности составляют набор инструментов, позволяющих решать самые разнообразные классические и современные задачи, связанные со взаимодействием света с веществом. Суть всех этих моделей заключается в том, чтобы существенно упростить известные точные уравнения квантовой электродинамики, описывающие взаимодействие фотонов с веществом, используя физические особенности того или иного класса решаемых задач. Основой такого упрощения всегда служит поиск разделения степеней свободы рассматриваемой системы на основные переменные и дополнительные. При этом основные степени свободы описываются максимально точно, а учет дополнительных степеней свободы и связанных с ними движений производится в рамках того или иного варианта теории возмущений.

В самом первом приближении квантовая система рассматривается как электрон, помещенный в постоянное внешнее поле, на который воздействует локально однородное переменное электрическое поле лазерной волны. Даже в этой простейшей постановке могут быть получены многие важные результаты, в том числе путем классического или полуклассического описания движения электрона. Дальнейшее совершенствование моделей осуществляется путем размораживания внутренних степеней свободы мишени. В случае атомов это означает, включение в рассмотрение динамики внутренних электронов атома и обмена энергии между ними, например, в форме различных поляризационных потенциалов. Для взаимодействия света с плазмой такой поляризационный потенциал описывает влияние электронов дебаевской кшубынь, окружающей ионы. Плазмоподобные модели удобны и для приближенного описания других многоэлектронных систем, включая тяжелые атомы, а также металлические наночастицы. Наконец, при рассмотрении взаимодействия с веществом лазерного излучения сверхвысокой интенсивности удастся разделить систему на две подсистемы, одна из которых включает сильно связанные между собой электроны и лазерное излучение, а вторая представлена атомными ядрами, на которых происходит рассеяние электронов с релятивистскими энергиями.

Особого внимания требует учет временной зависимости лазерных импульсов, поскольку ультракороткие импульсы позволяют решать целый ряд ранее недоступных задач. К их числу относится исследование динамики квантовых систем на атомных временах, что позволяет судить о тонких внутриатомных и внутримолекулярных механизмах реакций и передаче энергии. Другим важнейшим направлением исследований, в котором пространственно-временная компрессия импульсов открыла новые горизонты, является создание лазерных полей релятивистской интенсивности, т. е. с интенсивностью больше 10^{19} Вт/см², и изучение их взаимодействия как с электронными пучками, так и в целом с веществом. Здесь потребовалось ввести новый инструмент для описания таких импульсов - вейвлеты. Использование вейвлетов позволяет представить импульсы произвольной формы в компактной аналитической форме. Этот новый подход обладает значительным потенциалом развития, особенно в применении к задачам распространения и рассеяния ультракоротких импульсов. Дальнейшее совершенствование

экспериментальной техники сверхмощных лазеров сулит возможность получения еще более экстремальных состояний вещества и наблюдения таких новых фундаментальных явлений, как каскадное рождение электрон-позитронных пар при взаимодействии мощных лазерных импульсов со встречными потоками электронов высокой энергии (пробой вакуума) и с электрон-позитронной плазмой.

Предметный указатель

Автокоррелятор 285

амплитуда

двухфотонного поглощения
239

перехода 224, 347
процесса 286

атомная антенна 327

Вейвлеты 260, 354

вектор

Блоха 295

вероятность

радиационного процесса 24
рассеяния 311, 322
фотовозбуждения 286
фотопроцесса 284

вершина 106

взаимодействие

корреляционное 109
межэлектронное 118

возбуждение

атомов 235
ядер 378

волна

монохроматическая 70

время

релаксации 16

всплеск-преобразование 261

всплески 260

нормированные 261

встречные пучки 384

Гамильтониан 22, 169

Действие 352

деление ядер 380

динамическая

поляризуемость атома 28

диэлектрическая

проницаемость среды 28

Излучение

гамма-квантов 369, 370

электрона 337

интерференция 135

ионизация

двухэлектронная 231

надбарьерная 330

прямая двухэлектронная 230

рентгеновским излучением
224

электронным ударом 233

Картина Фарри 346

квазиэнергия 66, 96
квантовая яма 252
классическое движение 354
коллапс
 волновых функций 203
 управляемый 207
константа Штарка 33
корональное равновесие 37
коэффициент
 поглощения 38
 фазовой модуляции 244, 247,
 307
 Эйнштейна 18

Лагранжиан 345

Матричный элемент 130, 231
 многофотонный 116
 приведенный 216
металлический кластер 191
метод
 Кирхгофа–Зоммерфельда 268
 Ритца 44
 Роста 90
 эквивалентных фотонов 56,
 58
механизм ионизации 373
модель
 атома статистическая 42
 двухуровневой системы 72
 локальной плазменной
 частоты 82
 плазменная 146
 Томаса–Ферми 165
 Хольцмарка 31

Образование

 электрон-позитронных пар
 372
оператор

 массовый 102
 рассеяния 197
 рождения фотона 197
 статистический 169
 уничтожения фотона 197, 224
осцилляции Раби 294
отрыв электрона
 многофотонный 115

Перенормировка 106

плазма 321
плотность энергии 15
поле
 резонансное усиление 200
 электрическое 17
 эффективное усиление 200
поляризационная рекомбинация
 180
поляризационный заряд 148
потенциал
 векторный 361
 поляризационный 102, 106,
 110, 114, 173
 самосогласованный 172
 эффективный 203
правила
 сумм 294
 Фейнмана 103
представление
 вторичного квантования 98
 спектральное 101
преобразование Фурье
 оконное 264
приближение
 Бете 140
 Борна 129, 160, 236
 Брандта–Лундквиста 82
 вращательное 75, 77, 80, 146
 квазиэнергетическое 64
 Ленца–Иенсена 143

мгновенного спектра 362
 мгновенного удара 236, 350,
 351
 Очкара 166
 случайных фаз с обменом 119
 Слэтера 47
 Титца 52
 Хартри—Фока 103
 эквивалентных фотонов 376
 принцип
 Гюйгенса—Френеля 277
 детального равновесия 36, 39
 процесс
 в бихроматическом поле 237
 двухфотонный 109
 сечение 25

Радиационный процесс

вынужденный 15
 спонтанный 14
 распределение
 Больцмана 35
 Ленца—Иенсена 85
 Максвелла 35
 Саха 36
 спектральное 363
 Томаса—Ферми 43, 85
 угловое 321
 рассеяние
 комптоновское 321
 нелинейное томсоновское 361
 ультракороткого импульса
 310, 317, 321
 электронов 233
 рождение
 электрон-
 позитронных пар 369
 ряд Фурье 260

Сечение

образования пары 375
 рождения пар 385
 фотоионизации 82
 фотопоглощения 29
 сила осциллятора 26
 система
 двухуровневая 295
 состояние
 автоионизационное 21
 квазиэнергетическое 72
 спектр
 мгновенный 361
 статистика
 Бозе-Эйнштейна 97
 Ферми—Дирака 97
 сфера Блоха 299

Тензор рассеяния 312

теорема
 Парсиваля 260
 Флоке 65
 теория
 многих частиц 95
 ток перехода 351
 тормозное излучение 20, 134
 в плазме 168
 интерференционные эффекты
 209
 поляризационное 129, 136, 138
 сечение 135, 369
 спонтанное 128
 статическое 77, 133
 тормозной эффект
 в сильном поле 156
 вынужденный 161, 173, 344,
 348
 сечение 377

Ультракороткий импульс 257, 284
 дифракция 268

уравнение

Дайсона 111

движения 355, 356

кинетическое 386

Шрёдингера 69, 334

Фазовый контроль 251

фактор Гаунта 60

фокусировка

импульса 278

форм-фактор 167

форма линии 16

формула

Крамерса 62

Крамерса-Кронига 29

Крола-Ватсона 235

Лармора 365

Лотца 233

— АДК 332

фотовозбуждение 284

фотоотрыв электронов 107

фотоядерная реакция 379

функционал

плотности 103

производящий 345

функция

Волкова 72

Гамильтона 69

Грина 101, 122, 274

корреляционная 16

Ленца—Иенсена 45

Томаса—Ферми 45

Хольцмарка 32

— Грина 165

кулоновская 242

оптического электрона 116

свободного

электромагнитного поля

345

фермионов 346

электрона 346

Частота Раби 74, 204, 301

Энергия

электрона 358

эффект

многоэлектронный 118

Оже 222

фазовый 294

Ядерная реакция 377, 378