ТОМ 44, ВЫП. 5 • ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ • 1978 год

УДК 535.33/.34+539.186.22

РЕЗОНАНСНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ И ПОГЛОЩЕНИЕ ФОТОНОВ ПРИ ТРОЙНОМ СТОЛКНОВЕНИИ ЭЛЕКТРОНА, ФОТОНА И АТОМА

Л. И. Трахтенберг

Рассматриваются процессы излучения и поглощения фотонов при рассеянии электрона на атоме в присутствии электромагнитного поля. Вычислено дифференциальное сечение обратного тормозного эффекта при рассеянии электрона на атоме водорода. Атом-мишень при этом рассматривается как самостоятельная динамическая система. Показано, что имеется существенное отличие от сечения, вычисленного в приближении, когда атом-мишень рассматривается только как источник внешнего поля. Рассмотрено тормозное рассеяние электронов в сильном поле резонансной частоты.

В последнее время появилось значительное число работ, посвященных изучению взаимодействия электронов с атомами в присутствии электромагнитного поля. К этому кругу вопросов относятся следующие: лазерный пробой газов [1], возбуждение атомов при одновременном столкновении с электроном и фотоном [2], усиление света при свободно-свободных переходах электрона [3] и т. д. Как известно, в этих процессах тормозное излучение и поглощение играют существенную роль.

Обычно термин «тормозное излучение» применяют к излучению, которое возникает при рассеянии электрона в заданном внешнем поле силового центра [4, 5], т. е. атом-мишень рассматривается только как источник внешнего поля. Впервые на возможность более точной постановки задачи указывалось в работе [6]; предлагалось обобщить обычную формулу для тормозного излучения и ввести в гамильтониан системы гамильтониан атома H_a и оператор энергии взаимодействия атомных электронов с электромагнитным полем. Общее выражение и интерпретация полной амплитуды перехода как амплитуды тормозного излучения даны в работе [7]. Сечение вынужденного тормозного излучения (поглощения) имеет следующий вид [8, 9]:

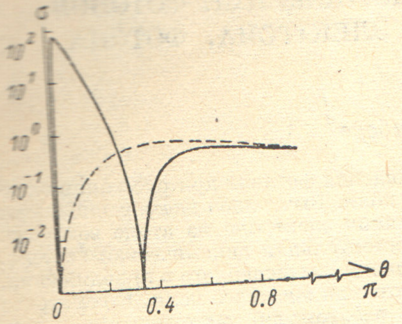
$$\left.\begin{aligned} &d\sigma^{\omega}_{n_i n_i} = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{p_f}{p_i}\,|A^{\pm}_{fi}|^2\,d\Omega, \\ &A^{\pm}_{fi} = \frac{4\pi\boldsymbol{\alpha}\mathbf{q}}{q^2}\left\{\pm\frac{i}{\omega}\left[Z-\left(\sum_{j=1}^{Z} e^{iqz_j}\right)_{n_i n_i}\right] + \frac{1}{q}\sum_{n,\,j,\,j'}\frac{(e^{iqz_j})_{n_i n}\left(\frac{\partial}{\partial z_{j'}}\right)_{n n_i}}{E_{n_i}\mp\omega-E_n} + \right. \\ &\qquad\left. + \frac{1}{q}\sum_{n,\,j,\,j'}\frac{\left(\frac{\partial}{\partial z_{j'}}\right)_{n_i n}(e^{iqz_j})_{n n_i}}{E_{n_i}\pm\omega-E_n}\right\}, \\ &H_a\varphi_n(\mathbf{r}_j) = E_n\varphi_n(\mathbf{r}_j),\ \ \boldsymbol{\alpha} = \frac{i}{2\omega}\mathbf{E}_0,\ \ \mathbf{q} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f,\ \ n_f = n_i. \end{aligned}\right\} \quad (1)$$

Знак «+» относится к излучению, а «—» к поглощению фотона; $\mathbf{p}$ — импульс налетающего электрона; $d\Omega$ — элемент телесного угла в $\mathbf{p}$-пространстве; n — совокупность квантовых чисел, характеризующих состояние атома; i, f — отмечают начальное и конечное состояния системы;

$\mathbf{r}_j$ — радиус-вектор атомного электрона; φ_n и E_n — волновая функция и энергия стационарного состояния атома; ω — частота; $\mathbf{E}_0$ — амплитуда электрического вектора электромагнитной волны; Z — заряд ядра. Все величины даны в атомных единицах. Амплитуда рассеяния A_{fi} состоит из амплитуды, вычисленной в приближении заданного поля (первый член в выражении для A_{fi}), и суммы по всем промежуточным состояниям атома. Легко видеть, что при определенных значениях частоты в амплитуде рассеяния возникают резонансы.

В работе [9] определены пределы применимости приближения заданного поля и показано, что имеется широкая область частот излученного фотона (в том числе далеких от резонанса), где такое приближение не применимо. Учет всех членов амплитуды рассеяния приводит также к их интерференции.

По-видимому, нет никакой возможности (даже принципиальной) выяснить, за счет какого из членов амплитуды происходит рассеяние. Если электрон рассеивается на атоме в присутствии электромагнитного поля и при этом излучается (поглощается) фотон частоты ω, а энергия электрона уменьшается (увеличивается) на величину $\hbar\omega$, то сечение процесса определяется формулой (1) и этот процесс следует рассматривать как тормозное излучение (поглощение).



Дифференциальное сечение обратного тормозного эффекта при рассеянии электрона на атоме водорода.

$\sigma = 10^{-2}\sigma^{\omega}_{1s,\,1s}(\theta)/E_0^2$, $\omega = 0.3$ а. е., $|\mathbf{p}_i| = 3$ а. е.

Расчеты показали [8, 9], что сечение тормозного излучения является резонансной функцией частоты. Однако методы теории возмущений не позволяют вычислить сечение в области резонанса. Вместе с тем именно эта область частот представляет интерес с точки зрения различных приложений.

Следовательно, актуальными задачами развития теории, которая последовательно учитывает роль атомных электронов, являются, во-первых, выяснение влияния интерференции различных членов амплитуды рассеяния (п. 1), во-вторых, вычисление сечения тормозного излучения в области резонанса (п. 2).

1. В работе [9] развит метод вычисления сумм по промежуточным состояниям; используя этот метод, можно вычислить дифференциальное сечение (1). На рисунке представлены результаты расчета (сплошная линия) дифференциального сечения обратного тормозного эффекта в зависимости от угла рассеяния $\left[\sigma^{\omega}_{1s,\,1s}(\theta) = \int\limits_0^{2\pi} d\varphi\, d\sigma^{\omega}_{1s,\,1s}(\theta,\,\varphi)/d\Omega,\ \mathbf{p}_i \perp \mathbf{E}_0\right]$.

Имеется существенное отличие от сечения, вычисленного в приближении заданного поля (штриховая линия). Функция $\sigma^{\omega}_{1s,\,1s}(\theta)$ обращается в нуль в трех точках. При $\theta = 0,\ \pi$ это связано с наличием множителя $\mathbf{E}_0\mathbf{q}$ в амплитуде рассеяния (в этих же точках обращается в нуль сечение, вычисленное в приближении заданного поля), а при $\theta = 0.33$ $\sigma^{\omega}_{1s,\,1s}(\theta) = 0$ вследствие интерференции различных членов амплитуды рассеяния. Действительно, при малых углах вклад первого члена из (1) мал и сечение определяется матричными элементами виртуальных переходов. При увеличении угла рассеяния возрастает роль амплитуды, вычисленной в приближении заданного поля. Эта амплитуда и суммы по промежуточным состояниям входят в полную амплитуду с противоположными знаками. Вследствие этого в точке $\theta=0.33$ $\sigma^{\omega}_{1s,1s}(\theta)=0$. При дальнейшем увеличении угла рассеяния основной вклад в сечение вносит первый член из A_{fi} и кривые совпадают.

Отметим, что при $\omega \to E_n - E_{1s}$ угол, при котором $\sigma^{\omega}_{1s,\,1s}(\theta)=0$, возрастает, так как в случае резонанса увеличивается вклад сумм по промежуточным состояниям.

2. Рассмотрим тормозное излучение (поглощение) в электромагнитном поле резонансной частоты с учетом движения атомов. Гамильтониан задачи

$$\left.\begin{aligned} &H = H_0 + F + U, \quad H_0 = -\frac{\Delta_{\mathbf{R}_a}}{2M} + H_a + H_e, \quad F = F_{a\Phi} + F_{e\Phi}, \\ &F_{a\Phi} = 2\alpha\cos(\omega t - \varkappa \mathbf{R}_a)\sum_{j=1}^{Z}\nabla_{\mathbf{r}_j}, \quad U = -\frac{Z}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}_a|} + \sum_{j=1}^{Z}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j-\mathbf{R}_a|}, \\ &\left(-\frac{\Delta_{\mathbf{R}_a}}{2M} + H_a\right)\varphi_{n\varphi\mathbf{k}} = \varepsilon_{n,\,k}\varphi_n\psi_{\mathbf{k}}, \quad H_e\psi_{\mathbf{p}} = \varepsilon_p\psi_{\mathbf{p}}, \\ &\psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_a}, \quad \psi_{\mathbf{p}} = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}, \quad \varepsilon_{n,\,k} = E_n + \frac{k^2}{2M}, \quad \varepsilon_p = \frac{p^2}{2}. \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

Здесь H_e и $\mathbf{r}$ — гамильтониан и радиус-вектор налетающего электрона; $F_{a\Phi}$ и $F_{e\Phi}$ — операторы взаимодействия электромагнитного поля с атомом и свободным электроном; $U(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}, \mathbf{R}_a)$ — энергия взаимодействия налетающего электрона с атомом; $\varkappa$ — волновой вектор фотона; M, $\mathbf{R}_a$ и $\mathbf{k}$ — масса, координата и волновой вектор атома. Функции $\psi_{\mathbf{k}}$, $\psi_{\mathbf{p}}$ нормированны на основную область, объем которой равен единице. В гамильтониане (2) опущены члены $\simeq 1/M$ и учтено, что длина волны электромагнитного поля велика по сравнению с размерами атома.

Рассмотрим переходы под действием возмущения U между нестационарными состояниями системы, которая описывается гамильтонианом $H_0 + F$. Волновую функцию атома в электромагнитном поле ищем в виде

$$\Phi(\mathbf{r}_j, \mathbf{R}_a, t) = \sum_{n,\,\mathbf{k}} c_{n,\,\mathbf{k}}(t)\,\varphi_n(\mathbf{r}_j)\,e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_a}e^{-i\varepsilon_{n,\,k}t}. \tag{3}$$

В работах [6, 7] показано, что в резонансном случае можно пренебречь влиянием электромагнитного поля на свободный электрон; атом при этом рассматривается как двухуровневая система [10]. Таким образом, для амплитуд $c_{n;\,\mathbf{k}}(t)$ $(n=1,\,2)$ получаем уравнения

$$\begin{gathered} i\dot{c}_{1,\,2;\,\mathbf{k}} = \sum_{n=1,\,2} l_{1,\,2;\,n}\,c_{n;\,\mathbf{k}\pm\varkappa}\,e^{\mp i\left(\Delta + \frac{\mathbf{k}\varkappa}{M}\right)t}, \quad c_{n;\,\mathbf{k}}(0) = \delta_{n,\,1}\delta_{\mathbf{k},\,\mathbf{k}_{i,\,f}}, \\ l_{ss'} = \left(\sum_{j=1}^{Z}\alpha\nabla_{\mathbf{r}_j}\right)_{ss'}, \quad \Delta = E_2 - E_1 - \omega. \end{gathered} \tag{4}$$

Уравнения (4) могут быть решены с помощью преобразований Лапласа. Решения уравнений (4)

$$\begin{gathered} c_{1,\,\mathbf{k}} = \left(\cos\Omega t + \frac{i\Delta'}{2\Omega}\sin\Omega t\right)\delta_{\mathbf{k},\,\mathbf{k}_{i,\,f}}\,e^{-i\frac{\Delta'}{2}t}, \quad c_{2,\,\mathbf{k}} = -\frac{il_{21}}{\Omega}\sin\Omega t\,\delta_{\mathbf{k},\,\mathbf{k}_{if}+\varkappa}\,e^{i\frac{\Delta'}{2}t}, \\ \Delta' = \Delta + \frac{\mathbf{k}\varkappa}{M}, \quad \Omega = \sqrt{\frac{\Delta'^2}{4} + |l_{12}|^2}. \end{gathered} \tag{5}$$

Подставляя решения (5) в выражение (3), получаем волновую функцию $\Phi_{i,\,f}$. Следует также учесть, что возможно еще одно конечное состояние системы с начальным условием — $c_{n,\,\mathbf{k}}(0) = \delta_{n,\,2}\delta_{\mathbf{k},\,\mathbf{k}_{i,\,f}+\varkappa}$. Коэффициенты разложения для соответствующей волновой функции Φ'_f получаются из выражения (5) заменой $\mathbf{k}_f \leftrightarrow \mathbf{k}_f + \varkappa$, $1 \leftrightarrow 2$, $\Delta' \to -\Delta'$.

В первом порядке по возмущению U амплитуды перехода $\mathbf{p}_i \to \mathbf{p}_f$ ($|\varepsilon_{p_i} - \varepsilon_{p_f}| \simeq \omega$; кроме того, в системе могут происходить упругие столкновения и столкновения, сопровождающиеся изменением энергии налетающего электрона на величину 2Ω [11]), вычисленные на функциях $\Phi_i \psi_{\mathbf{p}_i}$, $\Phi_f \psi_{\mathbf{p}_f}$ и $\Phi_i \psi_{\mathbf{p}_i}$, $\Phi'_f \psi_{\mathbf{p}_f}$, имеют вид

$$\left.\begin{aligned}
a_{fi} = {} & \frac{U_{12} l_{21}}{4\Omega^2} \delta_{\mathbf{k}_f,\, \mathbf{k}_i+\mathbf{q}+\varkappa} \left[\left(\Omega + \frac{\Delta'}{2}\right) \delta\left(\varepsilon_{p_f} + \varepsilon_{k_f} - 2\Omega - \omega - \varepsilon_{k_i} - \varepsilon_{p_i}\right) - \right. \\
& - \Delta' \delta\left(\varepsilon_{p_f} + \varepsilon_{k_f} - \omega - \varepsilon_{k_i} - \varepsilon_{p_i}\right) - \left.\left(\Omega - \frac{\Delta'}{2}\right) \delta\left(\varepsilon_{p_f} + \varepsilon_{k_f} + 2\Omega - \omega - \varepsilon_{k_i} - \varepsilon_{p_i}\right)\right] + \\
& + \frac{l_{12} U_{21}}{4\Omega^2} \delta_{\mathbf{k}_f,\, \mathbf{k}_i+\mathbf{q}-\varkappa} \left[\left(\Omega + \frac{\Delta'}{2}\right) \delta\left(\varepsilon_{p_f} + \varepsilon_{k_f} + 2\Omega + \omega - \varepsilon_{k_i} - \varepsilon_{p_i}\right) - \Delta' \delta\left(\varepsilon_{p_f} + \right.\right. \\
& \left. + \varepsilon_{k_f} + \omega - \varepsilon_{k_i} - \varepsilon_{p_i}\right) - \left.\left(\Omega - \frac{\Delta'}{2}\right) \delta\left(\varepsilon_{p_f} + \varepsilon_{k_f} - 2\Omega + \omega - \varepsilon_{k_i} - \varepsilon_{p_i}\right)\right], \\
a'_{fi} = {} & \frac{U_{12} l_{21}^2}{4\Omega^2} \delta_{\mathbf{k}_f,\, \mathbf{k}_i+\mathbf{q}+\varkappa} \left[-\delta\left(\varepsilon_{p_f} + \varepsilon_{k_f} - 2\Omega - \omega - \varepsilon_{k_i} - \varepsilon_{p_i}\right) + 2\delta\left(\varepsilon_{p_f} + \varepsilon_{k_f} - \right.\right. \\
& \left.\left. - \omega - \varepsilon_{k_i} - \varepsilon_{p_i}\right) - \delta\left(\varepsilon_{p_f} + \varepsilon_{k_f} + 2\Omega - \omega - \varepsilon_{k_i} - \varepsilon_{p_i}\right)\right] + \frac{U_{21}}{4\Omega^2} \delta_{\mathbf{k}_f,\, \mathbf{k}_i+\mathbf{q}-\varkappa} \times \\
& \times \left[\left(\Omega + \frac{\Delta'}{2}\right)^2 \delta\left(\varepsilon_{p_f} + \varepsilon_{k_f} + 2\Omega + \omega - \varepsilon_{k_i} - \varepsilon_{p_i}\right) + 2\left(\Omega^2 - \frac{\Delta'^2}{4}\right) \delta\left(\varepsilon_{p_f} + \varepsilon_{k_f} + \right.\right. \\
& \left.\left. + \omega - \varepsilon_{k_i} - \varepsilon_{p_i}\right) + \left(\Omega - \frac{\Delta'}{2}\right)^2 \delta\left(\varepsilon_{p_f} + \varepsilon_{k_f} - 2\Omega + \omega - \varepsilon_{p_i} - \varepsilon_{k_i}\right)\right].
\end{aligned}\right\} \quad (6)$$

Из выражений (6) следует, что сечение неупругого рассеяния электрона в электромагнитном поле представляет собой сумму сечений; этим сечениям соответствуют процессы, в которых при рассеянии происходит изменение энергии налетающего электрона на величину $\pm\omega$, $\pm(\omega \pm 2\Omega)$. Для экспериментального определения сечений этих процессов следует измерить изменение числа электронов в каждой группе при включении лазерного импульса. При этом следует учесть, что в аргументах δ-функций из (6) присутствуют начальная и конечная кинетические энергии атома, поэтому разброс конечных энергий свободного электрона — $\Delta\varepsilon_{p_f} = |\varepsilon_{k_f} - \varepsilon_{k_i}| \simeq qv$ (v — скорость атома). Следовательно, чтобы надежно разделить группы электронов с различной кинетической энергией, величина 2Ω должна быть больше qv. Кроме того, величина 2Ω должна превосходить разброс энергий начального пучка электронов.

Для реальных значений интенсивности лазерного излучения условие $2\Omega > qv$ соответствует приближению «слабого поля» ($|\Delta| \gg |l_{21}|$); при этом $\omega + 2\Omega \simeq E_2 - E_1$. Из выражений (6) следует, что в этом случае сечениями рассеяния с изменением энергии налетающего электрона на величины $\pm(\omega - 2\Omega)$ можно пренебречь по сравнению с сечениями других процессов.

Таким образом, в случае «слабого поля» можно выделить четыре группы электронов с энергией, отличающейся от начальной: электроны с энергиями $\varepsilon_{p_f} \simeq \varepsilon_{p_i} \mp \omega$, у которых изменение энергии произошло в результате тормозного излучения и поглощения фотона; электроны с энергиями $\varepsilon_{p_f} \simeq \varepsilon_{p_i} \mp (E_2 - E_1)$, у которых изменение энергии связано с возбуждением и девозбуждением атома.

Исходя из амплитуд (6), выпишем выражение для сечения вынужденного тормозного излучения (поглощения)

$$d\sigma_{\pm}^{\omega} = \frac{E_0^2 |f_{12}^z|^2 \, d\sigma_{21}(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f^{\pm})}{8\omega\left[(\Delta + \mathbf{v}\varkappa)^2 + 4|l_{12}|^2\right]} \cos^2(\widehat{\mathbf{q}\mathbf{E}_0}), \quad \frac{p_f^{\pm 2}}{2} = \frac{p_i^2}{2} \mp \omega. \qquad (7)$$

Здесь f^z_{12} — сила осциллятора перехода $2 \to 1$; $d\sigma_{21}$ — сечение неупругого столкновения электрона с атомом.

Сечение (7) следует усреднить по максвелловскому распределению атомов по скоростям; аналитические выражения удается получить в двух случаях. При $|l_{21}| \ll \delta$ (δ — допплеровская ширина линии) после усреднения получаем

$$d\sigma_{\gamma} = \frac{E_0^2}{4\omega}\left\{\frac{\sqrt{\pi}\,\xi}{2|l_{12}|} e^{-\xi^2\Delta^2} - \xi^2 + 2\xi^3\Delta e^{-\xi^2\Delta^2}\,\mathrm{Erfi}\,(\xi\Delta)\right\} |f_{12}^z|\, d\sigma_{21}(\mathbf{p}_i,\ \mathbf{p}_f^{\pm}) \cos^2(\widehat{\mathbf{q}\mathbf{E}_0}), \qquad (8)$$

$$\xi = \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{Mc^2}{2kT}} = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\delta},\ \ \mathrm{Erfi}\,(x) = \int\limits_0^x e^{t^2} dt.$$

Если к тому же $\Delta \gg \delta$, то выражение для сечения совпадает с формулой (7), если в (7) сделать замену $[(\Delta + \mathbf{v}\varkappa)^2 + 4|l_{12}|^2] \to \Delta^2$. В случае, когда $|l_{12}|^2 \gg \Delta,\ \delta$, сечение тормозного излучения достигает своего максимального значения — $\frac{d\sigma_{21}\cos^2(qE_0)}{4}$.

Автор благодарен В. М. Буймистрову за помощь в постановке задачи и обсуждение результатов.

Литература

[1] Г. В. Островская, А. Н. Зайдель. Усп. физ. наук, *111*, 579, 1973.
[2] V. M. Buimistrov. Phys. Letters, *30A*, 136, 1969.
[3] Ф. В. Бункин, А. Е. Казаков, М. В. Федоров. Усп. физ. наук, *107*, 559, 1972.
[4] H. Koch, J. Motz. Rev. Mod. Phys., *31*, 920, 1959.
[5] Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Физматгиз, М., 1960.
[6] I. C. Percival, M. I. Seaton. Phil. Trans. Roy. Soc., *A251*, 113, 1958.
[7] В. М. Буймистров. УФЖ, *17*, 640, 1972.
[8] В. М. Буймистров, Л. И. Трахтенберг. Тр. МФТИ. Радиотехн. и электрон., ч. 2, 68, 1971 (1973).
[9] В. М. Буймистров, Л. И. Трахтенберг. ЖЭТФ, *69*, 108, 1975.
[10] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. Физматгиз, М., 1963.
[11] L. Hahn, I. V. Hertel. J. Phys. B., *5*, 1995, 1972.

Поступило в Редакцию 21 апреля 1977 г.