

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Поляризационные эффекты в атомных переходах

В.А. Астапенко, Л.А. Бурева, В.С. Лисица

В обзоре предпринята попытка объединить различные типы эффектов поляризации атомного остова при свободно-свободных, свободно-связанных и связанно-связанных переходах заряженных частиц в поле многоэлектронного атома, рассматривавшиеся, как правило, отдельно в различных приложениях на протяжении более 40 лет. Рассмотрение всех типов переходов проведено на основе как чисто классической, так и квантовой модели рассеяния и переизлучения энергии частицы, взаимодействующей с атомным остовом. Приведены результаты расчетов и измерений для сил осцилляторов радиационных переходов в атомах и многозарядных ионах, поляризационных явлений при фотоэффекте, а также нового канала поляризационной рекомбинации, тормозного излучения электронов, релятивистских и тяжелых частиц на сложных атомах и ионах.

PACS numbers: 32.10.Dk, 32.80.Cy, 34.80.Dp

Содержание

1. Введение (155).
2. Модели динамической поляризуемости атомных систем (158).
 - 2.1. Локальная плазменная модель Брандта – Лундквиста.
 - 2.2. Статическая поляризуемость атома Томаса – Ферми.
 - 2.3. Кинетическая модель поляризуемости атомов.
 - 2.4. Квантовые расчеты динамической поляризуемости.
3. Поляризационные явления при фотоэффекте. Классические и квантовые модели (162).
 - 3.1. Модели динамических поляризуемостей в статистических теориях фотоэффекта на сложных атомах.
 - 3.2. Квантовые методы расчета сечений фотопоглощения.
4. Поляризационные эффекты при связанно-связанных переходах (166).
 - 4.1. Влияние поляризуемости остова на силы осцилляторов переходов в атомах щелочных металлов и щелочноподобных ионах.
 - 4.2. Поляризационная релаксация дважды возбужденных дискретных состояний в ионах со сложным остовом.
5. Поляризационные свободно-свободные переходы (169).
 - 5.1. История вопроса.
 - 5.2. Поляризационное тормозное излучение и поглощение на нейтральных атомах.
 - 5.3. Статистическая

модель поляризационного тормозного излучения на многоэлектронных атомах и ионах.

6. Связь поляризационного излучения с переходным излучением и комптоновским рассеянием. Поляризационное излучение релятивистских частиц в твердом теле (174).
 - 6.1. Поляризационное тормозное и переходное излучение.
 - 6.2. Некогерентное поляризационное тормозное излучение. Связь с комптоновским рассеянием.
 - 6.3. Интерференционно-поляризационные эффекты при излучении релятивистских частиц в среде.
 7. Поляризационная рекомбинация (176).
 - 7.1. Классическая теория поляризационной рекомбинации электрона на томас-фермиевском ионе.
 - 7.2. Квантовые расчеты и сравнение различных вкладов в полное сечение рекомбинации.
 8. Многоквантовые и интерференционные эффекты в поляризационном тормозном излучении (179).
 - 8.1. Многофотонное поляризационное тормозное излучение и поглощение.
 - 8.2. Поляризационно-интерференционные эффекты при столкновении электрона с атомом и ионом в окolorезонансном лазерном поле.
 9. Экспериментальные аспекты (182).
 - 9.1. Эксперименты по ПТИ электронов на атомах.
 - 9.2. Релятивистские эксперименты на ускорителях.
 - 9.3. Поляризационное тормозное излучение тяжелых заряженных частиц.
 - 9.4. Эксперименты по рассеянию электронов на атомах в присутствии лазерного поля.
 - 9.5. Столкновительно-индуцированное поглощение в газах.
 - 9.6. Поляризационные эффекты вблизи 4f-структуры в ТИ на металлических мишенях.
 10. Заключение (190).
- Список литературы (191).

В.А. Астапенко. Московский физико-технический институт
141700 Долгопрудный, Московская обл., Институтский пер. 9,
Российская Федерация
Тел. (095) 576-32-55. Факс (095) 408-61-55
E-mail: astval@hotmail.com

Л.А. Бурева. Институт спектроскопии РАН
142190 Троицк, Московская обл., Российская Федерация
Тел. (095) 135-14-20. Факс (095) 132-65-08
E-mail: bureyeva@sci.lebedev.ru

В.С. Лисица. Российский научный центр "Курчатовский институт",
Институт ядерного синтеза
123182 Москва, пл. Курчатова 1, Российская Федерация
Тел. (095) 196-73-34. Факс (095) 943-00-73
E-mail: lisitsa@nfi.kiae.ru

Статья поступила 31 мая 2001 г., после доработки 31 июля 2001 г.

1. Введение

В обзоре рассматривается влияние поляризации остова сложных атомов или ионов на радиационные процессы при столкновениях атомных частиц или переходах внутри самих атомов. Такое поляризационное излучение (или поглощение) представляет собой новый канал

взаимодействия атомов с электромагнитным полем, вносящий вклад в радиационные процессы, сравнимый (и иногда даже преобладающий) с излучением внешней частицы.

Термин "поляризация" употребляется ниже в смысле динамической поляризации среды переменными электрическими полями заряженных частиц, характерной обычно для плазменных приложений. Однако роль среды в рассматриваемых ниже атомных процессах играет сложный атом, обладающий собственными электронами, которые и поляризует налетающая заряженная (или нейтральная) частица. Наведенный в атоме или атомном остове переменный дипольный момент ответствен за возникновение так называемого поляризационного излучения (ПИ).

На раннем этапе исследования поляризационного канала для свободно-свободных, свободно-связанных и связанно-связанных переходов развивались независимо друг от друга. Только в последнее время была в достаточной мере осознана единая природа поляризационного механизма в различных физических процессах, таких, как атомные переходы в дискретном спектре, тормозное излучение на мишенях с остовом, фотоионизация многоэлектронных атомов и фоторекомбинация на сложных ионах.

С точки зрения классической механики, ясно, что все типы указанных переходов могут быть рассмотрены на единой основе, поэтому ниже широко используются квазиклассические или просто классические методы рассмотрения. При этом по необходимости будут цитироваться не только недавние работы, но и уже сравнительно давно известные работы, имеющие приоритетный характер либо вносящие ясность в установление указанных связей.

Явление поляризационного излучения наиболее просто понять, пользуясь его аналогией с рассеянием света атомами. Физическая аналогия поляризационных эффектов имеет свое графическое выражение. На рисунке 1 представлены классическая схема поляризационного излучения (рис. 1а) и диаграммы Фейнмана (рис. 1б), описывающие в первом борновском приближении поляризационное ТИ электрона на атоме с учетом возможности возбуждения/ионизации атома в ходе излучения фотона ("неупругое", или некогерентное ПИ). Если остов мишени своего состояния не изменяет ("упругое", или когерентное ПИ), то, естественно, $f=i$. Эти же диаграммы описывают поляризационные эффекты: в фотоионизации, если начальное состояние налетающего электрона заменить на связанное состояние; в фоторекомбинации, если связанным считать конечное состояние, а начальное — свободным; в связанно-связанных переходах, если оба состояния считать связанными. Двойная линия, соединяющая вершины в приведенных диаграммах, представляет собой электронный пропагатор остова мишени, который в случае "упругого" ПИ выражается через динамическую поляризуемость, а для ТИ с ионизацией атома — через сечение комптоновского рассеяния.

Для свободно-свободных переходов процесс ПИ аналогичен тормозному излучению, и его часто называют поляризационным тормозным излучением — ПТИ [1]. Для связанно-связанных переходов процессы ПИ более известны как эффекты поляризации остова, изменяющие силы осцилляторов радиационных переходов.

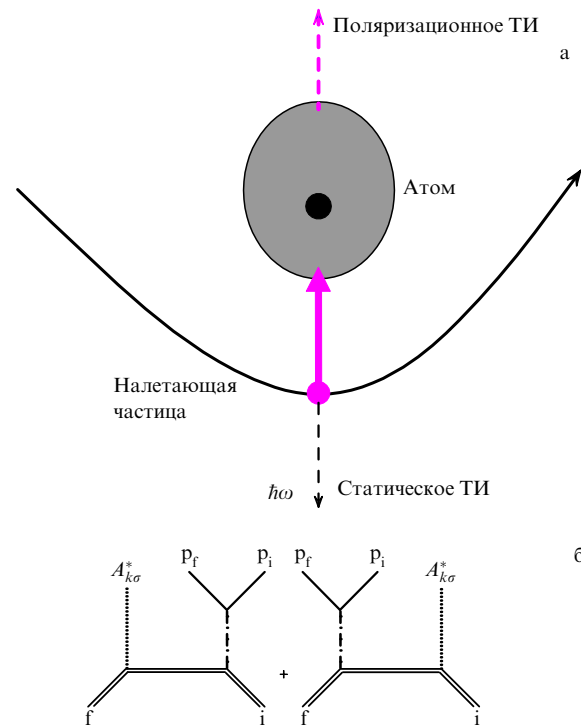


Рис. 1. (а) Классическая схема поляризационного ТИ заряженной частицы на атоме. (б) Фейнмановские диаграммы, описывающие поляризационное ТИ электрона на атоме в первом борновском приближении. Двойные линии относятся к электронному остову атома, одинарные — к налетающему электрону, штриховая линия представляет свободное электромагнитное поле, штрихпунктирная — фотонный пропагатор.

Ясно, что свободно-связанные переходы можно назвать поляризационной рекомбинацией — ПР [2].

Разделение излучающих систем на возмущающую и поляризующуюся части достаточно условно и используется в основном для наглядности изложения. В действительности излучает вся составная (компаунд) система "атом + возмущающие частицы среды". Такой подход к проблеме излучения составной системой был впервые предложен М. Борном в 1940 г. при рассмотрении общей теории тормозного излучения (см. гл. 22, п. 9 в книге Мотта и Мессис [3]). Из него следует, в частности, возможность существенной интерференции обычного и поляризационного каналов излучения. Обычный канал, отвечающий движению возмущающей частицы в потенциале "замороженного" невозмущенного атома, мы будем ниже называть статическим в отличие от указанного поляризационного канала, отвечающего деформации атома (или его остова).

Одни из первых оценок поляризационного канала в излучении были проведены С.П. Капицей [4] и М.Л. Тер-Микаеляном [5] в рамках чисто классической электродинамики. Эти расчеты основаны на представлении о том, что собственное электрическое поле заряженной частицы в веществе испытывает рассеяние, которое может быть учтено путем умножения интенсивности этого поля на коэффициент экстинкции в среде. Выражая этот коэффициент через статическую поляризуемость среды, можно получить простое соотношение (см. [6, задача к § 119])

$$dI(\omega) = \frac{8\pi\omega^4 \sqrt{\epsilon} N \alpha^2}{3c^3} \int |E(\omega)|^2 dV d\omega, \quad (1.1)$$

где ε — диэлектрическая проницаемость среды; N , α — концентрация и поляризуемость рассеивающих центров среды; $E(\omega)$ — фурье-образ поля заряженной частицы на частоте ω ; c — скорость света.

Описанный подход восходит к известному методу эквивалентных фотонов Ферми [7], который рассматривал взаимодействие заряженных частиц с атомами вещества как поглощение потока эквивалентных фотонов с интенсивностью $I(\omega)$, определяемой фурье-разложением электрического поля, создаваемого заряженной частицей. Отметим, что эквивалентность фотонов является точным результатом для релятивистских частиц (теорема Вайцеккера–Вильямса), однако ниже используется, как и у самого Э. Ферми, приближенная версия этой теоремы, связанная с полями нерелятивистских частиц.

Это поле может быть найдено из уравнений движения налетающего электрона в атомном потенциале

$$\mathbf{F} = \frac{e\mathbf{r}}{r^3} = -\frac{m_e\ddot{\mathbf{r}}}{Z_{\text{eff}}e}, \quad \mathbf{F}_\omega = -\frac{m_e\omega^2\mathbf{d}_\omega}{Z_{\text{eff}}e^2}. \quad (1.2)$$

Здесь Z_{eff} — эффективный заряд ионного остова (зависящий от энергии электрона и излучаемой частоты).

Таким образом, легко обобщить указанные выше результаты на случай динамической поляризации атома полем частицы, записав интенсивность рассеянного поля в виде произведения интенсивности $I(\omega)$, определяемой квадратом модуля фурье-компоненты (1.2), на сечение рассеяния $\sigma_{\text{scat}}(\omega)$:

$$I^{\text{PR}}(\omega) = \sigma_{\text{scat}}(\omega) I(\omega). \quad (1.3)$$

Сечение $\sigma_{\text{scat}}(\omega)$ связано с динамической поляризуемостью $\alpha(\omega)$ иона (атома) на частоте ω :

$$\sigma_{\text{scat}}(\omega) = \frac{8\pi\omega^4}{3c^4} |\alpha(\omega)|^2, \quad (1.4)$$

$$\alpha(\omega) = \sum_n |d_{in}|^2 [(\omega_{ni} - \omega - i \cdot 0)^{-1} + (\omega_{ni} + \omega - i \cdot 0)^{-1}], \quad (1.5)$$

в которой (вследствие нерезонансности) следует учитывать (виртуальные) переходы излучающего электрона на все остальные уровни иона (пронумерованные в (1.5) индексом n).

С помощью соотношений (1.2) легко связать интенсивность ПИ с интенсивностью ТИ на некотором эффективном кулоновском центре с зарядом Z_{eff} . Действительно, из уравнения движения частицы следует, что поле, создаваемое самой частицей на ядре, в Z_{eff} раз меньше поля ядра, обуславливающего ускорение электрона и тем самым интенсивность его излучения. Отсюда для отношения интенсивностей рассеянного поля налетающей частицы и излученного поля при взаимодействии с ядром следует простое соотношение

$$\frac{I^{\text{PR}}(\omega)}{I^{\text{Br}}(\omega)} = \left[\frac{m\omega^2|\alpha(\omega)|}{e^2 Z_{\text{eff}}} \right]^2 \equiv R(\omega), \quad (1.6)$$

из которого видно, что спектральное распределение интенсивности поля налетающей частицы выпадает.

Выражение (1.6) отвечает классическому дипольному приближению по взаимодействию заряженной частицы с

атомами вещества и, несмотря на его простоту, описывает ряд важных закономерностей ПИ. Из него ясно, что поляризационные эффекты пропорциональны, естественно, поляризуемости среды. При малых частотах динамическая поляризуемость переходит в статическую и поляризационные эффекты быстро убывают с уменьшением частоты. При больших частотах динамическая поляризуемость отвечает рассеянию на квазисвободных электронах $\alpha(\omega) = -N_{\text{eff}}e^2/(m\omega^2)$, так что отношение обоих каналов оказывается равным отношению числа связанных электронов N_{eff} к эффективному заряду атомного остова Z_{eff} :

$$R(\omega) = \left(\frac{N_{\text{eff}}}{Z_{\text{eff}}} \right)^2. \quad (1.7)$$

Ясно, что эффективный заряд Z_{eff} , так же как и эффективное число N_{eff} квазисвободных электронов, зависит от степени проникновения налетающего электрона в атомный остов, корректный учет которого и составляет предмет расчета вклада поляризационного канала в излучение.

В рамках классической теории интенсивность тормозного, фоторекомбинационного и линейчатого излучений определяется одними и теми же формулами и непрерывно переходит от одного процесса к другим при изменении частоты ω . Различие возникает лишь при последующей квазиклассической процедуре приравнивания излученной энергии $\hbar\omega$ разности начальных E_i и конечных E_f энергий излучающей частицы. Для тормозного излучения оба значения E_i и E_f относятся к непрерывному спектру, тогда как для фоторекомбинационного и линейчатого излучения одно состояние (или оба) является связанным: $E_f = -1/n_f^2$ (E_f выражено в Ry).

Детальные расчеты поляризационного тормозного излучения для нейтральных атомов достаточно сложны [1]. Однако основные закономерности этого процесса могут быть наглядно получены с помощью классической теории динамической поляризуемости томас-фермиевского атома. Более того, можно получить универсальные оценки вклада атомной поляризуемости в радиационные процессы и установить соответствующие законы подобия (скейлинги) для ПИ.

Поляризационное излучение или поглощение представляет, как уже отмечалось, новый канал взаимодействия частиц с излучением, связанный с наведением дополнительных дипольных моментов при столкновениях частиц. Вклад этого канала исчезает при полной ионизации атомов. Однако в частично ионизированной плазме достаточно тяжелых элементов или в газе вклад поляризационного канала в излучение становится сравнимым и даже превосходит вклад обычного статического канала.

Общая схема, показывающая соответствие между обычными и поляризационными каналами излучения фотонов, представлена в табл. 1. Оба класса процессов разделены на процессы с реальными фотонами, отвечающие излучению самой налетающей частицы, и процессы с эквивалентными (по терминологии Э. Ферми) фотонами, отвечающие рассеянию энергии поля налетающей частицы, т.е. поляризационному излучению. Последние разделены на известные резонансные (вблизи центра излучаемой линии) и нерезонансные процессы (в крыле линии), детально обсуждаемые ниже.

Таблица 1. Типы радиационно-столкновительных переходов, отвечающих излучению налетающей (или возбужденной внутриатомной) частицы и излучению поляризованного или возбужденного атомного остова

Тип перехода	Процессы с реальными фотонами	Процессы с ЭВ фотонами	
		Центр линии	Крыло линии и за его пределами
Свободно-свободный	Тормозное излучение	Столкновительное возбуждение	Поляризационное тормозное излучение
Свободно-связанный	Фоторекомбинационное излучение	Диэлектронная рекомбинация	Поляризационная рекомбинация
Связанно-связанный	Линейчатое излучение	Диэлектронные связанно-связанные переходы	Поляризационные связанно-связанные переходы

Выше говорилось об электрон-атомных столкновениях, поскольку соответствующие эффекты ПТИ здесь достаточно велики. Что касается атом-атомных столкновений, то расчеты ПИ для них относятся, в основном, к области высоких энергий, отвечающих применимости борновского приближения [8].

Вместе с тем ряд интересных свойств ПИ связан с медленными атом-атомными столкновениями. ПИ при медленных столкновениях имеет весьма интересную особенность, связанную с возможностью образования квазимолекул в процессе столкновения. Такие квазимолекулы могут обладать наведенным дипольным моментом, даже если сталкивающиеся партнеры таковым не обладали. Примером может служить столкновение двух симметричных молекул H_2 , имеющих возможность поглощать излучение путем наведения дипольного момента при столкновениях. Такие механизмы поглощения-испускания принято называть поглощением (или излучением), обусловленным столкновениями (collision induced absorption — CIA, collision induced emission — CIE [9]).

Хотя основное внимание ниже уделяется излучению атомов при взаимодействии с заряженными частицами, из сказанного ясно, однако, что столкновения нейтралов также могут сопровождаться возникновением переменного дипольного момента и соответствующим поляризационным излучением. Несмотря на то, что частоты относительного движения нейтралов, как правило, значительно меньше, чем у зарядов, и их ПИ мало, оно может иметь принципиальное значение для трансформации теплового движения в излучение. Действительно, при низких температурах степень возбуждения среды очень мала, и излучение должно быть сильно подавлено. Единственным остающимся каналом может служить как раз ПИ, соответствующее хотя и слабым, но отличным от нуля наведенным при столкновениях поляризационным дипольным моментам. Поэтому ниже мы включили эффекты ПИ, связанные с нейтралами.

2. Модели динамической поляризуемости атомных систем

Ключевой величиной, описывающей поляризационные эффекты в атомных переходах, является динамическая, вообще говоря, обобщенная (недипольная) поляризу-

емость атома (иона) или атомного остатка $\alpha(\omega, q)$, зависящая от частоты и переданного импульса. Ее вычисление является сложной задачей, имеющей точное решение только для водородоподобных ионов [10]. Квантовомеханические расчеты динамической поляризуемости многоэлектронных атомов достаточно сложны и трудоемки. В то же время важные зависимости этой величины могут быть получены из гораздо более простых и наглядных статистических моделей атома. Одной из таких моделей является приближение локальной плазменной частоты Брандта–Лундквиста. Соответствующие результаты дают не только качественное, но часто и количественное описание эффектов, сглаженных по квантовым особенностям.

2.1. Локальная плазменная модель Брандта–Лундквиста

Локальная плазменная модель была предложена в работе [11] для описания фотопоглощения многоэлектронными атомами в спектральном диапазоне $\omega \sim Z Ry$. В этом случае, в отличие от диапазона больших ($\omega \sim Z^2 Ry$) и малых ($\omega \sim Ry$) частот, поглощение фотона в большей степени определяется, согласно [11], коллективными эффектами, а не одночастичным взаимодействием. На основании этих качественных соображений электронный остов атома аппроксимируется неоднородным распределением заряда, взаимодействие которого с электромагнитным полем определяется условием плазменного резонанса (а.е.):

$$\omega = \omega_p(r) = \sqrt{4\pi n(r)}; \quad (2.1)$$

здесь $n(r)$ — локальная электронная плотность и $\omega_p(r)$ — соответствующая ей локальная плазменная частота. Легко убедиться, что условию (2.1) соответствует следующее выражение для дипольной динамической поляризуемости [11], удовлетворяющее дисперсионным соотношениям и правилу сумм:

$$\alpha^{BL}(\omega) = \int_0^{R_0} \frac{\omega_p^2(r)r^2 dr}{\omega_p^2(r) - \omega^2 - i \cdot 0} = \int \alpha^{BL}(r, \omega) dr; \quad (2.2)$$

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

Выражение (2.2) имеет правильную высокочастотную асимптотику:

$$\alpha^{BL}(\omega \rightarrow \infty) \rightarrow -\frac{N_e}{\omega^2}, \quad (2.3)$$

N_e — число электронов в атоме, а в низкочастотном пределе формула (2.2) дает

$$\alpha^{BL}(\omega \rightarrow 0) \rightarrow \frac{R_0^3}{3}. \quad (2.4)$$

Несмотря на кажущуюся простоту, формула (2.4) в ряде случаев хорошо описывает имеющиеся экспериментальные данные. Это в первую очередь относится к многоэлектронным атомам с замкнутыми оболочками, поскольку тогда основной вклад в поляризуемость дает непрерывный энергетический спектр атома [12], и приближение локальной плазменной частоты (2.2) наиболее

адекватно. Указанное обстоятельство демонстрируется табл. 2. При расчетах статической поляризуемости в модели Брандта–Лундквиста использовался радиус атома (иона), вычисленный с учетом корреляционной поправки в модели Томаса–Ферми–Дирака.

Таблица 2. Статические поляризуемости атомов и ионов с замкнутыми электронными оболочками

Атом (ион), а.е.	ArI	KrI	XeI	KII	RbII	CsII	SrIII	BaIII
$\alpha_0^{\text{экс}}$	11	17	27	7,5	12	16,3	6,6	11,4
$\alpha_0^{\text{вир}}$	19,3	26,8	30,9	9,1	14,3	17,8	8,7	11,4
$\alpha_0^{\text{вIII}}$		21,1	25,5	6,6	11,9	15,3	7,5	9,7
$\alpha_0^{\text{шЗ}}$	11,6	17,2	27,3	5,25	8,5	14,6		
$\alpha_0^{\text{БЛ}}$	22	24	27	8,6	11,6	13,5	7	8,4

$\alpha_0^{\text{вир}}$ — расчет вариационным методом [13]; $\alpha_0^{\text{вIII}}$ — расчет Виноградова и Шувелько [14] (см. раздел 2.2); $\alpha_0^{\text{шЗ}}$ — расчет Штогга и Зарембы [15] в рамках формализма электронной плотности; $\alpha_0^{\text{БЛ}} = R_0^3/3$ — расчет в модели Брандта–Лундквиста [11].

Из таблицы 2 следует, что, будучи весьма простым, метод Брандта–Лундквиста дает для статической поляризуемости в большинстве случаев удовлетворительное соответствие с экспериментом для атомов (ионов) с заполненными оболочками.

Отметим, что выражение (2.2) представляет собой наиболее простую реализацию формализма функционала электронной плотности (ФЭП) для вычисления поляризуемости. Существенно более сложные реализации ФЭП в рамках квантовомеханического подхода изложены в работах [15] и [16]. Отметим, что для статической поляризуемости сферически симметричных систем в [15] получено выражение через пространственную плотность поляризуемости:

$$\alpha_0 = \frac{4}{3} \pi \int_0^\infty r^3 \alpha(r) dr, \quad (2.5)$$

в котором, однако, функция $\alpha(r)$ является решением сложного интегрального уравнения.

В работе [17] рассматривались различные модификации базовой формулы (2.2) в связи с задачей вычисления сечения атомного фотоэффекта. Эти модификации основывались на введении в рассмотрение помимо локальной плазменной частоты (2.1) также локальной "одночастичной" частоты (single-particle frequency)

$$\omega_{\text{сп}}^2(r) = \frac{1}{r^3} N_{\text{out}}(r), \quad N_{\text{out}}(r) = \int_r^\infty n(r') d^3 r' \quad (2.6)$$

и диэлектрической проницаемости атома в простейшей форме

$$\varepsilon(r, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2(r)}{\omega^2}. \quad (2.7)$$

Одним из использовавшихся в [17] выражений для динамической поляризуемости является равенство

$$\alpha(\omega) = \int \frac{n(r) \varepsilon^{-1}(r, \omega)}{\omega_{\text{сп}}^2 - \omega^2} d^3 r. \quad (2.8)$$

Результаты применения формул (2.2) и (2.8) близки. Большее влияние на результат оказывает модель, используемая для локальной электронной плотности атома. Так, например, для томас-фермиевского атома оказывается возможным получить выражение для динамической поляризуемости, выявляющее закон подобия по отношению частоты к заряду ядра:

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

$$\beta(v) = \int_0^{x_0} \frac{4\pi f(x) x^2 dx}{4\pi f(x) - v^2 - i \cdot 0}; \quad (2.9)$$

здесь $r_{\text{TF}} = ba_0/Z^{1/3}$ — радиус Томаса–Ферми; $b = (9\pi^2/128)^{1/3} \cong 0,8853$; Z — заряд ядра атома; a_0 — борковский радиус; $\beta(v)$ — безразмерная поляризуемость как функция приведенной частоты $v = \omega/Z$; $x_0 = R_0/r_{\text{TF}}$ — приведенный радиус атома; $f(x)$ — функция, описывающая распределение электронной плотности в атоме. В случае атома Томаса–Ферми имеем

$$f(x) = f_{\text{TF}}(x) = \frac{32}{9\pi^3} \left(\frac{\chi(x)}{x} \right)^{3/2}, \quad (2.10)$$

$\chi(x)$ — функция Томаса–Ферми.

Заметим, что формулы (2.9) применимы также и для других статистических моделей электронной плотности, в которых справедливо ее представление в виде

$$n(r) = Z^2 f \left(x = \frac{r}{r_{\text{TF}}} \right), \quad (2.11)$$

где $r_{\text{TF}} = b/Z^{1/3}$ — радиус Томаса–Ферми.

В качестве функции подобия $f(x)$ вместо (2.10) удобно использовать функцию в модели Ленца–Иенсена [13], которая имеет вид

$$f_{\text{Л}}(x) \cong 3,7 \exp(-\sqrt{9,7x}) \frac{(1 + 0,26\sqrt{9,7x})^3}{(9,7x)^{3/2}}. \quad (2.12)$$

Функция Ленца–Иенсена (2.12) близка к своему аналогу в модели Томаса–Ферми (2.10). Ее достоинством является более реалистичный ход зависимости при больших x .

На рисунке 2 представлено отношение модуля приведенной динамической поляризуемости атома к своему высокочастотному пределу ($\beta_\infty(v) = -b^{-3}/v^2$), вычисленное по формулам (2.9)–(2.12) (пунктирная линия) и полученное из результатов расчета в приближении случайных фаз с обменом [18] (сплошная кривая). Из рисунка 2 следует, что модель Брандта–Лундквиста сглаженным образом описывает частотное поведение динамической поляризуемости, обладающее особенностями вблизи потенциалов ионизации электронных подболочек подобно тому, как статистическая плотность электронного распределения передает ход точной квантовомеханической зависимости.

2.2. Статическая поляризуемость атома Томаса–Ферми

Существует ряд других подходов к вычислению поляризуемости атома Томаса–Ферми. В данном разделе мы остановимся на расчете статической поляризуемости α_0

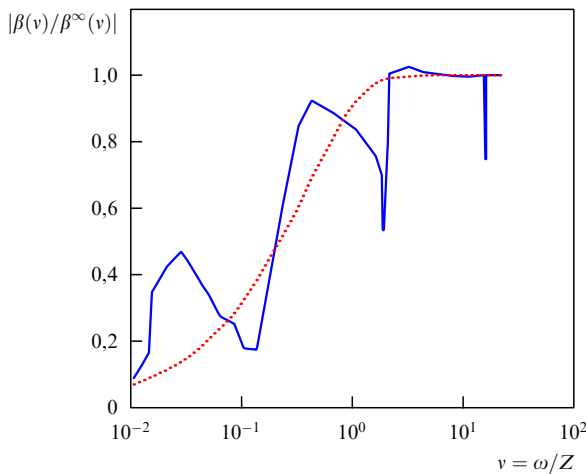


Рис. 2. Нормированные на свой высокочастотный предел модули динамической поляризуемости как функции безразмерной частоты $v = \hbar\omega/(2Z) R_{\text{У}}$ для атома Kr: сплошная кривая — по данным работы [18], пунктир — расчет для томас-фермиевского атома в модели Брандта–Лундквиста.

атома (иона), базирующемся на решении дифференциального уравнения для наведенного потенциала в рамках приближения Томаса–Ферми [14]. Для поляризуемости многозарядных ионов в [14] было получено равенство

$$\alpha_0 = \frac{63}{16} \frac{N_c^3}{Z^4}. \quad (2.13)$$

Зависимость Z^{-4} статической поляризуемости многозарядного иона от заряда ядра, вытекающая из формулы (2.13), следует также и из квантового рассмотрения для ионов с заполненными оболочками. В этом случае, если $Z \gg N_c$, минимальная частота виртуального перехода пропорциональна квадрату заряда ядра. Тогда из общего квантовомеханического выражения для поляризуемости

$$\alpha(\omega) = \sum_n \frac{f_{in}}{\omega_m^2 - \omega^2} \quad (2.14)$$

следует вышеуказанная зависимость от Z .

Заметим, что для водородоподобного иона

$$\alpha_0 = \frac{9}{2} \frac{1}{Z^4}, \quad (2.15)$$

так что использование формулы (2.13) приводит к относительной ошибке 14%. Для незаполненных электронных оболочек основной вклад в статическую поляризуемость дает виртуальный переход без изменения главного квантового числа, тогда $\alpha_0 \propto Z^{-3}$.

В заключение этого пункта заметим, что для ионов с заполненной внешней оболочкой неплохое согласие с экспериментом дает простая эмпирическая формула для статической дипольной поляризуемости внешней оболочки с главным квантовым числом n

$$\alpha_0 = N_n \frac{n^6}{Z_n^4}; \quad (2.16)$$

здесь N_n и Z_n — число электронов во внешней оболочке и эффективный заряд ядра соответственно. Последняя величина может быть определена как $Z_n = n\sqrt{2I_n}$, где I_n — потенциал ионизации внешней оболочки. Особенно хороший результат (2.16) дает для неоподобных ионов ($n = 2$, $N_n = 8$). Это можно увидеть из табл. 3, в которой также приведены результаты расчетов по формулам (2.13), (2.16) и экспериментальные данные [20]. Как видно из данной таблицы, соответствие с экспериментом несколько ухудшается с ростом степени ионизации иона, когда ситуация становится более "водородоподобной", и формула (2.16) дает слегка заниженное значение. В то же время (2.16) дает лучшее соответствие с экспериментом, чем (2.13), особенно для больших степеней ионизации.

2.3. Кинетическая модель поляризуемости атомов

Динамическая поляризуемость томас-фермиевского атома в приближении локальной диэлектрической проницаемости рассчитывалась в работе [21] на основе плазменного кинетического уравнения Власова. Использованный авторами подход весьма близок к приближению Брандта–Лундквиста (см. раздел 2.1). Рассмотрение в [21] основывалось на решении следующего уравнения для электрического потенциала φ , определяющего рассеянное поле излучения частоты ω , падающее на атом:

$$\text{div} [\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \nabla \varphi(\mathbf{r})] = 0, \quad (2.17)$$

с соответствующими граничными условиями на бесконечности и локальной диэлектрической проницаемостью в виде (2.7). Отметим, что уравнение (2.17) справедливо в длинноволновом приближении $\lambda \gg R_0$, что, тем не менее, не противоречит по существу высокочастотному приближению для диэлектрической проницаемости (2.7). Действительно, одновременное выполнение условий этих приближений (для умеренных зарядов ядра и степеней ионизации) сводится к неравенству

$$10 \text{ эВ} \ll \omega \ll 10 \text{ кэВ},$$

охватывающему широкий частотный диапазон. Так же, как и в приближении Брандта–Лундквиста, использова-

Таблица 3. Статические поляризуемости многозарядных неоподобных ионов (а.е.)

Ион	Ar ⁺⁸	Ca ⁺¹⁰	Ti ⁺¹²	Fe ⁺¹⁶	Co ⁺¹⁷	Ni ⁺¹⁸	Zn ⁺²⁰	Kr ⁺²⁶	Mo ⁺³²
$I_n, \text{эВ}$	396,4	558,2	737,8	1168	1293	1419	1693	2728	3960
Z_n	10,8	12,8	14,73	18,54	19,5	20,43	22,32	28,33	34,13
$\alpha_0^{\text{expt}} [20]$	3,16(−2)*	1,74(−2)	1,04(−2)	4,44(−3)	3,69(−3)	3,08(−3)	2,63(−3)	9,31(−4)	4,62(−4)
$\alpha_0 (2.13)$	3,75(−2)	2,46(−2)	1,68(−2)	8,61(−3)	7,41(−3)	6,4(−3)	10(−3)	4,46(−3)	2,24(−3)
$\alpha_0 (2.16)$	3,76(−2)	1,89(−2)	1,09(−2)	4,33(−3)	3,53(−3)	2,94(−3)	2,06(−3)	7,95(−4)	3,77(−4)

* Здесь число в круглых скобках обозначает степень 10.

ние томас-фермиевской модели для электронной плотности атома (иона) приводит к скейлингу типа (2.9):

$$\alpha(\omega, Z, Q) = \frac{1}{Z} \alpha_X \left(\frac{\omega}{Z}, Q \right). \quad (2.18)$$

Здесь $Q = (Z - N_e)/Z$ — кратность ионизации, α_X — универсальная функция приведенной частоты $\nu = \omega/Z$.

Максимум мнимой части поляризуемости α_X приходится (для $Q = 0,3$) на значение приведенной частоты, равное $\nu_{\max} = 0,06$ а.е. Это почти на порядок меньше, чем дает график на рис. 2 для нормированного модуля поляризуемости нейтрального атома Томаса – Ферми.

В работе [21] отмечалось, что формулы приближения Брандта – Лундквиста могут быть получены из соответствующего решения уравнения (2.17) по теории возмущений, что, вообще говоря, нарушает самосогласованность задачи. Однако с точки зрения численных расчетов использование более простого выражения (2.2) для динамической поляризуемости атома представляется более предпочтительным.

2.4. Квантовые расчеты динамической поляризуемости

В случае атома водорода и водородоподобных ионов задача определения дипольной динамической поляризуемости решается точно (см., например, [22]). Соответствующее выражение может быть получено в рамках формализма кулоновской функции Грина. Для атома, находящегося в $1s$ -состоянии, оно имеет вид

$$\begin{aligned} \alpha_{1s}(\omega) &= -\frac{1}{\omega^2} \{1 - T(E_{1s} + \omega) - T(E_{1s} - \omega)\}, \\ T(E) &= \frac{2^7 \eta^5}{(2 - \eta)(1 + \eta)^8} F \left[2 - \eta, 4, 3; \left(\frac{1 - \eta}{1 + \eta} \right)^2 \right], \\ \eta &= \frac{Z}{\sqrt{-2E}}; \end{aligned} \quad (2.19)$$

здесь Z — заряд ядра, $F(z)$ — гипергеометрическая функция.

Обобщенная (недипольная) поляризуемость водородоподобного атома также может быть представлена в замкнутой форме. Для основного состояния соответствующее выражение для обобщенной поляризуемости следует из матричных элементов, полученных в [10] методами функции Грина и в [23] на основании вариационного принципа. Для возбужденных состояний оно было получено в [18] методом функции Грина в координатном представлении. Соответствующие результаты представлены в виде весьма громоздкой суммы гипергеометрических функций.

Для атомных систем, в которых многочастичные эффекты слабо проявляются в поляризуемости на частотах, актуальных для данной конкретной задачи, поляризуемость может быть представлена в водородоподобной форме с использованием метода квантового дефекта или модельного потенциала [22]. В этом случае основной вклад в динамическую поляризуемость вносят виртуальные переходы внешнего электрона в дискретном спектре, для которых велики силы осцилляторов.

В случае отрицательных ионов (для частот меньше и порядка потенциала фотоотрыва) основной вклад в динамическую поляризуемость дает внешний электрон, взаимодействие которого является слабым как с элект-

ронами остова, так и с ядром атома. Динамическая поляризуемость отрицательного иона водорода вычислялась в работе [24].

В ряде случаев одночастичное приближение при вычислении поляризуемости оказывается недостаточным вследствие важности многочастичных эффектов. Это имеет место, например, для атомов с заполненными оболочками. Здесь необходимо использовать методы многочастичной теории возмущений [25]. Исходное выражение для обобщенной поляризуемости в такого рода вычислениях имеет вид [1, гл. 7]

$$\alpha(\omega, q) = \frac{-i}{(\mathbf{e}q)} \sum_{\varepsilon > F, j \leq F} \frac{2 \langle j | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | \varepsilon \rangle \langle \varepsilon | (\mathbf{e}\mathbf{D}(\omega)) | j \rangle (\varepsilon + I_j)}{(\varepsilon + I_j)^2 - \omega^2}, \quad (2.20)$$

где \mathbf{e} — единичный вектор поляризации излучения, F — уровень Ферми, I_j — потенциал ионизации j -й оболочки. Суммирование осуществляется по занятым оболочкам и свободным состояниям, включая интегрирование по непрерывному спектру. Многочастичные корреляции в (2.20) учтены введением эффективного дипольного момента $\mathbf{D}(\omega)$, являющегося решением некоторого интегрального уравнения. Это уравнение на графическом языке в приближении случайных фаз с обменом состоит из диаграмм, основная структурная единица которых описывает процессы рождения и аннигиляции электрон-дырочной пары. Последний процесс может быть интерпретирован как наведение поляризации в электронном остове мишени. Поправки, связанные с приближением случайных фаз, могут заметно изменять динамическую поляризуемость и другие излучательные характеристики многоэлектронной системы, например сечение фотоионизации. Здесь могут оказаться существенными и корреляции других типов, как это известно из сравнения рассчитанных сечений фотоэффекта с экспериментальными данными [25].

Поляризуемости атомов благородных газов в приближении случайных фаз с обменом были рассчитаны в работе [12], где, в частности, показано, что без учета многочастичных корреляций форма координаты и форма импульса в определении гамильтониана взаимодействия дают существенно различный результат для поляризуемости. В приближении случайных фаз оба подхода дают практически совпадающие значения, причем весьма близкие к экспериментальным данным. Было также установлено, что определяющий вклад в поляризуемость атомов благородных газов дают виртуальные переходы из внешней оболочки в d -состояния непрерывного спектра. Вклад переходов в дискретный спектр составляет 10–20 %.

Динамическая поляризуемость ридберговских состояний с фиксированными сферическими квантовыми числами n, l, m вычислялась в работе [26] с использованием квазиклассических выражений для радиальных интегралов, входящих в силы осцилляторов (см. (2.14)). Был установлен ряд отличительных свойств поляризуемости высоковозбужденных водородоподобных состояний, связанных с приблизительно эквидистантным энергетическим спектром ридберговских энергетических уровней. Данное обстоятельство приводит к качественно иному поведению резонансной поляризуемости, связанному с наложением вкладов от уровней, лежащих выше и ниже данного. В результате динамическая

поляризуемость высоковозбужденных водородоподобных состояний не меняет знака при переходе частоты через резонанс, а в межрезонансных промежутках либо дважды обращается в нуль, либо ни разу. Нерезонансная динамическая поляризуемость водородоподобных ридберговских уровней с номером n пропорциональна n^6 , в то время как каждое слагаемое ряда в выражении (2.14) пропорционально n^7 , что обусловлено взаимной компенсацией вкладов состояний, лежащих выше и ниже данного. Для статической поляризуемости в [26] было получено следующее выражение:

$$\alpha_{nlm}(\omega \ll n^{-3}) = 14n^6 \left(1 - \frac{m^2}{l^2}\right) \times \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s^2} \left[J_s'^2(s\varepsilon) + \frac{1-\varepsilon^2}{\varepsilon^2} J_s^2(s\varepsilon) \right], \quad (2.21)$$

где $\varepsilon = \sqrt{1 - (l/\tilde{n})^2}$ — величина, аналогичная эксцентриситету орбиты при классическом движении электрона, $\tilde{n} = 2nm'/(n - n')$ — эффективное главное квантовое число, $J_s(z)$ — функция Бесселя. В (2.21) заряд ядра положен равным единице. Для $m = l = 0$ формула (2.21) дает $\alpha_{n00} \approx 0,6n^6$.

В работе [26] отмечалось, что при переходе к высоковозбужденным состояниям сложных атомов полученные результаты сохраняют свою силу, если $l > 2$, когда квантовый дефект пренебрежимо мал. В противоположном случае малых l не происходит компенсации вкладов в поляризуемость данного высоковозбужденного уровня от состояний, лежащих выше и ниже данного. Вследствие этого величина динамической поляризуемости оказывается порядка n^7 . Так, для сферически симметричного состояния атома можно получить, ограничиваясь главным членом суммы, следующее выражение:

$$\alpha_{n00} = \frac{3n^7 \delta}{\delta^2 - (\omega n^3)^2}, \quad \delta = \delta_1 - \delta_0, \quad (2.22)$$

где $\delta_{0,1}$ — квантовые дефекты состояний с $l = 0, 1$.

Динамическая поляризуемость ридберговских состояний, усредненная по угловым квантовым числам, изучалась в [27] в приближении Крамерса для сил осцилляторов. Было дано общее выражение величины $\langle \alpha(\omega) \rangle_{lm}$ через элементарные функции, из которого, в частности, следует формула для статической поляризуемости ридберговского атома

$$\alpha(0) = \frac{15n^6 + 21n^4}{8Z^4}. \quad (2.23)$$

В [27] были также рассмотрены сдвиги высоковозбужденных уровней во внешних радиационных полях. В результате было показано, что в пределе $n \rightarrow \infty$ динамическая поляризуемость является дифференциальным оператором, действующим на функцию, описывающую спектральную плотность поля излучения.

Проведенный обзор результатов показывает, что плазменная статистическая модель атомных систем дает, как показывает сравнение с квантовыми расчетами, вполне приемлемые результаты для динамических поляризуемостей в среднем вдали от резких особенностей, обусловленных оболочечной структурой атомов. Следует иметь в виду, что для многих приложений,

например, радиационных потерь плазмы, интерес представляют эффекты, интегральные по частоте и взвешенные по ионизационному составу ионов. Для таких характеристик детали спектральных зависимостей не играют существенной роли, так что для них достаточно использовать усредненные параметры, описываемые статистической моделью.

3. Поляризационные явления при фотоэффекте. Классические и квантовые модели

Влияние поляризации атомного остова на сечение фотоэффекта служит одним из ярких примеров проявления поляризационных эффектов в атомных переходах. Речь идет о связанно-свободных переходах, когда энергия внешнего электромагнитного поля может передаваться связанному электрону либо непосредственно (прямой канал), либо через виртуальное возбуждение атомного остова (поляризационный канал). В данном разделе мы рассмотрим простые классические и квантовые модели расчета сечения фотоионизации, учитывающие многочастичные эффекты поляризационного типа.

3.1. Модели динамических поляризуемостей в статистических теориях фотоэффекта на сложных атомах

Рассмотрим сначала классические модели для расчета сечения фотоэффекта на многоэлектронных атомах. Простейший подход основывается на использовании формул (2.2), (2.8), представляющих динамическую поляризуемость атома в виде функционала электронной плотности в приближении локальной плазменной частоты. Данный метод был предложен в [11] для учета многочастичных эффектов в фотопоглощении как подход, альтернативный одночастичному описанию явления. Его физическое обоснование выражается равенством (2.1): взаимодействие излучения с атомными электронами локализовано в пространственной точке, определяемой условием плазменного резонанса.

Сечение фотопоглощения удобно представить через спектральную функцию распределения дипольных возбуждений в виде

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi^2}{c} g(\omega), \quad \int g(\omega) d\omega = N_e. \quad (3.1)$$

Вторая формула в (3.1) представляет собой известное правило сумм. Спектральная функция $g(\omega)$ удовлетворяет равенствам

$$g(\omega) = \sum_n f_{in} \delta(\omega - \omega_n) = \frac{2}{\pi} \omega \operatorname{Im} \alpha(\omega). \quad (3.2)$$

Здесь первое равенство — определение спектральной функции, а второе следует из оптической теоремы.

Спектральная функция, соответствующая динамической поляризуемости в форме (2.2), может быть записана в виде пространственного интеграла от радиальной электронной плотности:

$$g(\omega) = \int n(r) \delta(\omega - \omega_p(r)) d^3r. \quad (3.3)$$

Равенство (3.3) получается из (2.2) после применения формулы Сохоцкого и оптической теоремы.

Заметим, что в рамках статистической модели атома сечение фотоионизации совпадает с сечением фотопоглощения в силу отсутствия связанных состояний в рассматриваемом приближении.

Наличие дельта-функции в (3.3) позволяет провести интегрирование в явном виде, и с помощью (3.1) находим для сечения фотоионизации атома в приближении Брандта – Лундквиста следующее выражение:

$$\sigma_{\text{ph}}^{\text{BL}}(\omega) = \frac{4\pi^2\omega}{c} r_{\omega}^2 \frac{n(r_{\omega})}{|n'(r_{\omega})|}; \quad (3.4)$$

здесь r_{ω} есть решение уравнения (2.1), эта величина соответствует расстоянию, на котором имеет место плазменный резонанс; штрих обозначает дифференцирование по радиусу.

Для электронной плотности типа (2.11) формулу (3.4) можно переписать в виде, выявляющем скейлинг сечения фотоэффекта по приведенной частоте $\nu = \omega/Z$:

$$\sigma_{\text{ph}}^{\text{BL}}(\omega) = \sigma_{\text{ph}}^{\text{BL}}\left(\nu = \frac{\omega}{Z}\right) = \frac{9\pi^4\nu}{32c} x_{\nu}^2 \frac{f(x_{\nu})}{|f'(x_{\nu})|}, \quad (3.5)$$

где x_{ν} — решение уравнения

$$\nu = \sqrt{4\pi f(x)}. \quad (3.6)$$

Равенство (3.6) следует из (2.1) с учетом (2.11).

На основании (3.5), (3.6) проанализируем спектральное сечение фотоэффекта в рамках различных статистических моделей.

Помимо приближения Томаса – Ферми для нормированной функции электронной плотности $f(x = r/r_{\text{TF}})$ — формула (2.10) — рассмотрим статистическую модель Ленца – Йенсена (2.12) и модель экспоненциальной экранировки, в которой

$$f_{\text{exp}}(x) = \frac{128}{9\pi^3} \exp(-2x). \quad (3.7)$$

Как уже отмечалось в разделе 2, преимущество модели Ленца – Йенсена (2.12) по сравнению с подходом Томаса – Ферми (2.10) заключается в более реалистичном поведении электронной плотности на больших расстояниях. На малых расстояниях функции (2.12) и (2.10) практически совпадают.

Приближение экспоненциальной экранировки (3.7) для многоэлектронных нейтральных атомов весьма грубо, однако оно может оказаться полезным в ряде других случаев. Мы здесь рассматриваем это приближение, поскольку на его основе возможно получить простое аналитическое выражение для сечения фотоэффекта. Действительно, с использованием (3.7) трансцендентное уравнение (3.6) легко решается, и для соответствующих сечений фотоионизации из (3.5) можно получить следующее выражение:

$$\sigma_{\text{ph}}^{\text{BL}(\text{exp})}(\omega = Z\nu) = \frac{9\pi^4}{64c} \nu \ln^2\left(\frac{16\sqrt{2}}{3\pi\nu}\right), \quad \nu \leq \frac{16\sqrt{2}}{3\pi} \cong 2,4. \quad (3.8)$$

Характерной чертой сечения (3.8) является наличие "частоты отсечки", выше которой сечение равно нулю. Данное обстоятельство связано с ограниченностью

радиальной электронной плотности вблизи ядра в модели экспоненциальной экранировки, так что существует такая частота излучения, при которой условия плазменного резонанса (2.1), (3.6) не выполняются.

На рисунке 3 представлены результаты расчета сечения фотоэффекта как функции приведенной частоты в рамках вышеперечисленных моделей. Видно, что распределения Томаса – Ферми и Ленца – Йенсена дают близкие результаты для сечения фотоэффекта. Небольшое отличие заключается в том, что в области малых частот модель Ленца – Йенсена дает несколько меньшую величину сечения, чем модель Томаса – Ферми. Это обстоятельство связано с уже упоминавшимся выше более реалистичным убыванием электронной плотности Ленца – Йенсена на больших расстояниях от ядра. Сечение фотоэффекта, полученное в рамках приближения экспоненциальной экранировки (3.8), обладает ярко выраженным максимумом, причем $\omega_{\text{max}}^{\text{exp}} \cong 8,8Z$ эВ.

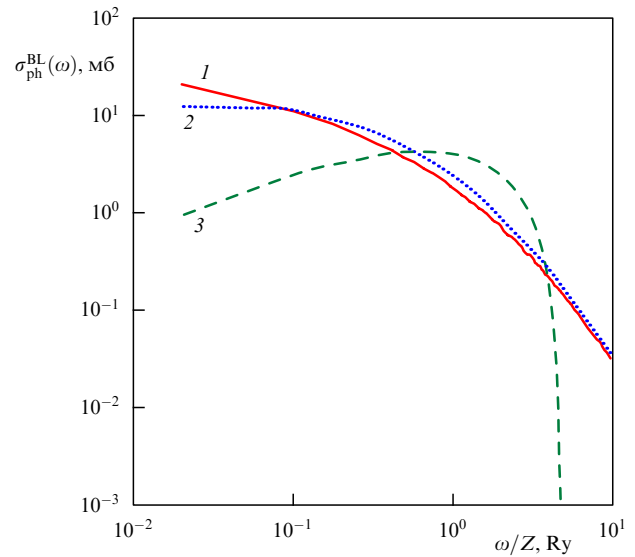


Рис. 3. Сечение фотоэффекта в приближении Брандта – Лундквиста в рамках различных статистических моделей для электронной плотности атома: Томаса – Ферми (кривая 1); Ленца – Йенсена (2); экспоненциальной экранировки (3).

Использование электронных распределений, учитывающих оболочечную структуру атома, таких, как, например, хартри-фоковские электронные плотности, приводит к возникновению характерных "осцилляций" в спектральном сечении фотоэффекта вблизи "средней линии", задаваемой распределениями Томаса – Ферми и Ленца – Йенсена.

В работе [17] приводятся результаты расчетов сечения атомного фотоэффекта для различных модификаций приближения Брандта – Лундквиста типа (2.8) и различных видов диэлектрической проницаемости, в том числе с учетом локальной дисперсии по формуле

$$\varepsilon(q, \omega, r) = \frac{\omega^2 - \omega_{\text{F}}^2(r) - (3/5)v_{\text{F}}^2(r)q^2}{\omega^2}; \quad (3.9)$$

здесь $v_{\text{F}}(r) = (3\pi^2 n(r))^{1/3}$ — локальная скорость Ферми атомных электронов. Данный учет локальной дисперсии диэлектрической проницаемости атома несколько

уменьшает сечение фотоэффекта в низкочастотном диапазоне и увеличивает его в области высоких частот.

Кроме того, в [17] для распределения Ленца–Иенсена рассчитывались сечения фотопоглощения ионов с различной степенью ионизации. Проведенный расчет показал, что в спектральном диапазоне $\omega < ZRy$ происходит существенное уменьшение сечения атомного фотоэффекта с ростом степени ионизации (параметра $Q = (Z - N_e)/Z$), в то время как в высокочастотной области $\omega > 3ZRy$ зависимость сечения фотоионизации от величины Q практически отсутствует.

3.2. Квантовые методы расчета сечений фотопоглощения

Наряду с рассмотренными в разделе 3.1 по существу классическими методами учета межчастичных корреляций в фотопоглощении, рядом авторов развивались квантовые методы, учитывающие поляризационные многочастичные эффекты, в которых сечение фотоионизации рассчитывалось с использованием несколько более упрощенных подходов по сравнению с последовательным квантовомеханическим рассмотрением, таким, как ПСФО [25, 28].

Один из таких методов, основанный на формализме функционала локальной электронной плотности, применялся в работе [15] для численного расчета фотопоглощения на атомах благородных газов, а также их статических поляризуемостей. Упрощение расчета достигалось за счет введения локального эффективного потенциала для определения одночастичных волновых функций основного состояния системы. С этой целью обменно-корреляционная энергия определялась в приближении локальной плотности согласно равенствам

$$V_{xc}(r) = -\frac{0,611}{r_s(r)} - 0,0333 \ln\left(1 + \frac{11,4}{r_s(r)}\right),$$

$$\frac{4}{3} \pi r_s^3(r) = n^{-1}(r). \quad (3.10)$$

В результате решение соответствующих уравнений оказывалось не более сложным, чем решение уравнений Хартри. Поляризационно-корреляционные эффекты учитывались с помощью введения самосогласованного поля, представляющего собой сумму внешнего и индуцированного полей и являющегося решением интегрального уравнения. Заметим, что в ПСФО расчетах [25, 28] эффективный дипольный момент $\mathbf{D}(\omega)$, описывающий многочастичные корреляции, также являлся решением интегрального уравнения (см. раздел 2.4).

Результаты расчетов сечения фотопоглощения, проведенных в [15], оказались в отличном соответствии с имеющимися экспериментальными данными. Кроме того, они продемонстрировали важную роль поляризационных многочастичных эффектов в фотоионизации атомов с замкнутыми электронными оболочками. Эти эффекты приводят (за исключением случая неона) к существенному сдвигу максимума сечения фотоионизации в область больших частот по сравнению с приближением независимых электронов, когда положение максимума практически совпадает с пороговой энергией фотона. Например, максимум сечения фотоионизации атома ксенона вблизи 4d-порога сдвинут примерно на $2,5 Ry$ в сторону высоких частот. При этом отсутствует сильный резонанс, связанный (в рамках одночастичного

рассмотрения) с переходом из 4d-подоболочки в виртуальное f-состояние, расположенное в непрерывном спектре.

Упомянутый сдвиг максимума сечения фотопоглощения является следствием перераспределения сил осцилляторов атомных переходов из припороговой области в высокочастотную часть спектра за счет поляризации атомного остова. Данная поляризация приводит к своеобразной экранировке/деэкренировке внешнего поля. Анализ частотно-пространственных зависимостей локального самосогласованного поля показал, что в низкочастотном крыле линии фотопоглощения на малых расстояниях от ядра имеет место сильная экранировка внешнего поля, так что вектор напряженности самосогласованного поля направлен в противоположную сторону по отношению к вектору индуцирующего поля. В высокочастотном крыле линии, напротив, на малых расстояниях происходит деэкренировка внешнего поля. Интересно, что для всех частот ионизирующего излучения "переключение" режима экранировки на деэкренировку с ростом расстояния от ядра происходит в максимуме радиального распределения электронной плотности атомной подоболочки, вносящей наибольший вклад в сечение процесса.

Отметим, что использованный в работе [15] метод локальной электронной плотности предсказывает более низкое (на несколько электрон-вольт) значение порога фотоэффекта по сравнению с его наблюдаемой величиной. В то же время данный метод не описывает высоколежащие состояния дискретного спектра атома. Важно подчеркнуть, что при этом правило сумм для сечения фотопоглощения выполняется, поскольку "нефизический" вклад непрерывного спектра в сечение компенсируется неучтенным вкладом дискретного спектра, прилегающего к порогу фотоионизации. Данное обстоятельство в значительно более выраженном виде присутствует в вышеизложенных вариантах классического описания атомного фотоэффекта (см. раздел 2.1). Как это видно из рис. 3, модели Томаса–Ферми и Ленца–Иенсена для атомной электронной плотности дают сечение фотоионизации, сильно затянутое в область низких частот, хотя правило сумм для соответствующих сечений также выполняется. В рамках данных статистических моделей дискретный энергетический спектр атома, естественно, вообще отсутствует, так что "нефизическая" область непрерывного спектра ниже порога фотоионизации в известной мере моделирует вклад неучтенных связанных состояний.

В заключение данного раздела остановимся на простой квантовой модели атомного фотоэффекта, допускающей аналитическое представление сечения процесса [29]. С формальной точки зрения данный подход базируется на приближенном операторном равенстве, выражающем изменение центробежной энергии как основного фактора при поглощении фотона:

$$\exp\{-i(H_0 + \Delta_1)t\} \exp(iH_0t) \approx \exp(-i\Delta_1t),$$

$$\Delta_1 = \frac{1}{r^2}, \quad (3.11)$$

откуда следует выражение для сечения процесса

$$\sigma_{ph}(\omega) \approx \frac{2\pi Z^2}{3c\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi | \exp(-i\Delta_1 t) | \psi \rangle \exp(i\omega t) dt. \quad (3.12)$$

Представление сечения (3.12) названо в [29] "гибридным" приближением. Оно является квантовомеханическим в силу общего операторного подхода и в то же время имеет классические черты, поскольку используется приближенная коммутация операторных экспонент (3.11).

Заметим, что формулу (3.12) можно переписать через электронную плотность, если сделать следующую замену:

$$|\psi(r)|^2 \rightarrow 4\pi r^2 n(r). \quad (3.13)$$

Тогда после интегрирования по времени остающийся интеграл с дельта-функцией берется, и результат представляется в виде

$$\sigma_{\text{ph}}(\omega) = \frac{8\pi^3 Z^2}{3c} \frac{1}{\omega^{7/2}} n\left(r = \frac{1}{\sqrt{\omega}}\right). \quad (3.14)$$

Из (3.14), в частности, следует водородоподобная высокочастотная асимптотика сечения фотоионизации, если $n(r \rightarrow 0) \rightarrow \text{const}$.

Таким образом, сечение фотоэффекта в гибридном приближении Роста [29] оказывается так же, как и в приближении Брандта–Лундквиста (3.4), функционалом электронной плотности. Только в этом случае характерное расстояние излучательного процесса r_ω определяется не условием плазменного резонанса (2.1), а равенством

$$\omega = H_1(r) - H_0(r) = \Delta_1. \quad (3.15)$$

Уравнение (3.15) непосредственно вытекает из (3.11) с учетом закона сохранения энергии.

На основании (3.15) можно дать физическую интерпретацию приближения Роста [29]. Из этого уравнения следует, что поглощение фотона происходит при фиксированной электронной координате так же, как и в приближении Борна–Оппенгеймера, когда координаты ядер молекулы не изменяются в процессе электронного перехода. Формула (3.15) является как раз математическим выражением этого факта. Итак, гибридное приближение Роста можно рассматривать как обобщение адиабатического принципа на случай электронных переходов в атомах.

На рисунке 4 представлено отношение сечения фотоионизации основного состояния атома водорода (рассчитанного по формуле Роста — кривая 1 — и в приближении Крамерса — кривая 2) к зоммерфельдовскому сечению. 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 асимптотику (ω^{-3} вместо $\omega^{-7/2}$), в то время 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 выполнение 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 $\omega_{\text{max}}^R \approx 0,082$ а.е., что существенно меньше первого

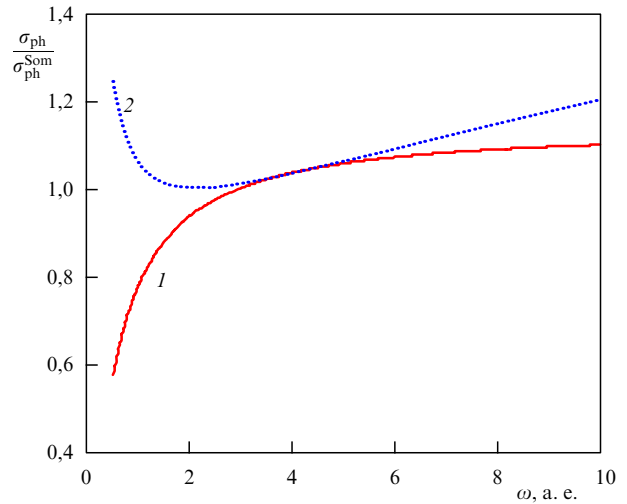


Рис. 4. Отношение сечения фотоионизации основного состояния атома водорода, рассчитанного в рамках различных подходов (кривая 1 — приближение Роста, кривая 2 — приближение Крамерса), к зоммерфельдовскому сечению.

потенциала возбуждения, при этом максимальная величина сечения равна $\sigma_{\text{ph max}}^{(R)} \approx 1,127$ а.е.

В работе [29] было дано также обобщение формулы фотопоглощения (3.12) на случай атома гелия. Сравнение полученного результата с экспериментальными данными показало, что относительная ошибка для умеренных значений энергии фотона находится в пределах 5%.

Поляризационные эффекты значительны в фотоионизации отрицательных ионов из-за большого значения поляризуемости ионного остова, т.е. нейтрального атома. Данному вопросу посвящен обзор [30]. Здесь мы вкратце остановимся на приближенном квантовомеханическом расчете этого явления для случая отрицательного иона щелочного атома, когда поляризуемость атома-остатка особенно велика. Вклад поляризационных эффектов в процесс может быть учтен с помощью следующего эффективного потенциала [31]:

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\alpha(\omega) \mathbf{E} \mathbf{r}}{r^3} \left[1 - \exp\left(-\left(\frac{r}{r_0}\right)^3\right) \right] \cos(\omega t), \quad (3.16)$$

где $\alpha(\omega)$ — динамическая поляризуемость атома, r_0 — размер его внешней орбиты. Множитель в квадратных скобках в (3.16) описывает уменьшение поляризационного взаимодействия на малых расстояниях. Для вычисления сечения фотоионизации с использованием (3.16) и обычного "прямого" потенциала взаимодействия электромагнитного поля с электроном мишени удобно применять аналитическое выражение для волновой функции внешнего электрона отрицательного иона, полученное на основании аппроксимации вариационных результатов [32].

На рисунке 5 представлено спектральное сечение фотоионизации отрицательного иона лития ($I = 0,618$ эВ, $\alpha(0) = 162$ а.е. [33]), вычисленное в приближении плоской волны по ионизируемому электрону с учетом и без учета поляризационных эффектов. Видно, что последние значительно уменьшают сечение процесса на частотах порядка частоты максимума, что связано с противоположным направлением индуцированного ионным ос-

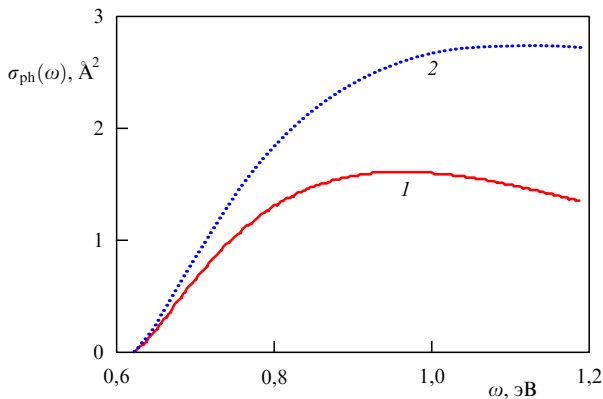


Рис. 5. Сечение фотоионизации отрицательного иона лития, вычисленное с учетом поляризации остова (кривая 1) и без учета поляризационных эффектов (кривая 2).

татком поля по сравнению с направлением внешнего поля.

4. Поляризационные эффекты при связанно-связанных переходах

4.1. Влияние поляризуемости остова на силы осцилляторов переходов в атомах щелочных металлов и щелочноподобных ионах

Исторически ранее других начали исследоваться поляризационные эффекты при переходах связанного электрона в дискретном спектре [34–39]. Эти эффекты проявляются в существенном изменении сил осцилляторов переходов при учете поляризации остова по сравнению с их значением при замороженном остове.

Атомы щелочных металлов представляют собой весьма удобный объект для изучения поляризационных эффектов, поскольку внешний электрон в них хорошо пространственно разделен с атомным остатком. В этом случае взаимодействие между остовом и валентным электроном с хорошей степенью точности можно аппроксимировать заряд-дипольным потенциалом и пренебречь обменными эффектами. Пространственное разделение рассматриваемых электронных плотностей связано также с их сильным разделением по энергии: минимальная энергия возбуждения остова, представляющего собой замкнутую электронную конфигурацию, намного превышает энергию возбуждения внешнего электрона в дискретном спектре. Вследствие этого можно считать, что возмущение остова адиабатически следует за внешним электроном, и для поляризуемости атомного остатка использовать статическое значение α_0 . Кроме того, для исследования вкладов поляризационных эффектов в атомах щелочных металлов весьма удобно то обстоятельство, что их статическая поляризуемость изменяется на два порядка при переходе от лития к цезию.

Влияние поляризационных эффектов может быть заметно не только для связанно-связанных переходов валентных электронов, но и для переходов из внутренних оболочек атомов на незаполненные внешние орбитали. Это влияние на К-спектр поглощения аргона при 1s-4p- и 1s-5p-возбуждении, измеренный в [40], рассчитывалось в работе [17]. Одночастичный подход дает для

сил осцилляторов f_{1s-4p} и f_{1s-5p} значения примерно на 25% ниже экспериментальных, в то же время отношение f_{1s-4p}/f_{1s-5p} оказывается в отличном соответствии с экспериментом. Учет поляризации атома, приводящей в рассматриваемом случае к деэкранировке внешнего поля, предсказывает увеличение сил осцилляторов примерно в 1,23 раза, оставляя неизменным их отношение, что устраняет имевшееся в одночастичной картине расхождение с экспериментом.

В простейшей модели влияние атомного остова на оптические переходы валентного электрона учитывалось путем введения потенциала поля равномерно поляризованного диэлектрического шара вида [34]

$$\varphi(r) = \theta(R_{\text{core}} - r) \frac{(\mathbf{p}\mathbf{r})}{R_{\text{core}}^3} + \theta(r - R_{\text{core}}) \frac{(\mathbf{p}\mathbf{r})}{r^3}; \quad (4.1)$$

здесь $\mathbf{p} = \alpha\mathbf{E}$ — наведенный внешним полем \mathbf{E} дипольный момент, α — поляризуемость остова. Из (4.1) определялась индуцированная добавка к одноэлектронному оператору дипольного момента φ/E , с помощью которой вычислялась модифицированная сила осциллятора. В [34] также была определена поправка D к сумме сил осцилляторов для атома с одним оптическим электроном. Соответствующее выражение имеет вид

$$D = \left(2 \frac{\alpha}{R_{\text{core}}^3} + \frac{\alpha^2}{R_{\text{core}}^6} \right) \int_0^{R_{\text{core}}} P(r) dr + 2\alpha^2 \int_{R_{\text{core}}}^{\infty} P^2(r) \frac{dr}{r^6}, \quad (4.2)$$

где $P(r)$ — радиальная волновая функция валентного электрона.

Проведенные по формуле (4.2) оценки для некоторых одновалентных атомов и ионов показали существенность поляризационной добавки, относительный вклад которой в сумму осцилляторов изменялся, согласно расчетам [34], от 17% у Li до 30% у Al^{2+} . Заметим, что экспериментальное значение поляризуемости остова лития составляет 0,20 а.е., а для остова дважды ионизированного алюминия 0,45 а.е. Сравнение с экспериментальными данными было дано для атома натрия. Оно показало, что учет поляризационных эффектов позволяет с хорошей степенью точности согласовать теорию и эксперимент.

Поляризационные поправки к силам осцилляторов щелочных атомов рассчитывались в работе [35] в рамках квантовомеханической теории возмущений по остаточному взаимодействию между атомным остовом и валентным электроном Δ . Величина Δ была определена как разность между неусредненным оператором кулоновского взаимодействия "валентный электрон–атомный остов" и тем же оператором, усредненным по волновой функции атомного остова. При этом подчеркивалось, что в хартри-фоковском формализме учитывается только сферически-симметричная часть остаточного взаимодействия, приводящая лишь к малому изменению радиуса остова, в то время как именно сферически-несимметричная составляющая Δ вызывает эффективную поляризацию остова валентным электроном. Поскольку внешний электрон пространственно разделен с остатком атома, то для оператора Δ в [35] использовалось приближение $\Delta \rightarrow \mathbf{D}\mathbf{d}/r^3$, где \mathbf{D} , \mathbf{d} — электрические дипольные моменты остова и валентного

электрона соответственно. С помощью этой замены из квантовомеханического выражения для матричного элемента дипольного момента, учитывающего поляризацию атомного остова, следует равенство

$$\mathbf{d}_{fi} = \left\langle \psi_f \left| \mathbf{d} - \alpha \frac{\mathbf{d}}{r^3} \right| \psi_i \right\rangle; \quad (4.3)$$

здесь $|\psi_{i,f}\rangle$ — волновые функции начального и конечного состояний дискретного спектра валентного электрона. Для поляризуемости остова α в [35] использовалось статическое значение, поскольку предполагалось, что атомный остов безынерционно отслеживает положение внешнего электрона из-за низких собственных частот последнего для переходов в дискретном спектре по сравнению с собственными частотами остова. Знак минус перед вторым членом в подынтегральном выражении формулы (4.3), описывающем поляризационный канал, объясняется тем, что валентный электрон индуцирует в остове атома положительную "дырку", создающую антипараллельный дополнительный дипольный момент. Антипараллельность индуцированного дипольного момента ($\alpha > 0$) и обуславливает систематическое уменьшение сил осцилляторов дискретных переходов щелочных атомов по сравнению с предсказаниями хартри-фоковского расчета. Отметим, что (4.3) не учитывает эффекты проникновения валентного электрона в остов, которые весьма слабо влияют на силу осциллятора в рассматриваемом случае. Эти эффекты, однако, также принимались во внимание в [35] на основании линейного приближения, согласно которому матричный элемент от остаточного взаимодействия Δ линейно изменяется с радиусом внутри атомного остатка. Вычисления сил осцилляторов для нижних переходов $ns \rightarrow np$, проведенные в [35], показали, что уменьшение соответствующих величин для щелочных атомов изменяется от менее чем 1% для лития до 16% для цезия.

Для поляризационной поправки первого порядка к силе осциллятора связанно-связанного перехода щелочных атомов было получено выражение [36]

$$f_{ij}^{(1)} = -2\alpha(\varepsilon_{ji})(\varepsilon_j - \varepsilon_i)^2 f_{ij}^{(0)}. \quad (4.4)$$

Как видно из (4.4), для применимости теории возмущений необходимо, чтобы

$$|\varepsilon_j - \varepsilon_i| < \frac{1}{\sqrt{2\alpha(\varepsilon_{ji})}}. \quad (4.5)$$

В таблице 4 приведены значения параметров, характеризующие степень выполнения последнего неравенства для атомов щелочных элементов.

Таблица 4. Параметры щелочных атомов [36], входящие в критерий применимости теории возмущений (формула (4.5))

Атом	$[2\alpha(0)]^{-1/2}$, а.е.	$(\varepsilon_{ij})_{\min}$, а.е.	I_i , а.е.
Li	1,76	0,068	0,198
Na	0,72	0,077	0,189
K	0,30	0,059	0,159
Rb	0,21	0,058	0,154
Cs	0,17	0,053	0,143

Формула (4.4) применима, как отмечалось в [36], не только для щелочных атомов, но также для любых

"непроникающих" в остов атомных состояний, например для состояний с квантовым числом орбитального момента $l > 2$.

Силы осцилляторов главной серии и сечения фотоионизации атомов Li, K, Cs вычислялись в работе [37] с учетом поляризации атомного остатка в рамках подхода, развитого в [35]. Поляризационный потенциал использовался также при определении радиальных волновых функций валентного электрона. Было показано, что во всех случаях, кроме переходов без изменения главного квантового числа, поляризационный эффект очень велик, и его учет дает хорошее соответствие с экспериментальными данными. Изменение волновых функций валентного электрона из-за наличия поляризационного потенциала в гамилтониане системы играло значительно меньшую роль. Это отражает характерную особенность ПИ, при котором, в отличие от обычного статического канала, не требуется изменение движения (ускорение) возмущающей частицы.

Наибольший поляризационный эффект был выявлен для высоких электронных переходов в атоме калия, наименьший — для резонансного перехода в атоме лития, что объясняется малым значением поляризуемости атомного остова в последнем случае. В то же время зависимость поляризационных эффектов от значения поляризуемости остова оказалась немонотонной. Расчет показал, что для атома калия это влияние сильнее, чем для атома цезия, хотя поляризуемость остова цезия почти в три раза выше поляризуемости остова калия. Эта немонотонность обусловлена взаимной компенсацией "прямого" (статического) и поляризационного слагаемых в матричном элементе (4.3) для высоких переходов в атоме калия. В случае цезия такой компенсации нет, а поляризационное слагаемое превосходит "прямое".

Влияние поляризуемости остова на силы осцилляторов переходов в различные компоненты тонкого дублета в атоме цезия также существенно различно [38]: для перехода $6s \rightarrow 10p_{1/2}$ за счет поляризационных эффектов сила осциллятора уменьшается практически на порядок, а для перехода $6s \rightarrow 10p_{3/2}$ — примерно в три раза. В результате учет поляризации улучшает согласие вычисленных значений сил осцилляторов с экспериментальными данными [41].

Исследование влияния поляризации остова на оптические переходы было распространено на ряд других щелочноподобных атомов и ионов [38], причем рассматривались также переходы из первого возбужденного p -состояния в вышележащие s - и d -состояния. Поляризационные эффекты в этих типах переходов оказались более слабыми, чем в главной серии, поскольку здесь нет характерного для основной серии аномального распределения сил осцилляторов, вызывающего подавление "прямого" канала. С ростом заряда иона влияние поляризации остова на оптические переходы, вообще говоря, уменьшается, так как при этом падает значение поляризуемости остова $\alpha \propto Z_i^{-4}$. Для зарядов иона $Z_i \approx 2-3$ вклад поляризационного канала для главной серии остается все еще больше вклада прямого, но для $Z_i > 4$ поляризационные эффекты пренебрежимо малы.

Отношения сил осцилляторов $f_{3/2}/f_{1/2}$ для переходов в состояния с различными полными моментами были рассчитаны в [39] для ряда щелочноподобных атомов и ионов: RbI, SrII, AgI, CsI, BaII. Учет поляризационных

эффектов позволил улучшить соответствие полученных значений $f_{3/2}/f_{1/2}$ с имеющимися экспериментальными данными. Кроме того, было проанализировано влияние поляризационных эффектов на сечения ударного возбуждения дипольно-разрешенных переходов в одновалентных атомах и ионах, пропорциональные квадрату соответствующей силы осциллятора. Расчет в борновском приближении сечения возбуждения перехода $6s-8p$ в ионе ВаII показал, что учет поляризации ионного остова полем налетающего электрона приводит к уменьшению сечения примерно в 1,5–2 раза, что вызвано деструктивной интерференцией "прямой" и поляризационной амплитуд процесса.

Коллективные эффекты при взаимодействии атома с внешним электромагнитным полем учитывались в [17] для согласования экспериментальных значений статической поляризуемости атомов щелочных металлов (α) с результатами расчетов этой величины в одноэлектронном приближении (α_0). Поляризуемости α_0 превосходили свои экспериментальные значения примерно на 20 %, что объяснялось неучетом экранирующего влияния остова в рамках одноэлектронного приближения. Экранировка описывалась с помощью эффективной диэлектрической проницаемости $\epsilon_c = 1 + \lambda_{cv}^2 \alpha_c(0)$, где $\alpha_c(0)$ — статическая поляризуемость атомного остова, λ_{cv} — параметр кулоновской связи остова и валентного электрона. Тогда влияние поляризационных эффектов на статическую поляризуемость описывается равенством $\alpha \cong \alpha_0 \epsilon_c^{-1}$. Рассчитанные таким образом поляризуемости атомов щелочных металлов оказались в хорошем соответствии с экспериментальными данными [42].

Эффекты поляризации остова для щелочных элементов, рассмотренные выше, основывались в основном на учете статической поляризации ввиду того, что потенциал ионизации внешнего электрона мал по сравнению с энергией возбуждения остова. Ситуация изменяется при переходе к атомам других типов и многозарядным ионам. В последнем случае потенциал ионизации быстро увеличивается с возрастанием заряда иона, и учет динамической поляризации остова становится необходимым.

Используя статистическую модель атома, можно найти условия, когда существен учет динамической поляризации. Для этого сравним потенциал ионизации иона с характерной частотой ω^* , определяющей динамическую поляризацию остова. В рамках статистической модели потенциал ионизации I_i , связанный с характерной частотой ω перехода возбужденного электрона, имеет вид:

$$I_i = \omega = \frac{QZ^{4/3}}{0,885X(Q)}, \quad (4.6)$$

где Z — заряд ядра иона, $X(Q)$ — безразмерный радиус иона, зависящий от степени ионизации Q (см. раздел 2).

Значение граничной частоты ω^* , начиная с которой проявляются эффекты динамической поляризуемости, определяется путем приравнивания предельных выражений для поляризуемости в области малых (статический предел) и больших (высокочастотный предел) частот. Подставляя сюда соответствующие оценки из раздела 2, получаем значение граничной частоты

$$\omega^* = Z \frac{\sqrt{1,5(1-Q)}}{X^{3/2}}. \quad (4.7)$$

Сопоставляя (4.7) и (4.6), приходим к условию проявления динамических эффектов

$$\frac{QX(Q)}{1,5(1-Q)} > Z^{-2/3}, \quad (4.8)$$

означающему, что степень ионизации ионов не должна быть слишком мала.

Таким образом, эффекты динамической поляризации остова становятся существенными в спектрах многозарядных ионов. Прямые наблюдения таких эффектов в настоящее время отсутствуют.

4.2. Поляризационная релаксация дважды возбужденных дискретных состояний в ионах со сложным остовом

Приведем, следуя [43], в качестве примера расчет поляризационных переходов в дискретном спектре, отвечающих, очевидно, связанно-связанным переходам. Рассмотрим релаксацию высоковозбужденного электрона в состоянии $n'l'$ в ионе с достаточно сложным остовом, находящемся в основном состоянии n_0l_0 . Возбужденный электрон может перейти на более низко лежащий уровень nl двумя путями: обычным радиационным распадом; возбуждением (виртуальным или реальным) остова с его последующим поляризационным высвечиванием. Последний канал характеризуются образованием дважды возбужденного состояния (n_1l_1, nl). Ясно, однако, что реальное возбуждение такого состояния возможно лишь при наличии случайного резонанса между переходами в остове и высоковозбужденными состояниями nl . Поэтому ниже мы ограничимся более вероятным случаем отсутствия такого точного резонанса; при этом возбуждение остова отвечает переходам без изменения главного квантового числа, при котором энергия дважды возбужденного состояния лежит в пределах дискретного спектра.

Для связанно-связанных переходов внешнего (по отношению к остову) электрона с частотой перехода ω_0 динамическая поляризуемость $\alpha(\omega)$ определяется силой осциллятора f ближайшего к нему радиационного перехода в остове. Полагая далее $\alpha(\omega) \sim f/(2\omega_0\Delta\omega)$ ($\Delta\omega = \omega - \omega_0$), приходим к следующей оценке величины $R(\omega)$ (см. (1.5) и (1.6)):

$$R(\omega) \cong \left(\frac{\omega_0 f}{2Z_c \Delta\omega} \right)^2. \quad (4.9)$$

Рассматриваемые диэлектронные связанно-связанные переходы играют значительную роль как раз для ридберговских электронов, поскольку для них расстройка частот $\Delta\omega$ в любом случае не превышает разности близлежащих уровней $\Delta\omega \leq Z_c^2/n^3$, так что из (4.9) следует

$$R(\omega) \cong \left(\frac{\omega_0 f}{2} \right)^2 \left(\frac{n}{Z_c} \right)^6; \quad (4.10)$$

здесь Z_c — заряд остова.

Типичное значение фактора $\omega_0 f/2$ для переходов без изменения главного квантового числа в остове литиеподобных, бериллиеподобных и более сложных ионов варьируется в пределах 0,1–1,0 а.е. (например, он равен 0,2 а.е. для переходов $2s^2-2s2p$ в ионах N^{3+} , O^{4+} , Ne^{6+} и

т.д.). Поэтому для состояний с $n \geq 2Z_c$ диэлектронные связанно-связанные переходы доминируют над радиационными при той же излучаемой частоте.

Проиллюстрируем важность вклада поляризационных связанно-связанных переходов для иона NeIV (рис. 6) из [43, 44]. Уровень, соответствующий дважды возбужденному состоянию $2s2p^33l$, расположен в области одноэлектронного ридберговского спектра $2s^22p^2n'l$ между уровнями $n' = 9$ и $n' = 10$. В этом случае $\Delta\omega/\omega \sim 10^{-2}$, так что $R \geq 30$. Таким образом, заселение уровня $2s2p^33l$ переходами из верхних уровней, расположенных в области дважды возбужденного уровня $2s2p^33l$ (в данном случае состояния $2s^22p^210l$ и $2s^22p^29l$), будет определяться преимущественно поляризационными переходами, а не прямым радиационным распадом. Этот факт может радикально изменить кинетику заселения ридберговских состояний, например в рекомбинирующей плазме многозарядных ионов.

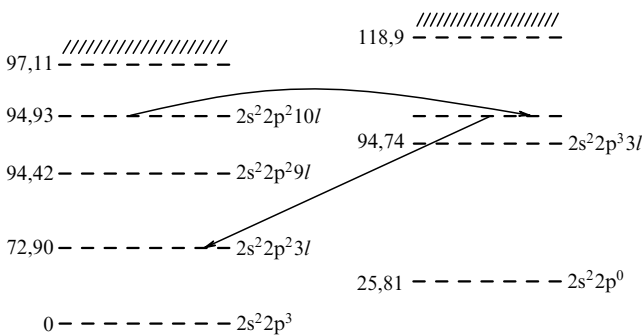


Рис. 6. Схема уровней иона NeIV, соответствующих одно- и двухэлектронному возбуждению (приведены энергии возбуждения в кэВ); показаны радиационный и поляризационный каналы распада состояния $2s^22p^210l$ [43].

В заключение этого раздела следует отметить, что исследования поляризационных эффектов для связанно-связанных переходов детально проведено как теоретически, так и экспериментально для спектров щелочных и щелочноподобных элементов, где валентные и остовные подсистемы хорошо разделены. В то же время спектры элементов со сложной структурой остова, особенно для многозарядных ионов, где дважды возбужденные состояния лежат ниже границы ионизации, исследованы только для отдельных конфигураций, в основном теоретически. Даже терминология, используемая в этих двух случаях, является нередко совершенно различной, затрудняющей понимание общей природы поляризационных явлений. Это связано с отмечавшейся условностью разделения атомной структуры на валентную и остовную части. Такое разделение в современных расчетах часто вообще не производится.

5. Поляризационные свободно-свободные переходы

5.1. История вопроса

Впервые влияние внутренних степеней свободы мишени на свободно-свободные переходы электронов учитывалось Персивалом и Ситоном в работе [45]. В ней анализировались поляризационные характеристики

атомных линий излучения, возбуждаемых электронным ударом, связанные с виртуальным возбуждением связанных электронов в дискретном спектре. Однако эти исследования не получили в дальнейшем своего непосредственного развития.

Независимо от [45] на роль внутренней динамики мишени в ТИ обращалось внимание в ранних работах [46, 47] в связи с расчетами интенсивности излучения и коэффициента поглощения излучения слабоионизированными газами. В [46] была проведена классическая оценка относительного вклада поляризационного канала в ТИ медленных электронов на атомах, говорившая о существовании данного вклада на расстояниях порядка нескольких атомных радиусов. Тем не менее при расчете интенсивности излучения и коэффициента поглощения излучения в газе поляризационное слагаемое авторами [46] не учитывалось. Амплитуда поляризационного канала в ТИ медленных электронов на атомах исследовалась в рамках квантовомеханического подхода в [47]. Расчеты [47] основывались на последовательной связи между сечениями ТИ и упругого рассеяния в статическом атомном потенциале, а вклад ПИ выражался через поляризуемость атома-мишени. Было показано, что сечение поляризационного ТИ медленных электронов (с энергией, много меньшей потенциала ионизации атома) мало по сравнению с сечением обычного (статического) ТИ.

Началом систематического исследования поляризационных эффектов в тормозном излучении электрона на атоме следует считать работу [48]. В ней сечение процесса с учетом вклада поляризационного канала было рассчитано в борновском приближении по налетающей частице для частоты тормозного фотона, близкой к одной из собственных частот атома-мишени (околорезонансное приближение). Затем, в статье [23], данный подход был распространен на случай тормозного излучения произвольной частоты при рассеянии быстрого электрона на атоме водорода, и, таким образом, была продемонстрирована важная роль поляризационного ТИ в широком спектральном интервале тормозных фотонов.

Методы теории многих тел, применявшиеся ранее в описании атомного фотоэффекта [25], использовались в работе [49] для расчета сечения тормозного поглощения фотона при рассеянии медленного электрона на атомах благородных газов (Ar и Xe). Проведенный в [49] численный расчет показал доминирование поляризационного механизма в полном сечении процесса в области частот $\omega \geq 0,25$ а.е. для электронов с начальной энергией 0,01 Ry и 0,09 Ry.

Анализ ТИ на атоме в области высоких частот ($\omega \gg I$) показал, что учет динамики мишени в ходе ТИ приводит к эффекту "раздевания" атома [50]. Данный эффект проявляется в том, что полное сечение процесса оказывается пропорциональным квадрату заряда атомного ядра, а экранирующее влияние связанных электронов компенсируется вкладом поляризационного механизма ТИ.

Важным этапом в развитии теории поляризационного ТИ стали работы [51, 52]. В них для описания поляризационного канала был впервые использован эффективный гамильтониан, содержащий динамическую поляризуемость мишени. На основании проведенных в [51] расчетов удалось согласовать лавинную теорию пробоя с экспериментальными данными по

пороговым интенсивностям оптического пробоя паров щелочных металлов. В [52] было получено аналитическое выражение для коэффициента поглощения излучения при рассеянии медленных электронов на атомах благородных газов, обобщающее результат [46] на учет поляризационного канала.

Учет внутренней динамики мишени полностью изменил представления о ТИ тяжелых частиц на атомах, сечение которого традиционно считалось пренебрежимо малым. В работе [53] впервые рассчитывалось сечение ТИ протона на атоме водорода с учетом поляризационного механизма. В результате было показано, что сечения ТИ электрона и протона на атоме водорода имеют один порядок величины для частот $\omega \leq v_i^2/2$, где v_i — начальная скорость налетающей частицы. Расчет ТИ легких ионов на атомах алюминия с учетом динамики мишени был проведен в [54], что позволило согласовать имеющиеся экспериментальные данные по излучению протонов на тонких алюминиевых мишенях [55] с предсказаниями теории.

Характерные отличительные черты поляризационного механизма ТИ при релятивистских энергиях были выявлены в работах [56, 57]. Одной из этих черт является дипольная диаграмма направленности излучения (для частот $\omega < v_i/R_0$, R_0 — размер атома), в отличие от остронаправленного излучения по статическому каналу. Другая характерная особенность поляризационного ТИ релятивистской частицы на нейтральном атоме — логарифмическое возрастание сечения процесса с ростом энергии НЧ — также отмечалась в этих работах.

5.2. Поляризационное тормозное излучение и поглощение на нейтральных атомах

При расчетах ПТИ на атомных структурах следует различать следующие основные диапазоны энергий налетающих частиц (обычно электронов, для которых имеются достаточно надежные методы расчета): 1) медленные частицы, скорости которых малы по сравнению с атомными скоростями на внешних оболочках; 2) тепловые частицы в горячей плазме со скоростями порядка атомных, для которых существенны эффекты проникновения в атомный остов; 3) быстрые частицы, скорость которых соответствует применимости борновского приближения. В последнем случае уместно выделить область нерелятивистских и релятивистских частиц.

Расчет поляризационного ТИ в общем случае (для произвольной мишени и произвольных параметров движения НЧ) не может быть проведен в замкнутой форме, за исключением нескольких специальных ситуаций. К ним относится, в первую очередь, излучение быстрых заряженных частиц на одноэлектронных атомах.

Выражение для сечения поляризационного ТИ быстрых электронов на водородоподобных мишенях может быть получено в аналитическом виде в рамках первого борновского приближения. В цитированной выше пионерской работе [23] для этого применялся специальный метод, в котором суммирование по промежуточным состояниям атомного электрона заменялось решением дифференциального уравнения специального вида [1, § 4.2]. Другой подход, основанный на формализме кулоновской функции Грина, использовался для расчета сечения поляризационного ТИ быстрого электрона на атоме водорода в работе [10], обобщающей данные [23]

на частотный диапазон фотонов $\omega > 0,5$ а.е., т.е. на область непрерывного спектра атома водорода. В [10] было, в частности, показано, что поляризационный механизм ТИ доминирует в спектральном сечении процесса в диапазоне $1,2 \text{ а.е.} > \omega > 0,36 \text{ а.е.}$, за исключением узких спектральных интервалов вблизи собственных частот атома. Кроме того, из расчетов [10] следует, что полное сечение процесса близко к сечению ТИ на единичном точечном заряде для частот $\omega > 0,5$ а.е. и практически совпадает с ним, если $\omega > 1,5$ а.е., что является проявлением вышеупомянутого эффекта "разделения" атома [50]. Дальнейшее обобщение исследования ТИ на атоме водорода дано в недавней работе [18]. В ней было рассчитано сечение ТИ при столкновении быстрых заряженных частиц с атомом водорода, находящимся в возбужденном состоянии. Расчет проводился с использованием полученного в этой работе выражения для обобщенной поляризуемости возбужденных состояний атома водорода и водородоподобных ионов. Особенностью поляризационного ТИ в данном случае (за исключением возбужденного 2s-состояния) является наличие узких линий излучения, лежащих выше порога ионизации рассматриваемого возбужденного состояния и обусловленных виртуальным девозбуждением атома в лежащие ниже состояния.

Другая физическая ситуация, допускающая аналитическое описание поляризационного ТИ, относится к тормозному эффекту при рассеянии медленных электронов на атомах благородных газов. Здесь первые расчеты ПТИ [47] позволили, как отмечалось, выразить соответствующее сечение через величину статической поляризуемости атома, причем результаты показали малость вклада ПТИ в полное излучение. Отметим, что вклад различных каналов в ТИ в пределе малых частот может быть учтен в общем виде на основании калибровочной инвариантности и законов сохранения [58]. Следует иметь в виду, однако, что вклад поляризационного канала существен в области частот порядка атомных, где указанное разложение уже становится несправедливым. В случае низких температур эта область частот может вносить вклад не для процессов испускания фотонов, а для процессов поглощения, отвечающих обратному тормозному эффекту (тормозному поглощению) [49, 52]. Для этого случая в работе [52] в приближении s-волнового рассеяния электрона было получено следующее выражение для спектрального сечения процесса:

$$\sigma_{\omega}(v) = \frac{16}{3} \frac{\pi^2}{137} \frac{v'}{v} \left\{ \frac{1}{2\omega^3} \left(\frac{v'^2}{v^2} \sin^2(\delta_0) + \frac{v^2}{v'^2} \sin^2(\delta'_0) \right) + \frac{\beta(\omega)^2 \omega}{vv'} \ln \left(\frac{v'+v}{v'-v} \right) + T_{\text{inter}} \right\}, \quad (5.1)$$

где v и v' — скорости электрона до и после неупругого рассеяния, δ_0 и δ'_0 — соответствующие фазы рассеяния s-волны, $\beta(\omega)$ — динамическая поляризуемость атома. В (5.1) первое слагаемое в фигурных скобках соответствует статическому каналу, второе — поляризационному и третье представляет собой интерференционный член, явное выражение для которого довольно громоздко, и мы его не приводим. Интересно отметить, что вклад статического канала тесно связан с характером рассеяния (s-волна), тогда как поляризационный вклад имеет тот же вид, что и в борновском приближении. Именно

поэтому структура результатов [47] в борновском приближении и результатов [52] в приближении s-волны оказываются одинаковыми. Это обстоятельство является характерной чертой самого механизма ПИ, обусловленного не ускорением налетающей частицы, а возмущением атомного осциллятора, происходящим даже при невозмущенном прямолинейном движении НЧ.

Расчет коэффициента поглощения по формуле (5.1) показал, что в случае аргона поляризационный механизм обратного тормозного эффекта качественно меняет картину процесса. На соответствующей спектральной кривой появляется широкий минимум, обусловленный деструктивной интерференцией каналов, глубина которого увеличивается с уменьшением температуры газа. В то же время тормозное поглощение излучения в неоне определяется практически полностью только статическим механизмом. Данное обстоятельство связано с низким значением статической поляризуемости неона ($\beta_{\text{Ne}} = 0,4 \text{ \AA}^3$) по сравнению с аргонном ($\beta_{\text{Ar}} = 1,64 \text{ \AA}^3$).

Укажем, наконец, еще один пример, когда поляризационные эффекты в ТИ велики, а описание процесса относительно просто. Речь идет о ТИ быстрых электронов на отрицательных ионах. Здесь для отрицательного иона водорода в приближении Борна–Бете было получено следующее выражение для спектрального сечения процесса [32]:

$$d\sigma(\omega) = \frac{4v_1^2}{3\pi c^3} \frac{d\omega}{\omega} \sigma_{\text{tr}} + \frac{16 d\omega}{3c^3 v_1^2 \omega} [1 + \omega^2 \alpha(\omega)]^2 \ln \left(\frac{\lambda v_1}{R_0 \omega} \right), \quad (5.2)$$

где σ_{tr} — транспортное сечение рассеяния электрона на нейтральном атоме, R_0 — размер иона, λ — неопределенный коэффициент порядка единицы. В (5.2) первое слагаемое связано с рассеянием на нейтральном атоме, второе — на слабосвязанном электроне, причем первый член в квадратных скобках описывает статический канал, второй — поляризационный. Рассчитанная по (5.2) частотная зависимость сечения полного ТИ представляет собой кривую с максимумом, в котором величина сечения почти в два раза превышает значение, получающееся без учета поляризационного члена.

Заметим, что для быстрых заряженных частиц использование приближения Борна–Бете позволяет выразить спектральное сечение полного ТИ на многоэлектронном атоме (без учета интерференционного слагаемого) через динамическую поляризуемость мишени в форме, аналогичной (5.2) [51]:

$$d\sigma(\omega) = \frac{4v_1^2}{3\pi c^3} \frac{d\omega}{\omega} \sigma_{\text{tr}} + \frac{16 d\omega}{3c^3 v_1^2 \omega} |\omega^2 \alpha(\omega)|^2 \ln \left(\frac{\lambda v_1}{R_0 \omega} \right). \quad (5.3)$$

Несмотря на простоту формулы (5.3), ее практическая значимость ограничена (из-за борновского условия) весьма высокими значениями скорости НЧ, так что уже для умеренных зарядов ядра энергии НЧ должны быть, строго говоря, релятивистскими.

Расчеты сечения поляризационного ТИ на многоэлектронных атомах для умеренных и промежуточных значений энергии НЧ сопряжены с большими вычислительными трудностями, в первую очередь потому, что требуют знания обобщенной динамической поляризуе-

мости мишени. Наиболее последовательные квантовомеханические способы вычисления данной величины, как это отмечалось в разделе 2 (см. (2.31)), базируются на использовании приближения случайных фаз с обменом [25]. Такого рода исследование роли поляризационного канала в ТИ в широком спектральном интервале было проведено в [18] на примере столкновения электронов и позитронов с атомом криптона. Базовое выражение для спектрального сечения полного ТИ, полученное в данной работе путем разложения по сферическим гармоникам, имеет вид

$$\begin{aligned} \omega \left(\frac{d\sigma}{d\omega} \right) &= \frac{32\pi^2}{3} \frac{\omega^4}{c^3 v_1^2} \sum_{l_1, l_2} l \left| R_{l_2 l_1}^{\text{st}} - R_{l_2 l_1}^{\text{pol}} \right|^2, \\ R_{l_2 l_1}^{\text{st}} &= \langle v_1 || r || v_2 \rangle, \\ R_{l_1 l_2}^{\text{pol}} &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty q \langle v_2 || j_1(qr) || v_1 \rangle \alpha(\omega, q) dq, \end{aligned} \quad (5.4)$$

здесь $j_1(x)$ — сферическая функция Бесселя, $R_{l_1 l_2}^{\text{st, pol}}$ — радиальные интегралы для статического и поляризационного каналов. Отметим, что выражение (5.4) содержит также и перекрестный член, описывающий межканальную интерференцию. Расчет в работе [18] проводился как в первом борновском приближении, так и в приближении искаженных плоских волн для значений энергии НЧ, равных 1, 5, 10, 25 кэВ. В результате было показано, что роль поляризационного механизма весьма значительна практически во всем диапазоне изменения параметров задачи. В несколько большей степени это имеет место для меньших значений энергии НЧ. Кроме того, оказалось, что использование борновского приближения существенно завышает сечение ТИ в области малых частот и занижает его в области высоких частот по сравнению с результатами, полученными в приближении искаженных плоских волн. Это отличие в основном связано с различием в величине сечений обычного (статического ТИ), поскольку поляризационное ТИ формируется в значительной мере на больших расстояниях от ядра, где искажающее влияние атомного потенциала мало. Спектральная зависимость полученного сечения содержит максимумы, связанные с виртуальным возбуждением атомных электронов в состоянии непрерывного спектра, где вклад поляризационного канала в ТИ максимален. В то же время, как это следует из результатов расчета для ТИ электронов с энергией 25 кэВ, сечение поляризационного ТИ электрона на атоме криптона на всех частотах меньше своего статического аналога. В частности, в вышеупомянутых максимумах отношение сечений составляет примерно 30–50%, что находится в хорошем согласии с соответствующей оценкой для атомов благородных газов, данной в [59]. Вклад интерференции каналов для рассмотренных энергий НЧ оказался незначительным.

5.3. Статистическая модель поляризационного тормозного излучения на многоэлектронных атомах и ионах

Последовательные квантовомеханические расчеты сечения поляризационного ТИ, как правило, весьма сложны и трудоемки, поэтому предпринимались попытки альтернативного полуколичественного описания процесса, основанного на статистических моделях атома и локально-плазменном приближении (Брандта–Лундквиста)

для поляризуемости мишени [60, 61] (см. раздел 2.1 настоящего обзора).

Наиболее просто данный подход можно реализовать для быстрых НЧ в приближении Борна – Бете [61]. В этом случае можно воспользоваться формулой (5.3) для полного спектрального сечения, подставив во второе слагаемое, описывающее поляризационное ТИ, выражение для дипольной поляризуемости в форме (2.9). В результате получается следующее выражение для спектрального сечения в частотном диапазоне $\omega < v_i/R_0$ как функции приведенной частоты $v = \omega/Z$:

$$\begin{aligned} d\sigma^{\text{pol}}(v) &= \frac{16Z^2 b^6}{3v^2 c^3} |v^2 \beta(v)|^2 \frac{dv}{v} \ln \left(\frac{2\gamma v}{va_0(1+v/c) Z^{2/3}} \right) = \\ &= Z^2 d\tilde{\sigma}^{\text{pol}}(v); \end{aligned} \quad (5.5)$$

здесь $b = 0,8853$; $\beta(v)$ — приведенная поляризуемость атома Томаса – Ферми, определенная формулами (2.9), (2.10); $\gamma = (1 - (v/c)^2)^{-1/2}$ — релятивистский фактор. В правой части равенства (5.5) введена функция $d\tilde{\sigma}^{\text{pol}}(v)$, которую естественно назвать приведенным сечением процесса, поскольку для нее в рассматриваемом случае поляризационного ТИ быстрой налетающей частицы имеет место приближенный скейлинг по параметру ω/Z , тогда как зависимость от заряда ядра является логарифмической. Последнее обстоятельство иллюстрируется рис. 7, на котором приведена зависимость R -фактора (отношения сечений поляризационного и статического каналов) от приведенной частоты $v = \omega/Z$. Как видно из этого рисунка, R -фактор для ТИ на томас-фермиевском атоме возрастает с ростом энергии налетающей частицы. Это связано с увеличением поперечных размеров поля релятивистской частицы и, как следствие, с ростом максимального прицельного параметра, при котором в соответствии с законом сохранения энергии-импульса еще возможен процесс на заданной частоте. В то же время максимальный прицельный параметр для статического канала ограничен сверху (в случае нейтральной мишени) размером атома.

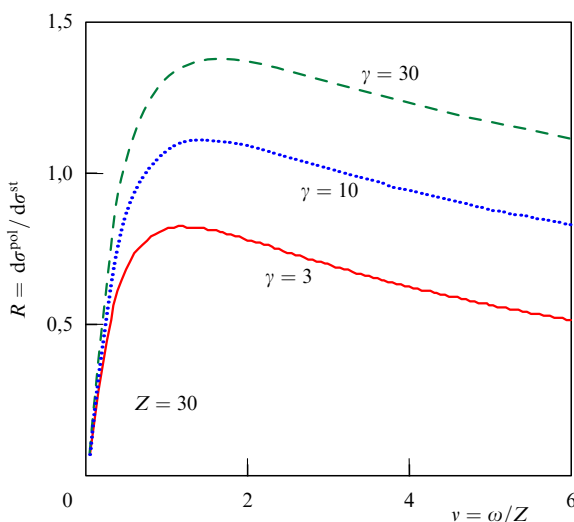


Рис. 7. Зависимость R -фактора от приведенной частоты v , рассчитанная для ТИ быстрого электрона на томас-фермиевском атоме с зарядом ядра $Z = 30$ для различных значений релятивистского фактора $\gamma = 3, 10, 30$.

При анализе поляризационных эффектов в ТИ электронов тепловых энергий на атомах и ионах, соответствующих случаю (2), указанному выше, необходимо принимать во внимание проникновение НЧ в электронный остов мишени, что приводит к относительному уменьшению вклада поляризационного канала и существенно усложняет расчет. Основой для рассмотрения данного вопроса в рамках статистической модели мишени может быть следующее выражение для поляризационного потенциала [60, 62]:

$$V_{\text{pol}}(\mathbf{R}, \omega) = \frac{\mathbf{R}\mathbf{E}(\omega)}{R^3} \int_0^R \alpha(r, \omega) 4\pi r^2 dr, \quad (5.6)$$

где \mathbf{R} — радиус-вектор НЧ; $\mathbf{E}(\omega)$ — напряженность электрического поля, вызывающего поляризацию, на частоте ω ; $\alpha(r, \omega)$ — пространственная плотность поляризуемости мишени, которая в приближении Брандта – Лундквиста дается формулой (2.2). Существенно, что (5.6) описывает недипольный потенциал взаимодействия НЧ с возмущенным ионным остовом, что выражается в наличии в верхнем пределе интегрирования модуля радиус-вектора НЧ. Данное обстоятельство имеет простую электростатическую интерпретацию: рассеивающийся заряд взаимодействует только с частью электронного облака внутри сферы радиуса R . Таким образом учитываются эффекты проникновения НЧ в остов.

С помощью (5.6) может быть получено выражение для полного излучающего дипольного момента системы сталкивающихся частиц:

$$\mathbf{D}_{\text{tot}}(\mathbf{R}, \omega) = \mathbf{R} - \frac{\mathbf{R}}{R^3} \int_0^R \alpha(r, \omega) 4\pi r^2 dr. \quad (5.7)$$

Здесь первое слагаемое относится к статическому каналу ТИ, второе — к поляризационному.

Исследование роли поляризационных эффектов на основе формулы (5.7) может быть проведено как в рамках классического, так и в рамках квантового описания движения НЧ. Классический расчет дает следующую оценку величины R -фактора в ТИ тепловых электронов на ионе КИ для частот порядка начальной энергии электрона:

$$R(\text{КИ}, \omega \approx I_p \approx E) \geq 2. \quad (5.8)$$

Здесь E — начальная энергия налетающего электрона, I_p — потенциал ионизации иона-мишени, который для рассматриваемого иона КИ составляет 1,16 а.е.

Результаты квантового (по движению НЧ) расчета спектрального R -фактора и величины межканальной интерференции с помощью потенциала (5.6) приведены на рис. 8 для двух значений отношения энергии фотона к начальной энергии НЧ (степени неупругости).

Из рисунка 8а следует, что спектральный R -фактор имеет максимум вблизи потенциала ионизации мишени, ширина которого уменьшается с уменьшением степени неупругости процесса (отношения ω/E). В то же время значение R -фактора в максимуме при этом несколько увеличивается и находится в хорошем соответствии с классической оценкой (5.8). Рисунок 8б демонстрирует величину и характер межканальной интерференции как функцию частоты ТИ. В частотном диапазоне $\omega \leq I_p$

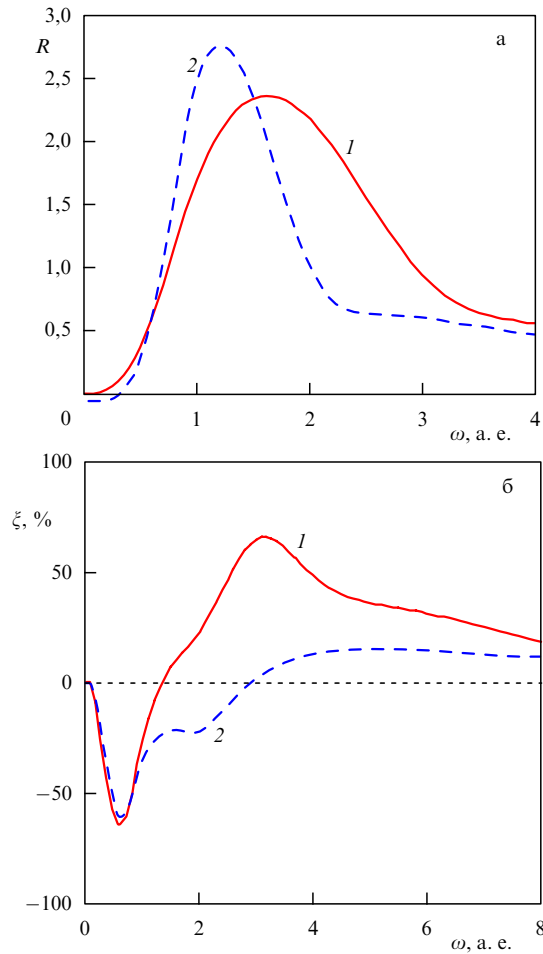


Рис. 8. Результаты квантового (по движению НЧ) расчета спектрального R -фактора (а) и процентного вклада ξ интерференции каналов в интенсивность ТИ (б), проведенного в рамках статистической модели, для двух значений параметра неупругости (кривые 1 — $\omega/E = 0,9$; 2 — $\omega/E = 0,6$) при рассеянии электрона на ионе КII [60].

интерференция носит деструктивный характер (уменьшает полную интенсивность процесса) и значительна по величине. В области $I_p < \omega \leq Z$ интерференционное слагаемое меняет знак и увеличивает полную интенсивность (конструктивная интерференция), оставаясь весьма большой. Межканальная интерференция пренебрежимо мала для низких частот. В высокочастотном диапазоне ее вклад составляет 10–20 %, уменьшаясь с ростом частоты. С уменьшением отношения ω/E роль интерференции падает, так как при этом пространственные области формирования статического и поляризационного каналов слабо перекрываются. Это видно из рис. 8б, откуда также следует, что для менее неупругого процесса частотный диапазон деструктивной интерференции оказывается несколько затянутым в сторону высоких частот. В низкочастотном диапазоне $\omega \leq I_p$ характер и величина межканальной интерференции слабо зависят от степени неупругости процесса.

Эффекты проникновения в остов атома наиболее существенны для горячей плазмы [63–66]. В этих работах учитывался только статический канал ТИ. Сравнение результатов классических и квантовых расчетов для этого канала позволяет сделать вывод о широкой области применимости чисто классического подхода к

проблеме. Физической основой для применения классического подхода является ускорение налетающего электрона в поле притяжения атомного остова, приводящее к тому, что в точке наибольшего сближения, ответственной за основной вклад в излучение, кинетическая энергия электрона намного превышает его начальную энергию. Это обстоятельство служит основой классической теории неупругих процессов — так называемой крамерсовской электродинамики, разработанной В.И. Коганом с сотрудниками [67].

В рамках крамерсовской электродинамики основной вклад в излучение на частоте ω вносят участки траектории, где мгновенная частота вращения налетающего электрона ω_{rot} близка к ω :

$$\omega = \omega_{\text{rot}}(r) = \frac{\sqrt{v_1^2 + 2|U(r)|}}{r}. \quad (5.9)$$

Здесь использована связь угловой скорости вращения НЧ в заданной точке пространства с атомным потенциалом $U(r)$ и начальной скоростью частицы v_1 . Равенство (5.9) определяет характерный радиус $r_{\text{eff}}(\omega, v_1)$, ответственный за излучение данной частоты.

Указанное обстоятельство позволяет получить простую формулу для спектральных потерь энергии по статическому каналу в рамках так называемого вращательного приближения, определяемого условием (5.9) (см. [66, 67]):

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{\text{st}} = \frac{8\pi}{\sqrt{3}c^3v_1} \int_0^\infty (Z_{\text{eff}}(r))^2 \sqrt{1 + \frac{2|U(r)|}{v_1^2}} \times \delta(\omega - \omega_{\text{rot}}(r)) r^{-2} dr, \quad (5.10)$$

где $Z_{\text{eff}}(r) = r^2|dU(r)/dr|$ — эффективный заряд атомного остатка, определяемый степенью проникновения электрона в атомный остов.

То же самое вращательное приближение можно использовать для оценки величины спектральных потерь энергии по поляризационному каналу, если ввести эффективный поляризационный заряд, определяющий ПТИ, согласно формуле

$$N_{\text{pol}}(r, \omega) = \omega^2 \left| \int_0^r \alpha(r', \omega) 4\pi r'^2 dr' \right|; \quad (5.11)$$

здесь $\alpha(r, \omega)$ — пространственная плотность динамической поляризуемости мишени.

Тогда интенсивность ПТИ в полной аналогии с интенсивностью СТИ запишется в виде

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{\text{pol}} = \frac{8\pi}{\sqrt{3}c^3v_1} \int_0^\infty (N_{\text{pol}}(r, \omega))^2 \sqrt{1 + \frac{2|U(r)|}{v_1^2}} \times \delta(\omega - \omega_{\text{rot}}(r)) r^{-2} dr. \quad (5.12)$$

Из сравнения (5.10) и (5.12) легко выразить отношение R -интенсивностей излучения по поляризационному и статическому каналам в виде универсального отношения эффективного поляризационного заряда и эффективного заряда атомного остатка:

$$R(\omega, v_1) = \left[\frac{N_{\text{pol}}(r, \omega)}{Z_{\text{eff}}(r)} \right]_{r=r_{\text{eff}}(\omega, v_1)}^2. \quad (5.13)$$

Легко видеть, что в рамках статистической модели R -фактор является функционалом от атомной плотности. Сравнение этой формулы с классической оценкой (1.7), полученной в рамках дипольного приближения, показывает, что учет деталей проникновения электрона в остов иона, связанный с учетом недипольности взаимодействия, приводит к уточнению эффективных зарядов.

Классическое вращательное приближение обладает достаточно высокой точностью, как это следует из сравнения классических и квантовых расчетов на рис. 9. Видно, что статический канал описывается с весьма высокой точностью. Что касается поляризационного канала, то точность его описания также удовлетворительна в среднем, за исключением области частот, отвечающих ионизации атомных подоболочек.

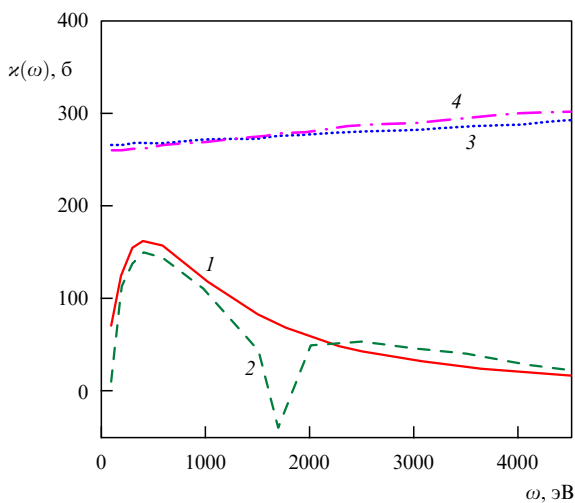


Рис. 9. Спектральная интенсивность тормозного излучения электрона с энергией 5 кэВ на атоме криптона по различным каналам: 1 — поляризационный канал (классическая модель); 2 — поляризационный канал с учетом вклада интерференции (расчет в приближении случайных фаз с обменом [18]); 3 — вклад статического канала (классическая модель); 4 — вклад статического канала [18].

Таким образом, классический и квантовый анализ роли поляризационных эффектов в ТИ тепловых электронов, проведенный на основе статистической модели, свидетельствует, во-первых, о существенности поляризационных эффектов и необходимости их учета в основных излучательных явлениях в плазме (таких, как, например, потери энергии на излучение), а во-вторых, о достаточно высокой надежности классических моделей.

6. Связь поляризационного излучения с переходным излучением и комптоновским рассеянием. Поляризационное излучение релятивистских частиц в твердом теле

6.1. Поляризационное тормозное и переходное излучение

Общая теория переходного излучения изложена в известной монографии В.Л. Гинзбурга и В.Н. Цытовича [68]. Применительно к плазме переходное ТИ поперечных электромагнитных волн быстрыми элект-

ронами впервые исследовалось в работах [69, 70] методами классической электродинамики практически одновременно с началом систематического изучения поляризационного канала в ТИ на атомах [23, 48, 49, 51]. Заметим, что переходное ТИ продольных волн в плазме рассматривалось в работе [71], где были получены общие уравнения, описывающие взаимодействие плазменных частиц с фотонами и между собой. На первоначальном этапе исследования переходного ТИ в плазме и ПТИ на атоме велись независимо друг от друга, так что даже не вполне ясно было соответствие между ними. Только спустя 10 лет в диссертации [72] было показано, что переходное ТИ есть не что иное, как ПТИ на дебаевской сфере вокруг иона в плазме, и был дан квантовомеханический вывод формулы для сечения переходного ТИ с использованием формализма динамического формфактора плазменных компонент. Переходное ТИ тепловых электронов рассчитывалось в недавней работе [73] с использованием методов крамеровской электродинамики [67].

Переходное ТИ можно интерпретировать как рассеяние собственного поля сталкивающихся заряженных частиц на флуктуациях диэлектрической проницаемости плазмы. В отличие от переходного излучения в случае переходного ТИ изменение диэлектрической проницаемости среды вызвано не наличием границы раздела, а дебаевской экранировкой зарядов в плазме, приводящей к возникновению флуктуации электронной плотности — дебаевской шубы вокруг плазменных частиц. Таким образом, ионы в плазме могут быть уподоблены своеобразным атомам, в которых роль внешней электронной оболочки играет дебаевская шуба. Соответственно можно провести аналогию между ПТИ на атомном электронном остове и переходным ТИ на дебаевской шубе плазменного иона. Существенная разница между ними заключается в том, что дебаевская шуба формируется свободными электронами, поэтому ее поляризуемость отличается, естественно, от поляризуемости атома. Однако можно показать, что высокочастотный (для $\omega \gg I$, I — потенциал ионизации атома) предел обобщенной атомной поляризуемости $\alpha^{\text{hf}}(\omega, q)$ совпадает с обобщенной поляризуемостью дебаевской шубы $\alpha_{\text{D}}(\omega, q)$, связанной с эффективным излучающим зарядом соотношением $n_{\text{D}}(\omega, q) = \omega^2 |\alpha_{\text{D}}(\omega, q)|$.

Таким образом, между переходным ТИ на дебаевской сфере в плазме и "упругим" ПТИ на атоме в высокочастотном диапазоне так же, как между комптоновским ТИ [70] в плазме и "неупругим" ПТИ на атоме, существует однозначное соответствие, если произвести замены $r_{\text{D}} \rightarrow R_{\text{a}}$, $Z_i \rightarrow N_{\text{e}}$, что наглядно демонстрирует единую физическую природу этих явлений.

6.2. Некогерентное поляризационное тормозное излучение. Связь с комптоновским рассеянием

В спектральном диапазоне $\omega > v_i/R_0$ минимальный переданный от НЧ импульс становится больше характерного импульса связанных электронов, и поляризационное ТИ идет в основном с ионизацией атома [74]. Исключением является область малых углов излучения $\vartheta \leq \sqrt{v_i/(\omega R_0)}$ и релятивистских НЧ в частотном интервале $v_i/R_0 < \omega < \gamma^2 v_i/R_0$, когда существенна компенсация переданного мишени импульса за счет импульса фотона [61]. Однако в этом последнем случае спектральное сечение процесса без возбуждения (ионизации)

мишени, просуммированное по всем углам излучения, подавлено множителем $(v_i/(\omega R_0))^2$ [74].

Таким образом, для достаточно высоких частот $\omega > v_i/R_0$ ТИ по поляризационному каналу идет с выбиванием атомного электрона, принимающего на себя избыток энергии-импульса. В этом случае НЧ в ходе элементарного излучательного акта взаимодействует с каждым из атомных электронов независимо, и процесс становится некогерентным. Сечение некогерентного ПТИ пропорционально первой степени числа электронов мишени, в отличие от сечения когерентного ПТИ, пропорционального квадрату числа атомных электронов.

Описание поляризационного механизма ТИ в высокочастотном диапазоне $\omega > v_i/R_0$ упрощается, поскольку для динамической поляризуемости атома можно использовать плазменную формулу с учетом недипольности взаимодействия НЧ с электронным остовом мишени:

$$\alpha(\omega, \mathbf{q}) = -\frac{n(\mathbf{q})}{\omega^2}, \quad (6.1)$$

где $n(\mathbf{q})$ — пространственный фурье-образ электронной плотности мишени. Тогда сечение ПТИ оказывается пропорциональным динамическому формфактору атома [74], который в рассматриваемом частотном диапазоне разбивается на сумму динамических формфакторов электронных подболочек:

$$S(q^0, \mathbf{q}) = \sum_{n,l} S_{nl}(q^0, \mathbf{q}); \quad (6.2)$$

здесь $q = \{q^0, \mathbf{q}\}$ — переданный мишени четыре-импульс. Формула (6.2) является математическим выражением некогерентности ПТИ по вкладу различных электронных подболочек атома-мишени.

Пользуясь физической аналогией между некогерентным ПТИ и комптоновским рассеянием рентгеновских лучей, сечение процесса можно выразить через комптоновский профиль атома [75], учитывающий связь атомных электронов с ядром. Комптоновский профиль атома представляет собой сумму комптоновских профилей электронных подболочек, определяемых с помощью выражения

$$J_{nl}(Q) = \frac{1}{2} \int_Q^\infty |R_{nl}(p)|^2 p dp, \quad (6.3)$$

где $R_{nl}(p)$ — пространственный фурье-образ радиальной волновой функции nl -состояния. Отметим, что функции (6.3) рассчитаны для всех элементов периодической системы [75].

Выражение для спектрального сечения некогерентного ПТИ в импульсном приближении через комптоновский профиль мишени имеет вид [76]

$$d\sigma_{\text{pol}}^{\text{neoh}}(\omega) = \frac{8}{3\pi} \frac{Z_p^2}{c^3 v_i} \frac{d\omega}{\omega} \int J\left(\frac{\mathbf{q}^2/2 - q^0}{|\mathbf{q}|}\right) \frac{d\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|}, \quad (6.4)$$

где Z_p — заряд НЧ.

Результаты расчета с помощью формулы (6.4) интенсивности некогерентного ПТИ протона на атоме криптона в зависимости от скорости НЧ для трех значений энергии тормозного фотона представлены на рис. 10. Из

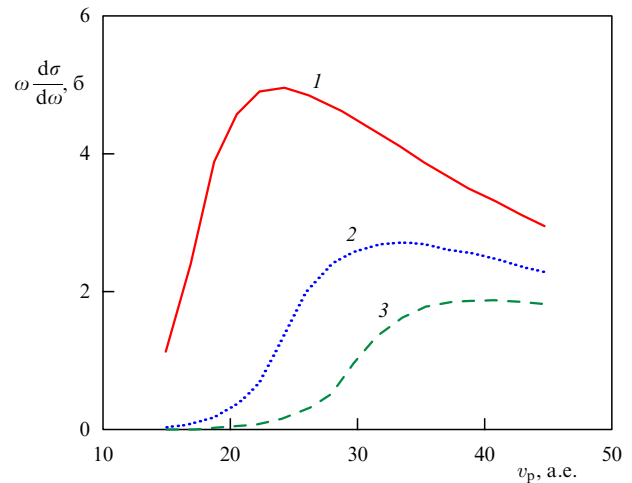


Рис. 10. Некогерентное ПТИ протона на атоме криптона как функция скорости протона для трех значений энергии тормозного фотона: $\hbar\omega = 3,78$ кэВ (кривая 1); $\hbar\omega = 7,57$ кэВ (кривая 2); $\hbar\omega = 11,35$ кэВ (кривая 3) [76].

этого рисунка, в частности, следует, что скоростные зависимости интенсивности обладают максимумами, смещающимися в область более высоких скоростей с ростом энергии тормозного фотона. Соответствующая формула, связывающая частоту тормозного фотона и оптимальное значение скорости протона v_{opt} , в атомных единицах имеет вид

$$v_{\text{opt}} = 1,89\sqrt{\omega}. \quad (6.5)$$

Существенно, что соотношение (6.5) не зависит от заряда атомного ядра, в отличие от аналогичной формулы для когерентного ПТИ, когда имеет место линейная связь между оптимальной скоростью и излучаемой частотой [77] через радиус атомной подболочки, дающей наибольший вклад в процесс.

В [76] было проведено сравнение спектральных сечений когерентного и некогерентного ПТИ протона на атоме. Было показано, что доминирование некогерентного процесса над когерентным может иметь место при достаточно больших скоростях налетающей частицы. В этом случае "частота отсечки" некогерентного ПТИ $\omega_c = \mu v_i^2/2$ (μ — приведенная масса электрона и НЧ) смещается в область высоких частот, где вклад большинства атомных электронов в когерентное ПТИ уже мал. Отметим, что корректный учет некогерентного ПТИ важен для интерпретации экспериментальных данных по излучению тяжелых частиц на атомарных и макроскопических мишенях.

6.3. Интерференционно-поляризационные эффекты при излучении релятивистских частиц в среде

При обычном (статическом) ТИ релятивистских частиц в среде возникают, как известно (см., например, [78]), интерференционные эффекты, обусловленные квадратичным ростом с энергией длины формирования излучения $L \approx \gamma^2 \lambda$ (γ — релятивистский фактор, λ — длина волны). Когда длина формирования превышает среднее межчастичное расстояние, на вероятность элементарного излучательного акта начинают влиять процессы рассеяния как самого электрона (эффект Ландау–Поме-

ранчука), так и фотона (эффект плотности) на частицах среды. Кроме того, в кристаллах возможны коллективные эффекты, связанные с захватом излучающей частицы в режим каналирования и передачей избытка импульса всей решетке в целом (когерентное ТИ). Имеют место также интерференционные эффекты, связанные с наличием границ у образца.

В случае поляризационного канала излучение фотона происходит в результате рассеяния собственного поля НЧ в реальный фотон на нерелятивистских связанных электронах. Поэтому влияние среды на поляризационный механизм релятивистских частиц, как правило, более слабое. Последнее обстоятельство наглядно демонстрируется в случае ТИ в плазме. Тогда статический канал оказывается подавленным в низкочастотном диапазоне $\omega < \gamma\omega_{pe}$ (ω_{pe} — электронная плазменная частота) вследствие уменьшения длины формирования процесса за счет роста фазовой скорости света в плазме — эффект плотности Тер-Микаеляна [78]. В то же время увеличение фазовой скорости электромагнитного излучения практически не оказывает влияния на сечение поляризационного ТИ, которое в частично ионизированной плазме может происходить как на дебаевской сфере (переходное ТИ) [69, 70], так и на связанных электронах ионов [79]. Влияние среды здесь сводится к экранировке собственного поля НЧ, что приводит к изменению подлогарифмического множителя в сечении. В результате прекращается логарифмическое возрастание сечения поляризационного ТИ для частот $\omega < \gamma\omega_{pe}$ с ростом энергии НЧ, имевшее место для процесса на изолированном атоме (см. формулу (5.5)). Таким образом, влияние среды на поляризационный канал ТИ релятивистских частиц в плазме оказывается существенно более слабым, чем в случае обычного ТИ.

Ситуация, однако, меняется для поляризационного ТИ релятивистских частиц в аморфной конденсированной среде. Тогда, как это впервые было показано в [80], имеет место эффект сильного подавления поляризационного канала, вызванный деструктивной интерференцией вкладов хаотически расположенных атомов в сечение процесса. Этот эффект по своей природе аналогичен известному эффекту уменьшения сечения рассеяния рентгеновских лучей в конденсированной среде в низкочастотном диапазоне [81]. Действительно, как об этом уже говорилось, поляризационное ТИ можно интерпретировать (в духе принципа эквивалентных фотонов Ферми) как рассеяние собственного поля НЧ в реальный фотон на электронах мишени, поэтому характерные особенности данного рассеяния будут отражаться и в дифференциальном сечении ПТИ (эффект среды). После усреднения вкладов различных атомов в сечении возникает следующий дополнительный множитель [80]:

$$M(\mathbf{q}_1) = 1 - \sigma \frac{3j_1(x)}{x}, \quad \sigma = \frac{4\pi n_0 R_0^3}{3}, \quad x = |\mathbf{q}_1|R_0, \quad (6.6)$$

где $j_1(x)$ — сферическая функция Бесселя, \mathbf{q}_1 — переданный среде импульс, n_0 — концентрация атомов среды, R_0 — средний размер атома. Из (6.6) видно, что рассматриваемая деструктивная интерференция существует только для достаточно плотной среды, когда параметр σ порядка единицы. Кроме того, должно

выполняться неравенство $x < 1$, что накладывает ограничение на частоту тормозных фотонов. Проведенный в [80] анализ показал, что максимальная частота ω_h , ограничивающая сверху проявление эффекта плотности в ПТИ, зависит также от отношения радиуса экранировки (радиуса Томаса–Ферми в статистической модели) к размеру атома: для нулевого угла излучения с уменьшением этого отношения максимальная частота ω_h возрастает, в обратном случае $\omega_h \rightarrow c/R_0$.

В периодической среде наряду с парными столкновениями возможна также передача избытка импульса от НЧ в ходе излучения фотона кристаллической решетке в целом (когерентное ПТИ), причем роль данного процесса для поляризационного канала оказывается даже более существенной, чем для обычного (статического канала) [82]. Дело в том, что когерентное ТИ реализуется для достаточно малых переданных импульсов, меньших обратной величины тепловой флуктуации положения атомов u_i : $|\mathbf{q}_1| < u_i^{-1}$ [78]. Поляризационный механизм существен тоже для малых q_1 : $|\mathbf{q}_1| < R_0^{-1}$. Поскольку $u_i \ll R_0$, то необходимое условие для поляризационного когерентного ТИ с запасом выполняется. Можно сказать, что в частотном диапазоне $\omega < c/u_i$ поляризационное ТИ идет в основном с передачей импульса всей решетке в целом, и только для достаточно высоких частот $\omega > c/u_i$ доминирует некогерентное ПТИ. То же самое имеет место и для ПТИ в поликристаллах [82].

7. Поляризационная рекомбинация

7.1. Классическая теория поляризационной рекомбинации электрона на томас-фермиевском ионе

Поляризационная рекомбинация является новым каналом рекомбинации свободных электронов на сложных ионах [2]. Он является естественным продолжением поляризационных свободно-свободных переходов на случай отрицательных энергий электрона в конечном состоянии. В рамках классического приближения такое продолжение получается прямой подстановкой отрицательных энергий в общие формулы для интенсивности поляризационного излучения.

Из общих подходов к описанию ПИ, изложенных выше, ясно, что поляризационная рекомбинация является обобщением известной диэлектронной рекомбинации на нерезонансный случай, когда энергия начального электрона достаточно далека от положения дважды возбужденного (автоионизационного) атомного уровня. Естественно ожидать, что вклад поляризационной рекомбинации в общий коэффициент рекомбинации электрона на ионе может быть замечен лишь при достаточно выделенной (селективной) энергии начального электрона. Именно такая ситуация характерна для относительных энергий электрона в накопительных кольцах. Поэтому хотя бы часть наблюдаемых здесь расхождений в полных скоростях рекомбинации [83] для ионов с достаточно сложным электронным остовом может быть отнесена на счет поляризационной рекомбинации (подробнее см. ниже).

Для расчета сечений поляризационной рекомбинации воспользуемся общими результатами (1.6) для отношения $R(\omega)$ спектральных интенсивностей (или соответ-

вующих эффективных сечений $d\sigma/d\omega$ поляризационного и обычного излучений, а также плазменной статистической моделью атома (иона) [84], в которой динамическая поляризуемость выражается в виде, аналогичном (2.9):

$$\alpha(\omega) = (X r_{TF})^3 \beta \left(\frac{\omega}{Z} \right), \quad (7.1)$$

где X — безразмерный радиус иона, определяемый степенью ионизации $Q = Z_i/Z$.

С учетом (7.1) запишем отношение $R(\omega)$ в виде

$$R(\omega) = (0,885X)^6 v^4 |\beta(v)|^2 \left(\frac{Z}{Z_{\text{eff}}} \right)^2, \quad (7.2)$$

где $v = \omega/Z$ а.е. Таким образом, для определения $R(\omega)$ необходимо знать $Z_{\text{eff}}(\omega)$, X и v .

Применим общие положения поляризационного излучения к специальному случаю поляризационной рекомбинации, когда электрон с начальной энергией E захватывается ионом на дискретный уровень n с энергией E_n вследствие поляризационного излучения остова иона. При этом отношение $R(\omega)$ поляризационного (ПР) и стандартного (радиационного, РР) каналов рекомбинации определяется общим выражением (7.2).

Значения $Z_{\text{eff}}(\omega)$ и v зависят от начальной энергии электрона E , энергии захваченного электрона E_n и приведенной частоты $v \equiv \omega/Z = (E + |E_n|)/Z$. Из определения v ясно, что процесс рекомбинации возможен для значений v , заключенных между v_{max} и v_{min} :

$$v_{\text{max}} = \frac{E + |I_i|}{Z}, \quad v_{\text{min}} = \frac{E}{Z}, \quad (7.3)$$

где I_i — потенциал ионизации иона.

Отношение $R(\omega)$ имеет простой аналитический вид в двух предельных случаях: $\omega \rightarrow 0$ (в статическом) и $\omega \rightarrow \infty$ (в высокочастотном).

Полагая $|\beta(v)|^2 \approx 1$, для $v \rightarrow 0$ легко получить из (7.2)

$$R(\omega) \approx (0,885X)^6 v^4 \left(\frac{Z}{Z_i} \right)^2, \quad (7.4)$$

где мы положили $Z_{\text{eff}} \approx Z_i$ для $\omega \rightarrow 0$.

В противоположном случае $\omega \rightarrow \infty$ динамическая поляризуемость $\alpha(\omega)$ определяется поляризацией свободных электронов остова:

$$-\omega^2 \alpha(\omega) \rightarrow N = Z(1 - Q), \quad (7.5)$$

где N — число связанных электронов ($N = Z - Z_i$). Итак, в этой области электронных энергий мы имеем

$$R(\omega) = \left[\frac{2N}{Z + Z_i} \right]^2 = 4 \left[\frac{1 - Q}{1 + Q} \right]^2, \quad (7.6)$$

где мы положили $Z_{\text{eff}} = (Z + Z_i)/2$, что является в широком диапазоне энергий электронов хорошим приближением в соответствии с расчетами, проведенными в [85].

Определим граничное значение v_X^* из условия равенства $\alpha(\omega)$ для предельных значений $\omega \rightarrow 0$ и $\omega \rightarrow \infty$. Полагая $\alpha(0) = (X r_{TF})^3$ для $\omega \rightarrow 0$ и $|\alpha(\omega)| = N/\omega^2 = Z(1 - Q)/\omega^2$ для $\omega \rightarrow \infty$, получим величину v_X^* в виде

$$v_X^* = \frac{\sqrt{1 - Q}}{(0,885X)^{3/2}} \approx \frac{\sqrt{1,5(1 - Q)}}{X^{3/2}}. \quad (7.7)$$

Оценка отношения $R(\omega)$ (7.4) для иона урана U^{+28} в случае промежуточной области частот дает множитель порядка 3–4. Фактически атомарная поляризуемость в модели [84] завышена, так что спектральный вклад поляризационной рекомбинации оказывается примерно в 1,5 раза выше, чем вклад обычной радиационной рекомбинации. В этом смысле ситуация аналогична поляризационному тормозному излучению. Возможно, что именно это увеличение рекомбинационного канала ответственно за часть аномально большого коэффициента рекомбинации этого иона, наблюдаемого в накопительных кольцах [83].

Суммарная скорость рекомбинации вычисляется путем интегрирования соответствующего дифференциального сечения рекомбинации по частоте от v_{min} до v_{max} .

Вычислим отношение R^{tot} суммарных рекомбинационных скоростей поляризационного и обычного каналов. Для простоты используем для расчета суммарной скорости обычной радиационной рекомбинации приближение Крамерса:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{16\pi Z^2 g(\omega)}{3\sqrt{3}\omega c^3 v^2} \quad (7.8)$$

(ниже положим фактор Гаунта равным единице: $g(\omega) = 1$).

Для получения отношения суммарных скоростей рекомбинаций необходимо умножить и числитель, и знаменатель (7.2) на спектральное распределение излучения и проинтегрировать их по частоте в пределах от v_{min} до v_{max} . В рамках крамерсовского приближения эта процедура даст отношение суммарных скоростей рекомбинаций в виде

$$R^{\text{tot}} = Z^2 (0,885X)^6 \frac{\int_{v_{\text{min}}}^{v_{\text{max}}} v^3 |\beta(v)|^2 dv}{\int_{v_{\text{min}}}^{v_{\text{max}}} (Z_{\text{eff}}^2(v)/v) dv}. \quad (7.9)$$

Итак, из (7.3)–(7.9) следует, что R^{tot} определяется двумя факторами:

1) степенью ионизации иона Q ;

2) величинами v_{max} и v_{min} , которые зависят от соотношения между излучаемой частотой (через потенциал ионизации иона и энергию частицы) и частотой, ответственной за поляризуемость остова ($\omega/Z \approx 1 - 2$ эВ).

Приведем данные расчета R^{tot} для случая медленных электронов, излучающих на ионах урана ($Z = 92$) в двух случаях:

1) $Q = 0,3$ ($Z_i = 30$), $X = 5$;

2) $Q = 0,1$ ($Z_i = 9$), $X = 10$.

В первом случае мы получаем $R^{\text{tot}}(0,3;92) \approx 1$, в то время как во втором случае мы имеем $R^{\text{tot}}(0,1;92) \approx 10$.

Рассмотрение, проведенное выше, показывает существование вклада поляризационной рекомбинации в общую скорость рекомбинации свободных электронов на сложных ионах. Этот вклад наиболее значителен для тяжелых ионов ($Z \gg 1$), низкой степени ионизации ($Q = Z_i/Z \ll 1$), а также низкой ($E \ll I_i$) и промежуточной ($E = I_i$) энергии электрона. Необходимы прямые способы измерения поляризационной рекомбинации, которые наиболее представительны в установках типа накопительных колец.

Интересным новым объектом для проявления поляризационных эффектов в рекомбинации является радиационный захват электрона при столкновениях с металлическими кластерами [86]. Величина отношения поля-

ризационного и статического каналов определяется интегралом по переданным импульсам от обобщенной поляризуемости:

$$R = \left| \frac{2}{3\pi} \int_0^\infty q^2 \alpha(\omega, q) dq \right|^2, \quad (7.10)$$

и может быть по порядку величины оценена как отношение динамической поляризуемости к кубу атомного радиуса орбиты захваченного электрона. Величина поляризуемости кластеров резко возрастает вблизи гигантского резонанса в определенной области частот. Здесь вклад поляризационного канала может на 2–3 порядка величины превышать вклад статического канала [86].

7.2. Квантовые расчеты и сравнение различных вкладов в полное сечение рекомбинации

Разделение рекомбинационных вкладов на различные каналы не является обязательным. Действительно, в свете концепции М. Борна, обсуждавшейся во введении, можно рассматривать взаимодействующую пару "рекомбинирующий электрон + ион" как единую композитную систему, излучающую квант и оказывающуюся в конечном состоянии с захваченным электроном. При этом совершенно неважно, какой частицей — налетающим электроном или электронами ионного остова — испускается этот квант. В таком подходе процессы радиационной рекомбинации, поляризационной рекомбинации и диэлектронной рекомбинации неразличимы. Трудности такого подхода связаны с корректным расчетом полной волновой функции системы взаимодействующих частиц, которая должна использоваться при расчете взаимодействия этой системы с излучением. Ясно, что при достаточно сложной структуре остова такие расчеты представляют собой весьма трудоемкую численную процедуру. В таком случае не приходится рассчитывать на получение простых универсальных закономерностей, как это было в статистической модели атома. Более того, заранее не очевидно, достаточно ли большое и представительное количество электронных конфигураций выбрано для расчета. Тем не менее в настоящее время проведены весьма точные расчеты скоростей рекомбинации для слабоионизованных ионов железа в рамках так называемого "железного проекта".

На рисунке 11 представлены результаты расчетов скорости рекомбинации электрона на ионе железа FeIII, выполненные в работе [87] в рамках указанной выше общей схемы. Представлены также предшествующие результаты для диэлектронной рекомбинации. Видно, что данные [87] существенно расходятся с данными работы [88], что обусловлено отмечавшейся выше неполнотой выбора системы волновых функций. Далее, на графике приведены результаты расчета диэлектронной и радиационной рекомбинации. Первая из них преобладает в области высоких температур (когда экспоненциальные факторы, входящие в формулы для ее вероятности, несущественны), тогда как вторая — в области низких температур. Видно, однако, что полная скорость рекомбинации не соответствует их простой сумме, особенно в области промежуточных температур, когда диэлектронная рекомбинация уже сильно падает, а вклад радиационной рекомбинации еще не слишком велик. Эта картина весьма близка к результатам расче-

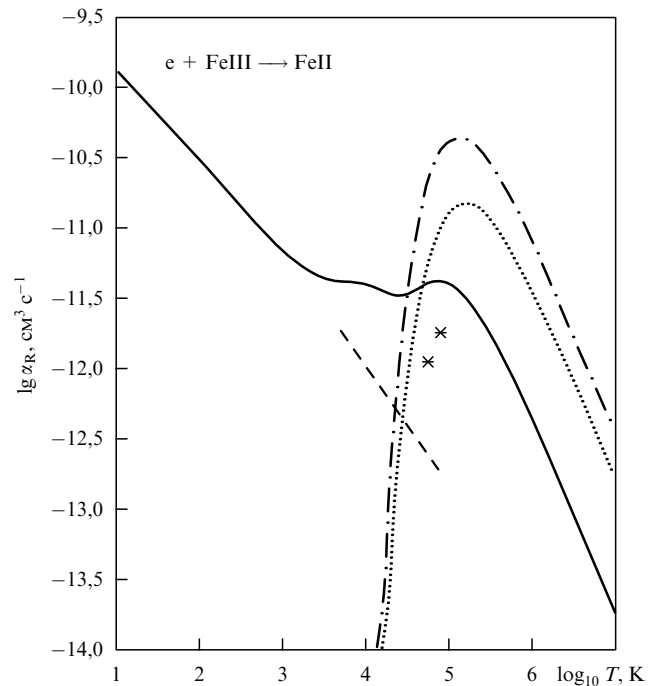


Рис. 11. Скорость рекомбинации $\alpha_R(T)$ (сплошная кривая) для FeIII, рассчитанная в [87], штриховая линия соответствует скорости радиационной рекомбинации, штрихпунктирная кривая — скорости диэлектронной рекомбинации [88], звездочки — скорости диэлектронной рекомбинации [89], пунктирная кривая соответствует диэлектронной рекомбинации из работы [90].

тов поляризационного тормозного излучения для ионов калия, представленных на рис. 12 [62]. Здесь, как и для случая ионов железа, вклад поляризационной рекомбинации заметен именно в отмеченной промежуточной области температур. Конечно, такая интерпретация в рамках общей схемы расчета представляется достаточно условной. Тем не менее ее использование позволяет качественно понять поведение полного сечения рекомбинации сложных ионов.

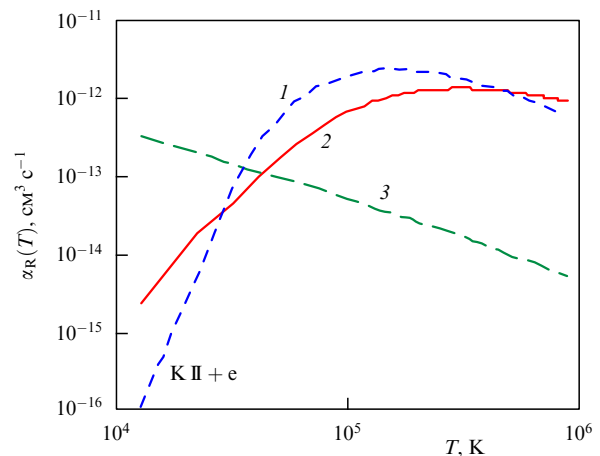


Рис. 12. Температурная зависимость скоростей рекомбинации электрона на однозарядном ионе калия для различных каналов, рассчитанная в [62]: диэлектронная (кривая 1); поляризационная (2); радиационная (3).

8. Многоквантовые и интерференционные эффекты в поляризованном тормозном излучении

8.1. Многофотонное поляризованное тормозное излучение и поглощение

Многофотонные процессы, как правило, имеют заметную вероятность в достаточно интенсивном внешнем поле. Данный вопрос приобрел особую актуальность в связи с развитием лазерной техники, позволяющей получать электромагнитные импульсы высокой мощности, в которых напряженность электрического поля порядка или даже выше атомной.

Многофотонное ТИ на кулоновском центре (в отсутствие поляризованного канала) для быстрых электронов впервые рассчитывалось в [91]. В борновском приближении по налетающему электрону было получено следующее известное выражение для сечения n -фотонного процесса:

$$d\sigma_n^{\text{st. Born}}(\Omega) = J_n(\mathbf{a}\mathbf{q}) d\sigma^{\text{Coul}}(\Omega); \quad (8.1)$$

здесь J_n — функция Бесселя n -го порядка; $\mathbf{a} = \mathbf{E}_0/\omega^2$ — амплитуда колебания электрона в лазерном поле частоты ω и амплитуды \mathbf{E}_0 ; \mathbf{q} — изменение импульса электрона при неупругом рассеянии в телесный угол Ω ; $d\sigma^{\text{Coul}}(\Omega)$ — кулоновское сечение рассеяния. В противоположном случае квазиклассического движения электрона в [92] получено аналогичное по структуре выражение, в котором величина \mathbf{q} заменена на произведение $\omega \mathbf{v}_\omega$, где \mathbf{v}_ω — фурье-компонента классической траектории НЧ в поле кулоновского центра.

Многофотонный тормозной эффект быстрых электронов на атоме в сильном электромагнитном поле с учетом поляризованного канала был впервые рассмотрен в работе [51] в рамках первого борновского приближения. Соответствующее выражение для дифференциального сечения s -фотонного процесса имеет вид (в а.е.)

$$d\sigma^s(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{4}{q^4} \frac{p'}{p} \left| J_s(\rho) [Z - F(\mathbf{q})] - \frac{1}{2} \rho \omega^2 \alpha(\omega) [J_{s-1}(\rho) - J_{s+1}(\rho)] \right|^2 d\Omega_{p'}; \quad (8.2)$$

здесь $\rho = \mathbf{q}\mathbf{E}_0/\omega^2$, $F(\mathbf{q})$ — атомный формфактор. Первое слагаемое под знаком модуля описывает вклад статического канала, оно совпадает с (8.1). Второе слагаемое представляет собой вклад в процесс, обусловленный поляризацией мишени, т.е. связано с поляризованным каналом.

Для $|s| \geq 2$ формула (8.2) становится, вообще говоря, неточной, так как не учитывает более высоких, чем первый, порядков взаимодействия атомных электронов с внешним электромагнитным полем [51]. Результат (8.2) описывает излучение (поглощение) по поляризованному каналу только одного фотона, остальные фотоны "поставляются" через статический канал. Поэтому, строго говоря, второе слагаемое под знаком модуля в формуле (8.2) в случае $|s| \geq 2$ является интерференционным, т.е. описывает межканальную интерференцию.

Более высокие порядки взаимодействия атома с внешним электромагнитным полем приводят к появлению зависимости сечения от нелинейной поляризуемости атома. Для дифференциального сечения вынужден-

ного тормозного эффекта с учетом поляризации мишени получается выражение [93]

$$\frac{d\sigma^{(s)}}{d\Omega_{p'}} = \frac{4p'}{pq^4} \left| \sum_{n+m=s} [-Z\delta_{n0} + F_n(\mathbf{q})] J_m(\rho) \right|^2. \quad (8.3)$$

Здесь Z — заряд ядра; $F_n(\mathbf{q}) = \int n_n(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ — формфактор гармоник колебаний электронной плотности атома, который может быть выражен через поляризуемость атома n -го порядка. Формула (8.3) описывает испускание n -фотонов по поляризованному каналу и m -фотонов — по статическому, включая все перекрестные члены. Однако в силу разной зависимости от величины переданного импульса (в данном случае — ТИ на нейтральном атоме) статические и поляризованные амплитуды слабо интерферируют, поэтому после интегрирования по углу рассеяния НЧ сечение процесса разбивается на сумму двух слагаемых: одно из них статическое, а другое — "чисто" поляризованное. Статическое слагаемое описывается формулой (8.1), а поляризованное дается выражением [93]

$$\sigma_{\text{PB}}^s = \frac{4\pi P_s^2 \sin^2 \gamma}{p^2} \ln \left(\frac{p_a}{|p - p'|} \right), \quad \mathbf{P}_s = \hat{\chi}^s \mathbf{E}_0^s; \quad (8.4)$$

здесь введен тензор нелинейной восприимчивости $\hat{\chi}^s$, γ — угол между вектором начального импульса электрона и вектором поля.

Формулы (8.3), (8.4) были использованы в [93] для расчета спектрального сечения двухфотонного тормозного эффекта электрона с энергией 100 эВ на атоме ксенона вблизи резонансного перехода $5p^6 \text{ } ^1S_0 - 6p$ (резонансная длина волны $\lambda_0 = 126$ нм). В этом случае только один фотон испускается по поляризованному каналу, так как восприимчивость четного порядка для свободного атома равна нулю. Из сравнения полученной спектральной зависимости с сечением, учитывающим только статический канал, следует, что поляризованные эффекты, внося основной вклад вблизи резонансной частоты, весьма заметны и при больших отстройках (порядка 10 %).

Формула (8.3) корректно учитывает поляризованные эффекты в многофотонном ТИ, если взаимодействие внешнего электромагнитного поля с атомом-мишенью является слабым. Тогда справедливо описание данного взаимодействия по теории возмущений, что и приводит к представлению сечения процесса через нелинейную восприимчивость атома. В случае сильного взаимодействия атома с излучением, например, для околорезонансного ТИ, выражение (8.3) может оказаться недостаточным.

Многофотонный тормозной эффект в сильном околорезонансном лазерном поле с учетом эффектов поляризации мишени вне рамок применимости формулы (8.3) изучался в [94] с помощью метода заданного квантового/классического тока [95]. Было получено универсальное аналитическое описание многофотонного вынужденного тормозного излучения, включая статический и поляризованный каналы. Существенным ограничением подхода [94] является дипольное приближение по взаимодействию между НЧ и электронным остовом мишени. Отметим, что точность этого приближения возрастает с ростом степени ионизации мишени.

Для описания поляризованного вынужденного ТИ метод эквивалентных фотонов Ферми и метод крамеровской электродинамики [66, 67] были обобщены на многофотонные процессы [94].

Выражение для вероятности s -фотонного процесса, учитывающее оба канала, при заданном рассеянии электрона имеет вид [94]

$$W_{\Sigma}(s) = J_s^2 \{ \rho |1 - \delta| \}, \quad (8.5)$$

где, как и ранее, $\rho = \mathbf{q} \mathbf{E}_0 / \omega^2$, а величина

$$\delta = \frac{\omega^2 \alpha(\omega, \mathbf{E}_0)}{Z_i} \quad (8.6)$$

представляет собой отношение амплитуд поляризационного и статического каналов. В околорезонансном случае имеем

$$\delta = \left(\frac{\omega^2}{Z_i} \right) \frac{d^2 \operatorname{sgn}(\omega - \omega_0)}{\Omega_R}; \quad (8.7)$$

здесь $\Omega_R = \sqrt{(\mathbf{d} \mathbf{E}_0)^2 + (\omega - \omega_0)^2}$ — обобщенная частота Раби; ω_0 , \mathbf{d} — собственная частота и дипольный момент околорезонансного перехода; Z_i — заряд иона-мишени.

На рисунке 13 приведены рассчитанные в [94] зависимости дифференциальных сечений тормозного поглощения от напряженности линейно поляризованного лазерного поля при рассеянии электрона на ионе N^{4+} для однофотонного (кривая 1) и двухфотонного (кривая 2) процессов. На этом же рисунке представлены кривые, соответствующие вкладу только статического канала для однофотонного (кривая 3) и двухфотонного (кривая 4) процессов.

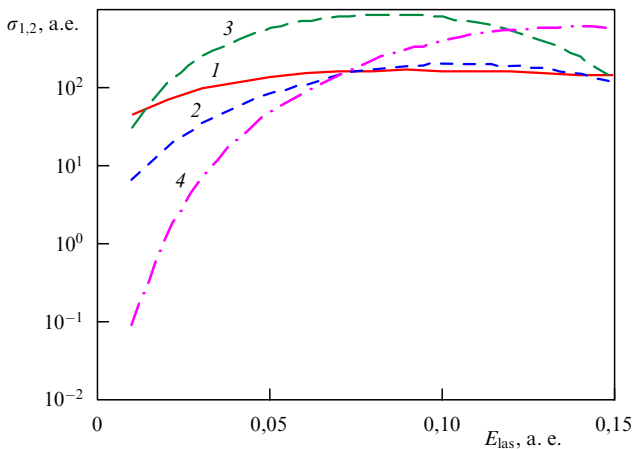


Рис. 13. Сечения однофотонного (кривые 1, 3) и двухфотонного (кривые 2, 4) тормозного поглощения при рассеянии электрона на ионе N^{4+} как функции напряженности лазерного поля E_{las} , вычисленные в [94] с учетом поляризационного канала (кривые 1, 2) и в статическом приближении (кривые 3, 4).

Обобщение расчета многофотонного ТИ с учетом поляризационного канала на случай релятивистских интенсивностей лазерного поля дано в работе [96].

8.2. Поляризационно-интерференционные эффекты при столкновении электрона с атомом и ионом в околорезонансном лазерном поле

Ниже рассмотрены поляризационные эффекты, возникающие в ходе неупругого рассеяния электрона на атоме или ионе с остовом, находящемся в околорезонансном электромагнитном поле. Отстройка частоты внешнего поля ω от собственной частоты электронного остова мишени ω_0 ($\Delta = \omega - \omega_0$) полагается, с одной стороны,

достаточно малой, так что можно пренебречь вкладом других переходов в процесс. С другой стороны, модуль отстройки должен быть достаточно велик ($|\Delta| \gg \gamma$; γ — ширина линии перехода), чтобы реальным возбуждением верхнего электронного состояния и связанным с ним радиационным распадом можно было пренебречь. В результате относительный вклад сечения с реальным возбуждением уровня оказывается равным $(\gamma/\Delta)^2$, т.е. пренебрежимо малым в случае больших отстроек. Заметим, что данный вывод согласуется с результатами анализа возбуждения атомов в крыле линии световыми импульсами малой длительности [97]. В [97] было показано, что "некогерентная" часть населенности возбужденного состояния, остающаяся после выключения внешнего поля, обратно пропорциональна четвертой степени частотной отстройки, в то время как "когерентная" составляющая, отслеживающая мгновенное значение интенсивности излучения и с которой связано ПИ, обратно пропорциональна второй степени Δ .

Поскольку вклады статического и поляризационного каналов суммируются в амплитуде ТИ, то в полном ТИ должна проявляться межканальная интерференция. Однако в сечении ПТИ быстрых электронов на нейтральных атомах, проинтегрированном по углу рассеяния налетающей частицы, роль интерференции мала. Действительно, в этом случае имеет место пространственное разделение областей формирования статического и поляризационного каналов. Статический канал формируется на малых расстояниях от налетающей частицы до ядра мишени $r < R_0$, где сильно электрическое поле атома и велико ускорение электрона. Поляризационный канал, напротив, определяется большими расстояниями $r > R_0$, так как при малых r поляризационный потенциал мал (см., например, (3.16)).

Вклад поляризационного и статического каналов при поглощении лазерного излучения в ходе оптического пробоя газов с учетом поляризационного механизма и многофотонных эффектов рассматривался в [98, 99]. Набор энергии электроном при его рассеянии на резонирующих с внешним полем атомах описывался в рамках квантового кинетического уравнения в условиях неприменимости классического подхода. Анализировались различные режимы включения лазерного поля. Для отношения вероятностей поляризационного и статического каналов было получено следующее выражение через сечение неупругого рассеяния электрона на атоме (σ_{in}) и транспортное сечение (σ_{tr}):

$$\xi = \frac{1}{8} \frac{\sigma_{\text{in}}}{\sigma_{\text{tr}}} \left(\frac{\omega}{\Delta} \right)^2 \frac{\omega}{\langle \varepsilon \rangle} f_{12}; \quad (8.8)$$

здесь f_{12} — сила осциллятора резонирующего перехода, $\langle \varepsilon \rangle$ — средняя энергия электрона, $\Delta = \omega - \omega_0$ — частотная отстройка. Для использованных в [99] значений параметров отношение (8.8) составляет $\xi \approx 10^3 - 10^7$. Оценка, проведенная в [99] для пороговой интенсивности пробоя паров цезия в случае относительно большой отстройки ($\Delta = 0,328$ эВ), соответствующей энергии фотона рубинового лазера и минимальной собственной частоте перехода в атоме цезия, дает $I_{\text{пр}}^{\text{теор}} = 0,94 \times 10^9$ Вт см $^{-2}$, что хорошо соответствует экспериментальным данным $I_{\text{пр}}^{\text{эксп}} = 10^9$ Вт см $^{-2}$ [100]. Отметим, что отношение вероятностей поляризационного и статического каналов при этом равно $\xi \approx 85$, так

что основной вклад в процесс дает именно поляризационный механизм оптического пробоя.

Интерференция поляризационного и статического механизмов тормозного поглощения излучения пропадает при усреднении по углам рассеяния электрона [98, 99]. Тем не менее даже в случае ПТИ электронов на нейтральных мишенях межканальные интерференционные эффекты могут проявляться в дифференциальном по углу сечении рассеяния НЧ.

Впервые на возможность межканальной интерференции в ПТИ было обращено внимание в работе [101], где вычислялась зависимость обратного тормозного эффекта от угла рассеяния электрона на атоме водорода в рамках первого борновского приближения. Частота электромагнитного поля составляла $\omega = 0,3$ а.е., начальный импульс электрона $p_i = 3$ а.е., кроме того, предполагалось, что вектор начальной скорости перпендикулярен вектору напряженности электрического поля. Оказалось, что сечение процесса обращается в нуль при угле рассеяния электрона, равном $0,33$ рад. Это зануление сечения обусловлено деструктивной интерференцией статического и поляризационного каналов, амплитуды которых на данной частоте и при данном угле рассеяния электрона имеют разные знаки и близки по величине. С ростом угла рассеяния электрона начинает доминировать статический канал, на малых углах — поляризационный. При приближении частоты внешнего поля к одной из собственных частот мишени угол рассеяния, при котором сечение процесса обращается в нуль, возрастает, так как возрастает амплитуда поляризационного слагаемого.

Влияние поляризации мишени существенно также для двухфотонных свободно-свободных переходов в лазерном поле при рассеянии электрона на атоме водорода [102]. В рамках первого борновского приближения были получены спектрально-угловые зависимости процесса для различных поляризаций вектора внешнего поля по отношению к начальному импульсу НЧ и различных энергий столкновения. Расчет показал наличие интерференционного провала в зависимости сечения от энергии НЧ, обусловленного деструктивной интерференцией статического и поляризационного каналов. Аналогичные интерференционные провалы были обнаружены в угловых зависимостях сечения двухфотонного поглощения при фиксированной энергии НЧ. В интерференционных провалах сечение падает до нуля для невысоких энергий фотонов внешнего поля ($\omega < 6,8$ эВ), когда амплитуды каналов являются действительными величинами [102]. Если же частота фотона такова, что появляется мнимая добавка в поляризуемости мишени, то нулевой провал превращается в мелкий минимум.

Роль межканальных интерференционных эффектов в интегральном по углу рассеяния НЧ сечении тормозного излучения/поглощения должна возрастать с ростом степени неупругости процесса, т.е. когда энергия излучаемого/поглощаемого фотона становится порядка (или больше — для тормозного поглощения) начальной энергии НЧ. В этом случае, как это следует из закона сохранения энергии-импульса, пространственные области формирования статического и поляризационного каналов начинают сильнее перекрываться. Однако для проявления интерференционных эффектов необходима еще и близость величин амплитуд каналов. Это происходит, например, для ТИ медленных электронов на

ионах с остовом в условиях применимости крамеровской электродинамики [67], когда имеет место пространственная локализация излучательного процесса. Если при этом эффективный радиус излучения больше размеров электронного остова мишени, когда справедливо дипольное приближение по взаимодействию НЧ с электронным остовом, то межканальная интерференция может проявляться и в интегральном по углу рассеяния электрона сечении тормозного излучения/поглощения.

Интерференционные особенности спектрального сечения тормозного эффекта наиболее резки в околорезонансной области, что хорошо видно из формулы (8.5) для вероятности рассматриваемого процесса при заданном угле рассеяния электрона. Так, если модули амплитуд каналов сравниваются в низкочастотном крыле ($\delta = 1$), когда поляризуемость мишени положительна, то вероятность полного тормозного излучения/поглощения обращается в нуль из-за деструктивной интерференции каналов. Замечательно, что при переходе частоты внешнего поля через резонанс характер межканальной интерференции изменяется, что описывается множителем $\text{sgn}(\omega - \omega_0)$ в формуле (8.7). Для $\omega > \omega_0$ межканальная интерференция становится конструктивной, и полная вероятность процесса превышает свое статическое значение. Кроме того, интерференционные эффекты в околорезонансном случае существенно зависят от величины напряженности электрического поля, как это следует из (8.7) и определения обобщенной частоты Раби. С ростом напряженности E_0 величина поляризационной амплитуды уменьшается и соответственно частота интерференционного провала в спектральном сечении процесса приближается к собственной частоте перехода. Это явление аналогично эффекту насыщения в поглощении излучения двухуровневой системой.

Роль эффектов проникновения в околорезонансном ТИ анализировалась для случая рассеяния электронов на многозарядных ионах с остовом [103]. Было установлено, что проникновение НЧ в электронный остов мишени по-разному влияет на различные декартовы компоненты (в фокальной системе координат) вектора излучающего дипольного момента, наведенного в ионном остове. Это влияние сильно для x -компоненты дипольного момента и является значительно более слабым для y -компоненты. Данное обстоятельство приводит к существенной зависимости поляризационно-интерференционных особенностей тормозного эффекта от угла α между вектором начальной скорости НЧ и вектором напряженности электрического поля в электромагнитном излучении. Для $\alpha = 0$ проникновение электрона в остов мишени сильно уменьшает межканальную интерференцию в интегральном сечении, в случае же $\alpha = \pi/2$ это уменьшение не столь значительно. Сказанное иллюстрирует рис. 14, на котором представлено отношение полного сечения околорезонансного ТИ при рассеянии электрона на ионе N^{4+} к сечению статического канала для двух значений угла α в зависимости от частотной отстройки от резонанса. Видно, что в случае параллельной ориентации интерференционный провал в спектральном сечении исчезает, в случае же перпендикулярной ориентации в низкочастотном крыле линии имеет место относительно широкий минимум, обусловленный деструктивной интерференцией статического и поляризационного каналов процесса. В высокочастотном крыле относительная разность сечений для двух значений угла α

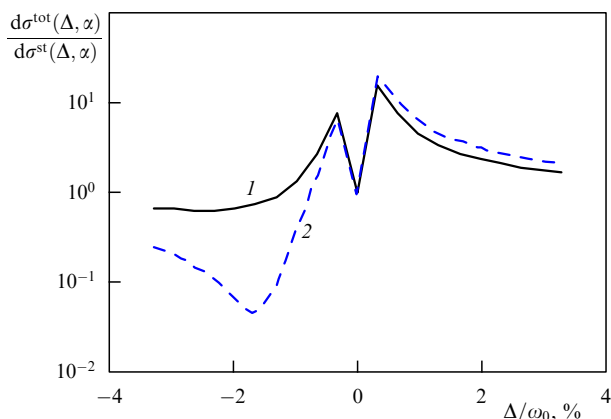


Рис. 14. Нормированные на статическое значение сечения вынужденного тормозного излучения/поглощения квазиклассического электрона на ионе N^{4+} как функции расстройки частоты внешнего поля Δ вблизи собственной частоты околорезонансного перехода в ионном остове для двух значений угла α ($\alpha = 0$ — кривая 1; $\alpha = \pi/2$ — кривая 2) между вектором начальной скорости налетающей частицы ($v_i = 0,6$ а.е.) и вектором напряженности электрического поля внешнего излучения ($E_0 = 10^{-3}$ а.е) [103].

невелика. В этом случае межканальная интерференция носит конструктивный характер, поэтому сечение при перпендикулярной ориентации несколько превосходит сечение при параллельной ориентации.

Поляризационно-интерференционные эффекты в ПТИ значительно более ярко выражены в дифференциальном по углу рассеяния НЧ сечении процесса. Спектрально-угловые зависимости околорезонансного тормозного эффекта при сильно неупругом рассеянии электронов на ионах с остовом анализировались в [104] в рамках квантового описания движения НЧ. Эти зависимости, усредненные по спиновому состоянию, показывают, что в случае параллельной ориентации поля (по отношению к вектору начальной скорости НЧ) интерференционный провал в спектральном сечении перемещается из низкочастотного крыла в высокочастотное крыло с увеличением угла рассеяния электрона. В частности, существует такой угол рассеяния, когда интерференционный провал вообще отсутствует. В случае перпендикулярной ориентации вектора поля частота интерференционного провала всегда расположена в низкочастотном крыле, смещаясь к центру линии с ростом угла рассеяния НЧ.

В целом поляризационно-интерференционные эффекты наиболее ярко проявляются в сечениях ТИ, дифференциальных по углу рассеяния НЧ, при условии резонанса между частотой перехода в атоме и частотой излучаемого или поглощаемого фотона. Такая постановка характерна для условий лазерной подсветки среды.

9. Экспериментальные аспекты

Экспериментальные исследования поляризационных особенностей в атомных переходах развиты в существенно меньшей степени, чем теоретические. Одним из первых экспериментальных приложений теории ПТИ явилось согласование опытных данных по лазерному пробую паров щелочных металлов [100] с предсказаниями лавинной теории на основании вычисленного в [51] сечения обратного тормозного эффекта с учетом поляризационного механизма [1].

В данном разделе мы остановимся на экспериментах по поляризационному ТИ и связанных с ним явлениях для различных сред и энергий налетающих частиц.

9.1. Эксперименты по ПТИ электронов на атомах

Впервые поляризационное ТИ при рассеянии электронов килоэлектрон-вольтных энергий на изолированных атомах наблюдалось в работе [105], в которой в качестве плотной атомной мишени использовалась сверхзвуковая струя Хе. Измерения проводились в спектральном диапазоне, соответствующем "гигантскому" резонансу в сечении фотопоглощения, обусловленному 4d-подоболочкой (частота максимума $\omega_{\max}^{\text{ph}} \approx 90$ эВ, полуширина линии $\Gamma \approx 24$ эВ). В данной области вклад поляризационного канала наиболее значителен [59]. Форма эмиссионного спектра оказалась весьма близкой к форме линии фотопоглощения. Это объясняется связью мнимой части динамической поляризуемости, определяющей в данном случае сечение ПТИ, с сечением фотопоглощения в соответствии с оптической теоремой. Однако в случае ксенона, как это следует из оценок статьи [59], отношение сечения ПТИ к сечению СТИ даже в максимуме все же меньше единицы (около 0,4). Поэтому для выделения вклада поляризационного канала в [105] применялась специальная процедура, основанная на вычитании из наблюдаемого спектра излучения эмиссионного спектра аргона, для которого в рассматриваемом спектральном диапазоне вклад ПТИ пренебрежимо мал. Экспериментальные условия были выбраны таким образом, что для частот фотонов вне "гигантского" резонанса в 4d-фотопоглощении интенсивности эмиссионного спектра аргона и ксенона совпадали. Существенно, что исследовавшийся спектральный диапазон (70–150 эВ) свободен от линейчатого спектра рассматриваемых атомов. Энергия электронного пучка составляла 600 эВ при плотности тока $0,3 \text{ А см}^{-2}$. Величина энергии электронов была ограничена сверху, поскольку при больших энергиях возможна ионизация 3d-подоболочки ксенона. На основании проведенных измерений было показано, что отношение сечений ПТИ и СТИ составляет примерно 70%. Максимум наблюдавшейся эмиссии приходился на энергию фотона, равную 113 эВ, что существенно превышает порог ионизации 4d-подоболочки ксенона и отвечает сдвигу в область больших энергий по сравнению с максимумом в фотопоглощении примерно на 20 эВ.

Эмиссионные спектры оксидов и фторидов лантана и тория, вызванные бомбардировкой твердотельных мишеней электронами киловольтных энергий, изучались в работах [106, 107]. Отношение сечений каналов ТИ на частоте вблизи потенциала ионизации 4d-подоболочки лантана составляет (согласно оценке, приведенной в [59]) множитель 3,2. Таким образом, именно лантан представляет собой наибольший интерес с точки зрения возможности наблюдения поляризационных эффектов в ТИ. В изучавшейся в [106, 107] области частот за порогом ионизации 4d-подоболочки лантана ($110 \text{ эВ} < \omega < 140 \text{ эВ}$), где имеет место "гигантский" резонанс, фотопоглощение металлического лантана весьма близко к атомарному. Это давало основание считать, что и эмиссионный спектр имеет атомарный характер. Исследуемое излучение возбуждалось электронами с энергией от 500 эВ до 4 кэВ при силе тока 4–6 мА. Энергетическое разрешение используемого

фотодетектора ВЭУ-6 составляло 0,18 эВ при энергии фотона около 100 эВ. Изучавшиеся образцы представляли собой тонкие пленки толщиной порядка 100 Å, что позволяло избежать самопоглощения излучения, маскирующего измеряемый спектр в объемном образце, в особенности для больших энергий НЧ [106].

Измеренная форма линии излучения оказалась весьма близка к форме линии фотопоглощения. При этом положение максимума в излучении было смещено примерно на 0,5 эВ в сторону меньших энергий по сравнению с максимумом в поглощении, а ширина спектральной полосы в эмиссии была несколько большей, чем в фотопоглощении. В [107] отмечалось, что центральные частоты спектрального эмиссионного максимума в оксидах и фторидах лантана совпадают. Кроме того, было зафиксировано, что соответствующая полуширина линии в LaF_3 (4,1 эВ) меньше, чем в La_2O_3 (5,7 эВ). Таким образом, снятые спектры оказались в известной мере чувствительны к химическому составу образца.

Весьма симптоматично, что форма эмиссионной линии носила асимметричный характер с более медленным убыванием в высокочастотном крыле. Этот факт может быть объяснен наличием межканальной интерференции, которая, как известно [94], носит деструктивный характер в низкочастотном крыле и конструктивный — в высокочастотном.

В работе [59] отмечалось, что для описания эмиссионного спектра (полученного в [107]) под действием электронов с энергией 0,5 кэВ, борновского приближения, строго говоря, недостаточно, однако оно использовалось для описания качественных закономерностей. Рассчитанный в [59] по формуле типа (5.3) спектр оказался весьма близок к измеренному в [107], причем во всем исследуемом частотном диапазоне величина поляризационного вклада была больше вклада статического канала.

Экспериментальные исследования ПТИ электронов килоэлектрон-вольтовых энергий на атоме ксенона вблизи порога ионизации 4d-подоболочки были продолжены в работах [108, 109]. В статье [108] помимо экспериментальных результатов содержится теоретическое объяснение обнаруженного в ней смещения максимума эмиссионного спектра при изменении энергии НЧ и угла испускания тормозного фотона. При увеличении энергии электронов от 0,3 кэВ до 0,9 кэВ максимум измеренного спектра смещался от 123 эВ до 105 эВ при угле вылета фотона 97° . При этом усиливалась асимметрия формы линии, так что спад интенсивности излучения в сторону высоких частот становился более резким. Кроме того, при энергии электронов 0,3 кэВ и 0,6 кэВ наблюдалось появление дополнительных максимумов в высокочастотном крыле линии излучения. Объяснение наблюдаемого смещения максимума базировалось на расчете дифференциального по углу вылета фотона сечения ПТИ, в котором помимо логарифмического слагаемого присутствует дополнительный член. Было получено простое выражение для частотной отстройки максимума эмиссионного спектра от максимума фотопоглощения, предсказывающее уменьшение этого параметра с ростом энергии НЧ, что и наблюдалось в эксперименте. Расчетные значения отстройки в пределе высоких энергий НЧ оказались, однако, большими экспериментальных, что, по-видимому, объясняется недостаточностью использовавшегося борновского приближения.

Измерения интенсивности дифференциальных спектров ТИ в относительных и абсолютных единицах для различных энергий электронов, рассеивающихся на атомах ксенона, были проведены в работе [109]. Оказалось, что зависимость интенсивности ПТИ от энергии НЧ имеет максимум, лежащий в области энергий электронов 0,6–0,7 кэВ, что находится в противоречии с предсказаниями борновского приближения, критерий которого в данном случае не выполнен. Отличная от борновской зависимость интенсивности ТИ от энергии НЧ наблюдалась и для статического канала. С увеличением энергии электронов от 0,3 кэВ до 0,6 кэВ имел место линейный рост интенсивности, который в диапазоне 0,6–0,9 кэВ существенно замедлялся. В то же время, как это хорошо известно [1, 110], борновское приближение дает обратно пропорциональную зависимость спектральной интенсивности ТИ от энергии НЧ для обоих каналов. Наблюдавшееся в [109] отличие от борновской зависимости связано в первую очередь с эффектами проникновения НЧ в электронный остов мишени (см. раздел 5.3).

9.2. Релятивистские эксперименты на ускорителях

В последнее время интенсивно развиваются экспериментальные исследования поляризационных эффектов при излучении релятивистских электронов в конденсированной среде [111–114].

Статья [111] посвящена наблюдению поляризационно-интерференционных особенностей в излучении релятивистских электронов (с энергией 15 МэВ и 25 МэВ) в кристалле кремния толщиной 50 мкм. В ней был впервые обнаружен эффект интерференции когерентного и параметрического механизмов рентгеновского излучения. Параметрическое рентгеновское излучение — синоним когерентного ПТИ, применявшийся для описания излучения релятивистских электронов в периодических средах еще до возникновения общей концепции ПТИ. В данной работе для наблюдения эффекта использовалась кристаллографическая плоскость (220), которая, как показал проведенный анализ, является наиболее удобной в условиях эксперимента. Сказанное означает, что в процессе когерентного излучения среде передавался избыток импульса, равный соответствующему плоскости (220) вектору обратной решетки кристалла. Заданность переданного импульса заметно увеличивает межканальную интерференцию по сравнению с излучением в аморфной среде. В последнем случае суммирование по возможным переданным импульсам "размывает" интерференционный эффект. Угол излучения фотонов был задан регистрирующим каналом установки и составлял $0,31$ рад. В работе измерялась ориентационная зависимость выхода фотонов в телесный угол $\Delta\Omega = 1,23$ ср от угла между осью электронного пучка и кристаллографической плоскостью (220). В изучавшемся случае основной вклад в процесс дает когерентное ПТИ. Межканальная интерференция, которая для одних углов является конструктивной, а для других — деструктивной, лишь немного изменяет интенсивность полного выхода фотонов. Это изменение было надежно зафиксировано экспериментально, причем интерференционный эффект оказался более выраженным для меньшего значения энергии электронов (15 МэВ). Результаты измерений оказались в хорошем соответствии с расчетными данными [115].

Эффект подавления ПТИ релятивистского электрона, движущегося через тонкую фольгу из аморфного угле-

рода, был обнаружен в работе [112]. Использовался непрерывный электронный пучок с энергией 5–7 МэВ. Ток в пучке составлял несколько наноампер. Регистрировались фотоны с энергией 2–30 кэВ с помощью полупроводникового Si(Li) охлаждаемого детектора. Наблюдение велось под углом 45° к направлению распространения электронного пучка. Было зафиксировано более быстрое уменьшение интенсивности ПТИ с ростом частоты, чем предсказывает теория процесса на изолированном атоме. Данное в работе объяснение эффекта основано на том, что в конденсированной среде эффективный радиус экранирования ядра атомными электронами возрастает. В результате уменьшается максимальная частота $\omega_m = v_i/R_0$, начиная с которой сечение когерентного ПТИ эффективно подавляется. Действительно, в исследованном случае четыре из шести электронов атома кремния принимают участие в создании химических связей с соседними атомами, так что эффективный радиус атома R_0^{eff} увеличивается. Расчет с использованием значения эффективного радиуса $R_0^{\text{eff}} = 4,5R_0$ (R_0 — радиус изолированного атома кремния) оказался в хорошем соответствии с экспериментальными данными. В исследованном случае эффект плотности в ПТИ, связанный с деструктивной интерференцией вкладов соседних атомов (см. раздел 6.3), имеет место в существенно более длинноволновом диапазоне, недоступном для регистрации с использованием применявшихся в работе детекторов. В [112] был также оценен вклад некогерентного ПТИ (с возбуждением и/или ионизацией мишени). Оказалось, что экспериментальные данные выходят на значение интенсивности, соответствующей некогерентному ПТИ, начиная с энергии фотона, равной 5 кэВ. К сожалению, в данной работе не было возможности получить данные для энергий фотонов, меньших 3 кэВ, так что эффект подавления ПТИ был зафиксирован в узком энергетическом интервале от 3 кэВ до 5 кэВ. Тем не менее полученные в [112] результаты позволяют утверждать, что ПТИ может быть использовано как инструмент исследования структуры среды.

В недавней работе [113] (см. также [114]) исследовалось ПТИ релятивистских электронов в поликристаллическом алюминии. Было измерено спектрально-угловое распределение интенсивности ПТИ электронов с энергией 2,4 МэВ в диапазоне энергий фотонов от 2 кэВ до 8 кэВ при взаимодействии электронного пучка с тонкой алюминиевой фольгой. Излучение регистрировалось с помощью Si(Li) детектора в малом телесном угле ($\approx 1,5 \times 10^{-3}$ ср) под углом 90° по отношению к направлению распространения электронного пучка. Плоскость поверхности мишени располагалась под углом 45° к оси пучка. Расстояние между мишенью и детектором составляло примерно 0,5 м. Отметим, что основной вклад в полное число регистрируемых фотонов в исследованном случае дает К-пик характеристического излучения алюминия, расположенный вблизи энергии 1,5 кэВ. Согласно теории интенсивность ПТИ в условиях проводившегося эксперимента составляет не более 1% от интенсивности этого характеристического излучения, что, естественно, учитывалось при обработке экспериментальных данных. Кроме того, для получения спектра ПТИ нужно было также вычесть вклад фонового излучения. В результате было установлено, что спектр ПТИ релятивистских электронов в поликристаллическом алю-

минии содержит острые пики вследствие когерентного рассеяния собственного поля НЧ на упорядоченной структуре микрокристаллов, образующих поликристаллическую мишень. Это находится в резком контрасте с частотной зависимостью ПТИ в аморфной среде, где, согласно расчету, проведенному для условий эксперимента [113], интенсивность ПТИ монотонно уменьшается с ростом энергии фотона. Природа обнаруженных спектральных максимумов в ПТИ аналогична пикам Дебая–Шерера в процессе рассеяния рентгеновских лучей в поликристаллах [81]. Из результатов [113] также следует, что выход ПТИ вне окрестности когерентных пиков сильно подавлен по сравнению с излучением в аморфной среде. Расчетная кривая для спектральной интенсивности ПТИ оказалась в хорошем соответствии с экспериментальными данными [113]. Отметим, что интенсивность обычного (статического) ТИ в изучавшемся спектрально-угловом диапазоне примерно в 4 раза меньше зафиксированной интенсивности ТИ в окрестности главного спектрального пика, приходящегося на энергию фотона 4 кэВ. Таким образом, в [113] было установлено, что частотная зависимость ПТИ релятивистских электронов в поликристаллической среде сильно отличается от таковой для аморфной мишени [111], в отличие от ТИ по статическому каналу. ПТИ оказалось весьма чувствительным к структуре мишени, что говорит о перспективности разработки новых методов диагностики твердотельных сред на основе данного явления.

9.3. Поляризационное тормозное излучение тяжелых заряженных частиц

Важным характеристическим свойством поляризационного канала ТИ является слабая зависимость его сечения от массы НЧ [1]. В случае статического ТИ, как известно [116], ситуация радикально иная. Здесь сечение процесса обратно пропорционально квадрату приведенной массы сталкивающихся частиц, поэтому статическое ТИ тяжелых заряженных частиц пренебрежимо мало по сравнению со статическим ТИ электронов и позитронов.

Полное ТИ протона на атоме водорода с учетом поляризационного канала впервые рассчитывалось в работе [53]. В ней было показано, что сечения ТИ протона и электрона в частотном диапазоне $\omega \leq \omega_{\text{max}} = v_i^2/2$ одного порядка величины, причем для частот $\omega < v_i/R_0$ процесс идет без возбуждения мишени ("упругое", или когерентное ТИ); если же $\omega > v_i/R_0$, ТИ сопровождается ионизацией атома — "неупругое", или некогерентное ТИ (см. раздел 6.2).

Сечение полного ТИ, возникающего при столкновении легких ионов с многоэлектронными атомами, рассчитывалось в [54]. Эта работа была стимулирована экспериментами тех же авторов по ТИ протонов и ионов ^3He при рассеянии на тонкой алюминиевой мишени [55]. В [55] было обнаружено существенное расхождение между экспериментальными данными по излучению протонов с энергией 1 МэВ и 2 МэВ в интервале энергий фотонов 2–6 кэВ и 4–6 кэВ соответственно с предсказанием теории, не учитывающей поляризационного канала. В то же время для излучения протонов с энергией 3 МэВ и выше имело место хорошее соответствие между теорией и экспериментом во всем рассмотренном частотном диапазоне. Расчет, проведенный в [55], учитывал два механизма излучения: статическое ТИ

тяжелой заряженной частицы и ТИ вторичных электронов, выбиваемых ею из атомов мишени. Заметим, что в случае многозарядных тяжелых НЧ доминирующими излучательными механизмами могут быть также радиационный захват электрона мишени в состоянии дискретного спектра НЧ [117] и рентгеновское излучение молекулярных орбиталей [118]. Однако для легких ионов относительный вклад этих процессов в полное излучение мал. Результаты расчета [55] показали, что сечение ТИ вторичных электронов в условиях проведенного в этой работе эксперимента на 3–4 порядка превосходит сечение статического ТИ протонов, так что последним механизмом излучения при анализе экспериментальных данных можно пренебречь. Характерной особенностью исследованного в [55] диапазона энергий НЧ и тормозных фотонов является близость к частоте "отсечки" ТИ вторичных электронов (т.е. к частоте, выше которой процесс запрещен законами сохранения), которая равна $\omega^h = 2v_i^2$, т.е. растет линейно с энергией НЧ. Концепция поляризационного (или атомного) ТИ была привлечена в [54] для объяснения вышеуказанного расхождения между экспериментом и теорией. В этой работе рассчитывалось как когерентное ПТИ (без ионизации и возбуждения мишени), так и некогерентное ПТИ (радиационная ионизация в терминологии [54]). Вклад последнего процесса оказался несущественным для интерпретации экспериментов работы [55]. Дело в том, что в низкочастотной части рассматриваемого диапазона сечение когерентного ПТИ, пропорциональное квадрату числа атомных электронов N_a , превосходит сечение некогерентного процесса, линейное по величине N_a . В высокочастотной части тормозного спектра доминирует ТИ вторичных электронов. Последнее обстоятельство связано с тем, что частота "отсечки" для ТИ вторичных электронов в четыре раза выше аналогичной величины для некогерентного ПТИ.

Расчет когерентного ПТИ протона на атоме алюминия был проведен в [54] с использованием слетеровских волновых функций для связанных электронов и соответствующих констант экранировки. Полученное выражение для амплитуды ПТИ содержало вклад двух слагаемых, S_1 и S_2 . Первое из них (S_1) описывает рассеяние собственного поля НЧ на заряде электронного остова мишени. Второе слагаемое (S_2), исчезающее в высокочастотном пределе, содержит сумму по промежуточным состояниям энергетического спектра атома. Заметим, что в [54] было получено замкнутое аналитическое представление для S_2 . Результаты проведенного расчета оказались в хорошем соответствии с экспериментальными данными работы [55] во всем диапазоне изменения параметров. Было установлено, что для протонов с энергией 1 МэВ основной вклад в наблюдавшееся излучение дает когерентное ПТИ. В случае же протонов с энергией 4 МэВ доминирующим механизмом излучения является ТИ вторичных электронов.

В заключение этого раздела остановимся на ТИ, индуцированном столкновениями тяжелых ионов с мишенями. В экспериментах [119] рассматривалось излучение при высоких энергиях НЧ от 7 МэВ на нуклон до 18 МэВ на нуклон. Налетающими частицами являлись многозарядные ионы N^{7+} , Ne^{10+} , Ar^{17+} , излучавшие при прохождении различных газовых мишеней. Толщина газового слоя составляла 6 мм, давление газа соответствовало нормальному. Полученные экспериментальные

данные интерпретировались в работе [120] для излучения ионов N^{7+} с энергией 250 МэВ в азоте и ионов Ar^{17+} с энергией 288 МэВ в неоне. Выход фотонов регистрировался под углом 90° к оси ионного пучка в спектральном диапазоне от 4 кэВ до 20 кэВ. В случае излучения ионов азота высокочастотная часть снятого спектра (от 5 кэВ до 20 кэВ) имела форму плеча. В спектре излучения ионов аргона в интервале 4–12 кэВ наблюдался хорошо выраженный максимум при энергии фотонов порядка 7 кэВ. Для объяснения зарегистрированных спектров в [120] учитывался вклад трех механизмов излучения: радиационного захвата связанных электронов мишени в континуум состояний НЧ, радиационной ионизации (некогерентного ПТИ) и ТИ вторичных электронов. Величина статического ТИ, называемого в данной работе ядерным, пренебрежимо мала. Оказалось, что вышеописанная структура спектров обусловлена вкладом радиационного захвата электронов мишени в континуум энергетических состояний НЧ, который имеет резонансную спектральную форму линии и наиболее велик для многозарядного иона аргона. Высокочастотный "хвост" в обоих случаях связан с ТИ вторичных электронов. Расчет также показал, что вклад радиационной ионизации существен для излучения ионов азота в низкочастотной части измеренного спектра и пренебрежимо мал для излучения ионов аргона. Последнее обстоятельство связано с наличием частоты отсечки для радиационной ионизации, равной $\omega_c = \mu v_i^2/2$, где μ — приведенная масса электрона и НЧ, v_i — начальная скорость НЧ (см. раздел 6.2).

9.4. Эксперименты по рассеянию электронов на атомах в присутствии лазерного поля

В процессах неупругого рассеяния электронов на мишенях с остовом в присутствии внешнего электромагнитного поля важную роль может играть, как это было теоретически предсказано в [51], поляризационный механизм, при котором передача энергии от поля к электрону идет через виртуальное возбуждение мишени. В начале данного раздела говорилось о том, что учет вклада поляризационного канала позволил объяснить низкие пороги лазерного пробоя паров щелочных металлов [100], атомы которых обладают большой поляризуемостью.

Существует также и другая группа экспериментов по неупругому рассеянию электронов на атомах в лазерном поле, в которых измерялись энергетические спектры рассеянных под определенным углом электронов и для интерпретации которых расчет сечения процесса, основанный на статическом приближении, в ряде случаев оказывался недостаточным.

Одна из первых работ такого рода [121] была посвящена исследованию многофотонных процессов при рассеянии электронов на атомах аргона в присутствии интенсивного излучения CO_2 -лазера (с пиковой мощностью 50 МВт). Начальная энергия электронов составляла 11 эВ. Существенно, что электроны фиксировались при большом угле рассеяния (153°). В эксперименте измерялось количество рассеянных электронов с заданной энергией. Было установлено, что лазерное поле приводит к значительному перераспределению по энергиям первоначально моноэнергетического электронного пучка. Центральный пик, соответствующий упругому рассеянию, уменьшался примерно на 45%. В то же

время возникали дополнительные максимумы в энергетическом спектре рассеянных электронов, соответствующие поглощению/излучению нескольких лазерных фотонов вплоть до $n = 3$. Полученные экспериментальные данные оказались в хорошем соответствии с предсказаниями полуклассической теории явления, развитой в [122]. В частности, было показано, что для условий проведенного эксперимента выполняется так называемое правило сумм: полная вероятность рассеяния, просуммированная по всем фотонностям процесса, есть величина постоянная. Влияние поляризации мишени и статистических свойств электромагнитного поля на правило сумм для многофотонного вынужденного ТИ исследовалось в работе [123] в рамках первого борновского приближения. Было показано, что учет поляризационного канала существенно модифицирует правило сумм для достаточно малых углов рассеяния электрона. Из полученного в [123] выражения для полного сечения рассеяния также вытекает, что переход от когерентного излучения к стохастическому увеличивает роль поляризационных эффектов. Вклад этих эффектов в транспортное сечение рассеяния максимален для перпендикулярной ориентации вектора внешнего поля по отношению к вектору начальной скорости электрона.

В работе [124], являющейся продолжением экспериментов, начатых в [121], проводилось измерение электронных спектров при рассеянии электронов с энергией 9,5 эВ на атомах гелия на малый угол (9°) в присутствии мощного ($P \approx 10^8$ Вт см $^{-2}$) излучения CO $_2$ -лазера. Оказалось, что интенсивность дополнительных электронных пиков, соответствующих поглощению/излучению электронами лазерных фотонов в процессе рассеяния, существенно превышает значения, предсказываемые теорией [122], не учитывающей поляризационный канал. Экспериментальные условия были выбраны в [124] таким образом, чтобы в максимальной степени удовлетворить критериям применимости так называемого приближения Кролла–Ватсона [122] и исключить процессы возбуждения электронного остова мишени. Низкое значение поляризуемости гелия предполагало также минимизацию поляризационных эффектов. Тем не менее результаты [124] говорят о недостаточности формулы Кролла–Ватсона для объяснения полученных экспериментальных данных.

В работе [125] теоретически исследовалось влияние наведенной поляризации мишени и статистических флуктуаций лазерного излучения (которое в случае CO $_2$ -лазера является многомодовым) на экспериментальные данные [124] по нелинейным сечениям свободно-свободных переходов. Была, в частности, учтена возможность нахождения атомов гелия в метастабильном состоянии 2^1S с поляризуемостью 803 а.е., т.е. почти в 600 раз большей поляризуемостью основного состояния гелия 1^1S (1,4 а.е.). Для оценки роли поляризационных эффектов использовалась формула (8.2), полученная в [51] в рамках борновского приближения и, как это отмечалось в разделе 8.1, без учета нелинейного взаимодействия атомных электронов с электромагнитным полем. В результате был сделан вывод о пренебрежимой малости поляризационных эффектов для атома гелия в основном состоянии. В то же время для атомов в метастабильном состоянии 2^1S учет поляризации мишени заметно улучшал согласие с экспериментом [124]. Однако получающееся в последнем случае резкое уменьшение сечения с

ростом фотонности процесса противоречит экспериментальным данным. Проведенный в [125] учет стохастичности многомодового излучения CO $_2$ -лазера позволил несколько сгладить это противоречие. Тем не менее остающееся расхождение дало авторам [125] основание сделать вывод о невозможности объяснить полученные в [124] данные с помощью учета поляризационного канала и статистических свойств лазерного излучения. Следует, однако, заметить, что для полной корректности сделанного вывода оценку роли поляризационных эффектов в многофотонных свободно-свободных переходах следует проводить на основании формулы (8.3), которая учитывает нелинейное взаимодействие внешнего поля с атомными электронами.

9.5. Столкновительно-индуцированное поглощение в газах

Большой экспериментальный материал имеется по теме, примыкающей к рассматриваемым поляризационным эффектам в атомных переходах, а именно по поглощению электромагнитного излучения, обусловленному столкновениями между молекулами (ПОС) в газах. Данному вопросу посвящена фундаментальная монография [9]. Мы здесь вкратце остановимся на основных чертах этого явления и опишем ряд соответствующих экспериментов.

В отличие от обычного (одночастичного) поглощения, интенсивность которого пропорциональна первой степени концентрации частиц (n), индуцированный столкновениями спектр (I) является нелинейной функцией концентрации. Соответствующее вириальное разложение для газа низкого давления имеет вид

$$I = \tilde{A}n + \tilde{B}n^2 + \tilde{C}n^3 + \dots \quad (9.1)$$

Здесь первое слагаемое описывает поглощение излучения невозмущенным атомом или молекулой, а оставшийся ряд — поглощение, индуцированное столкновениями. Если процесс на отдельной молекуле запрещен ($\tilde{A} = 0$), остается вклад ПОС, который для достаточно высоких плотностей газа может иметь существенное значение.

Таким образом, столкновения между частицами газа приводят к появлению линий поглощения в тех спектральных диапазонах, где оно отсутствует для изолированных молекул. Нелинейные слагаемые в (9.1) описывают соответственно двойные, тройные и т.д. излучательные столкновения. Заметим, что в первых экспериментах по данной тематике, проведенных еще в 1885 г. [126], в кислороде при давлении в десятки и сотни атмосфер наблюдались новые широкие полосы поглощения, отсутствующие при атмосферном давлении. Соответствующие коэффициенты поглощения оказались пропорциональны квадрату плотности газа (в нарушение закона Бэра), что как раз соответствует парным столкновениям.

Согласно современным представлениям [9], ПОС спектры возникают вследствие появления в процессе столкновения электрического дипольного момента системы, называемой также супермолекулой. С этой точки зрения ПОС аналогично ПТИ, в котором излучающий дипольный момент в мишени также индуцируется в результате столкновения с другой частицей. Для ПТИ, в отличие от ПОС, характерна ситуация, когда по крайней мере одна из сталкивающихся частиц

заряжена. Заметим, что ПТИ рассматривалось и для атом-атомных столкновений в работе [8].

Характеристической чертой ПОС спектров является их большая (по сравнению с одночастичными спектральными линиями) ширина, обычно порядка $10^{12} - 10^{13} \text{ с}^{-1}$, что отражает малое время жизни супермолекулы. Другим отличительным свойством рассматриваемого процесса является малая величина индуцированного дипольного момента μ , которая изменяется в пределах 0,01–0,1 Д. Напомним, что для полярных молекул соответствующее значение составляет обычно несколько Дебай.

Наиболее общее выражение, описывающее поглощение кванта $\hbar\omega$, индуцированное столкновением между частицами A и B , имеет вид

$$A + B + \hbar\omega \rightarrow A' + B' + \Delta\varepsilon. \quad (9.2)$$

Здесь символы A' , B' обозначают сталкивающиеся молекулы в возбужденных состояниях, $\Delta\varepsilon$ — изменение поступательной энергии частиц.

В частном случае $A = A'$, $B = B'$ вся энергия фотона идет на увеличение кинетической энергии поступательного движения системы, а соответствующий спектр поглощения называется трансляционным [9]. Этот процесс аналогичен обратному поляриационному тормозному эффекту без возбуждения мишени. Трансляционный спектр характерен для ПОС в одноатомных инертных газах, тогда центр линии приходится на нулевую частоту. В других случаях возбуждение молекулы происходит также во вращательном и колебательно-вращательном спектрах, причем возбуждаются переходы, запрещенные для изолированных молекул. Результирующий спектр является колебательно-вращательно-трансляционным с характерными частотами, лежащими в далеком инфракрасном и микроволновом диапазонах длин волн. Частоты максимумов такого "ровибро-трансляционного" спектра соответствуют энергиям колебательно-вращательных переходов (а также их суммам), а ширины полос определяются временем жизни супермолекулы. Этот тип спектра является универсальным в том смысле, что он проявляется во всех молекулярных газах.

В некоторых случаях возможно также ПОС с возбуждением электронных степеней свободы сталкивающихся частиц. Соответствующий спектр лежит в видимом и ультрафиолетовом диапазонах. Примером спектра такого рода может служить ПОС на электронных переходах ${}^3\Sigma_g^- \rightarrow a^1\Delta_g$, $b^1\Sigma_g^+$ в молекуле кислорода [127]. Заметим, что оба эти перехода в изолированной молекуле запрещены правилами отбора. Тем не менее в эксперименте [127] вблизи максимума линии (7900 см^{-1}), соответствующей переходу ${}^3\Sigma_g^- \rightarrow a^1\Delta_g$, был зафиксирован коэффициент поглощения около 24 см^{-1} при температуре 297 К и концентрации частиц газа 132 амагата ($1 \text{ амагат} \approx 2,7 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$). В цитируемом эксперименте наблюдались также полосы поглощения, соответствующие возбуждению состояния $b^1\Sigma_g^+$ и одновременному возбуждению сталкивающихся молекул в состояния $a^1\Delta_g$ и $b^1\Sigma_g^+$.

Наиболее просто описывается ПОС в смеси инертных газов, когда нет колебательно-вращательных степеней свободы. Заметим, что ПОС в моноатомном газе отсутствует из-за наличия центра симметрии поглощающей супермолекулы, что делает невозможным возникновение дипольного момента. Дипольный момент при

столкновении двух различных атомов появляется вследствие двух механизмов: обменного и дисперсионного [128]. Первый характерен для малых расстояний R между сталкивающимися частицами, соответствующий дипольный момент экспоненциально убывает с R : $\mu_O \approx \mu_0 \exp(-R/R_0)$; здесь R_0 — расстояние наибольшего сближения. Дисперсионный механизм существует для больших R . Тогда для наведенного дипольного момента справедливо разложение $\mu_D \approx -D_7/R^7 - D_9/R^9 - \dots$ [9].

Если хотя бы одна из сталкивающихся частиц является (неодноатомной) молекулой, то имеют место еще и другие механизмы возникновения дипольного момента, связанные с наличием у молекулы действующего электрического поля. Для случая симметричных диатомных молекул типа H_2 или N_2 низший член разложения молекулярного поля является квадрупольным, и наведенный этим полем в частице-партнере дипольный момент на больших межчастичных расстояниях может быть представлен в виде

$$\mu_Q \approx \frac{\sqrt{3}q_2\alpha}{R^4}, \quad R \gg R_0; \quad (9.3)$$

здесь q_2 — квадрупольный момент молекулы, α — поляризуемость частицы-партнера.

Равенство (9.3) выявляет указанную ранее аналогию между ПОС и поляриационными эффектами в атомных переходах: и в том, и в другом случае взаимодействие с электромагнитным полем происходит в результате поляризации электронного остова одной из сталкивающихся частиц полем частицы-партнера. Наведенный дипольный момент может быть индуцирован градиентами электрического молекулярного поля, а также столкновительным нарушением первоначальной симметрии молекулы.

На рисунке 15 представлены результаты измерений спектрального коэффициента поглощения излучения в смесях инертных газов при комнатной температуре, обусловленного парными столкновениями [129, 130]. Коэффициент поглощения $\kappa_a(\nu)$ нормирован на произведение концентраций компонент, что позволило изобразить на одном графике данные, полученные для различных давлений в смесях. Характерной чертой приведенных зависимостей является наличие широких максимумов в дальнем инфракрасном диапазоне, смещающихся в область высоких частот с ростом скорости молекул. С помощью данных рис. 15 и формулы

$$\kappa_a(\nu) \propto n_1 n_2 \nu g(\nu) \left\{ \nu \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) \right] \right\}, \quad (9.4)$$

где k — постоянная Больцмана, c — скорость света, T — температура, можно восстановить спектральные функции $g(\nu)$, описывающие ПОС в различных газовых смесях. Исключение частотно-зависимого фактора в фигурных скобках (9.4) приводит к тому, что максимум спектральной функции $g(\nu)$ приходится на нулевую частоту, что характерно для трансляционных ПОС спектров. Полуширина спектральной функции может быть оценена по формуле:

$$\Delta\nu = \frac{2,5}{\pi c \sigma} \bar{\nu}_{12}, \quad (9.5)$$

где $\bar{\nu}_{12}$ — средняя относительная скорость различных атомов, параметр σ есть корень потенциала межатомного взаимодействия: $V_{\text{int}}(\sigma) = 0$. Эта величина для

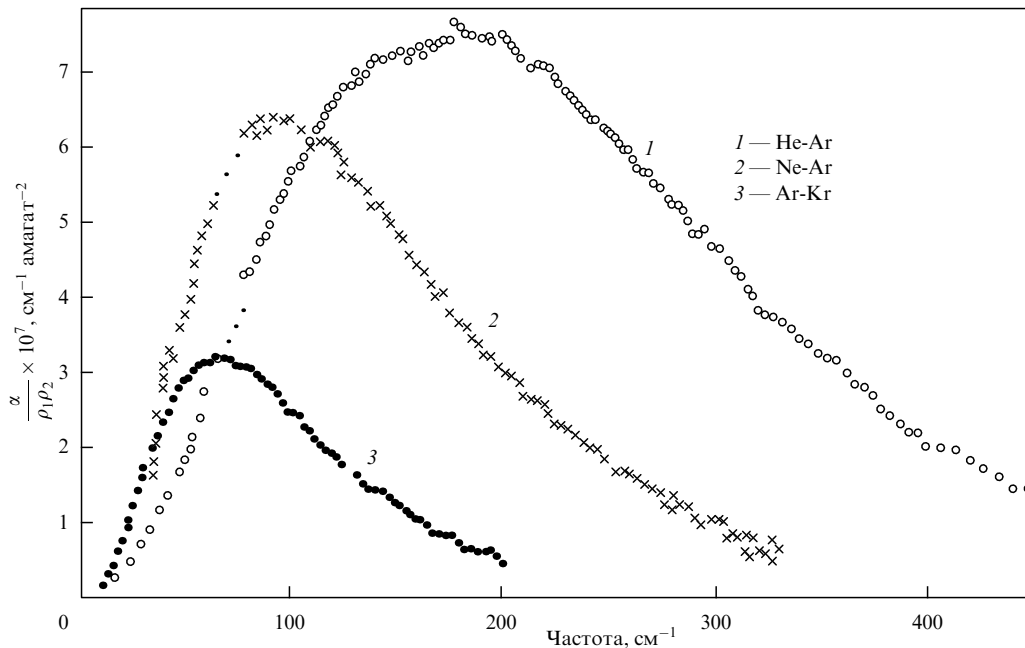


Рис. 15. Нормированные на произведение концентраций результаты измерений парного коэффициента поглощения излучения смесями инертных газов He-Ar, Ne-Ar [129] и Ar-Kr [130] при комнатной температуре.

смесей He-Ne, Ne-Ar, Ar-Kr равна 0,295, 0,305, 0,345 нм соответственно. В результате для полуширин спектральных функций рассматриваемых смесей из (9.5) получаются следующие величины: 120, 60, 37 см^{-1} , что находится в разумном соответствии с экспериментальными данными рис. 15. Отметим, что форма рассматриваемых спектральных функций в центре (т.е. вблизи нулевой частоты) может быть аппроксимирована лоренцевской кривой, на краях она имеет экспоненциальный характер.

Любопытной характерной чертой ПОС спектров, имеющей прямую аналогию с эффектом плотности для ПТИ релятивистских частиц в аморфной конденсированной среде (см. раздел 6.3), является наличие так называемых междарных провалов в спектральной функции и коэффициенте поглощения при достаточно низких частотах. Например, спектральная функция ПОС 1:1 смеси гелия и аргона при суммарном давлении 160 атм обнаруживает провал для частот, меньших 10 см^{-1} . Данный эффект является следствием деструктивной интерференции вкладов в поглощение, обусловленных последовательными столкновениями молекул газа, когда интервал времени между столкновениями становится порядка обратной частоты электромагнитного поля. Деструктивная интерференция возникает, потому что наведенные дипольные моменты в двух последовательных столкновениях между молекулами оказываются более или менее антипараллельными точно так же, как быстрый электрон в конденсированной среде наводит по обе стороны от своей траектории антипараллельную поляризацию в атомах среды.

ПОС играет важную роль в астрофизических приложениях в особенности в тех случаях, когда в рассматриваемой спектральной области отсутствуют другие механизмы излучательных процессов, например в холодных участках атмосфер планет. Так, первое прямое свидетельство присутствия молекул H_2 в атмосферах внешних планет было получено в [131] путем воспроизведения

в лабораторных условиях диффузной структуры на длине волны 827 нм, наблюдавшейся в спектрах Урана и Нептуна. В эксперименте [131] исследовалось поглощение излучения на 80-метровой длине в водороде при давлении 100 атм и температуре 73 К. Данная структура оказалась линией $S_3(0)$ в столкновительно-индуцированной колебательно-вращательной полосе $0 \rightarrow 3$ молекулы H_2 . В цитируемой работе была также идентифицирована другая особенность спектра на длине волны 816,6 нм как столкновительно-индуцированный двойной переход в молекулах H_2 . На эксперименте использовался чистый водород, и наблюдаемый двойной переход был относительно сильным. В то же время в спектрах внешних планет он был намного слабее линии $S_3(0)$. Это обстоятельство позволило сделать вывод о присутствии ощутимого количества гелия в атмосферах Урана и Нептуна, поскольку гелий заметно усиливает линию $S_3(0)$ и не может влиять на двойной переход в сталкивающихся молекулах водорода. В настоящее время установлено, что ПОС играет важную роль в температурном балансе и атмосферной структуре больших планет. ПОС-спектры представляют интерес для изучения атмосфер некоторых типов звезд, таких, как поздние звезды, звезды малой массы, коричневые карлики, некоторые холодные белые карлики и т.д.

В заключение укажем на еще одно родственное ПОС-явление, которое также может быть интерпретировано как поляризационный эффект. Речь идет о возбуждении атома при его столкновении с фотоном и электроном [132]. Это прямой аналог ПОС с заменой одной из сталкивающихся нейтральных частиц на электрон; он также может быть представлен с помощью диаграмм Фейнмана, приведенных во введении, а его сечение может быть выражено через недиагональный матричный элемент от оператора рассеяния излучения на атоме. Данный процесс детально исследовался экспериментально [133] с применением техники тройных столкновений электрон-фотон-атомных пучков. В частности, наблюда-

лось возбуждение состояния 2^3S атома гелия в результате столкновения с электроном в поле маломощного CO_2 -лазера в виде двух спутанных пиков в спектре энергетических потерь неупруго рассеивающихся электронов при $E = 19,817 \pm 0,117$ эВ.

Многофотонная модификация возбуждения атома при одновременном столкновении с электроном и фотоном теоретически изучалась в [134].

9.6. Поляризационные эффекты вблизи 4f-структуры в ТИ на металлических мишенях

В экспериментах [135, 136] исследовались эмиссионные спектры М-серий металлических лантана и церия (длина волны 14–15 Å) при возбуждении электронным пучком околопороговых энергий (сила тока — до 100 мА). В результате была обнаружена спектральная структура (4f-структура), амплитудно-частотные характеристики которой находились в жесткой связи с энергией возбуждающих электронов. Важной чертой этой структуры являлось резкое возрастание интенсивности при приближении энергии электронного пучка к потенциалам возбуждения $3d_{5/2}$ -, $3d_{3/2}$ -подоболочек лантана и церия. Анализ большого количества эмиссионных спектров (40 для лантана и 70 для церия), зарегистрированных при изменении энергии электронного пучка с шагом 1–2 эВ и энергетическим разбросом менее 0,2 эВ, показал, что обнаруженная структура представляет собой особенность непрерывного спектра излучения возбуждающих электронов с их переходом в 4f-состояние, расположенное над уровнем Ферми, а не обычное характеристическое излучение М-линий соответствующих атомов. Данная структура наблюдалась и для энергий пучка вдали от потенциала возбуждения 3d-подоболочки в виде пика, смещенного от коротковолновой границы ТИ в сторону меньших энергий (на 5,5 эВ в случае лантана). Такая спектральная локализация эмиссионного максимума соответствует данным по энергии 4f-состояния, лежащего на 5,5 эВ выше уровня Ферми металлического лантана. Интенсивность этого пика уменьшалась с ростом энергии электронов вплоть до отстройки от потенциала возбуждения М-серии на величину 10–15 эВ, а положение по отношению к коротковолновой границе оставалось неизменным. При приближении энергии электронного пучка к энергии фотонов характеристической M_α -линии (для лантана $E_{MV} = 834$ эВ) интенсивность излучения в центре 4f-структуры ($\hbar\omega_{\max} \cong 831$ эВ) возрастала более чем на два порядка, достигая своего максимума (для случая лантана) при $E_{\text{эл. пучка}} = 836,5$ эВ. Дальнейшее снижение интенсивности в центре структуры с увеличением энергии возбуждения происходило более медленно, чем его рост в низкочастотном крыле (для $\hbar\omega_{\max} < E_{MV}$), пока не наступало вновь увеличение интенсивности излучения в центре 4f-структуры вблизи энергии фотонов M_β -линии. Таким образом, наблюдалась спектральная асимметрия возбуждения эмиссионной 4f-структуры: интенсивность излучения в низкочастотном крыле линии была меньше, чем в высокочастотном крыле.

На рисунке 16, взятом из работы [136], приведена зависимость интенсивности излучения в 4f-структуре от его центральной частоты для церия. Минимум интенсивности наблюдался при энергии фотона 868,1 эВ. Значение минимальной интенсивности излучения оказалось в 175 раз меньше, чем значение в первом максимуме при 882,2 эВ и в 105 раз меньше интенсивности второго

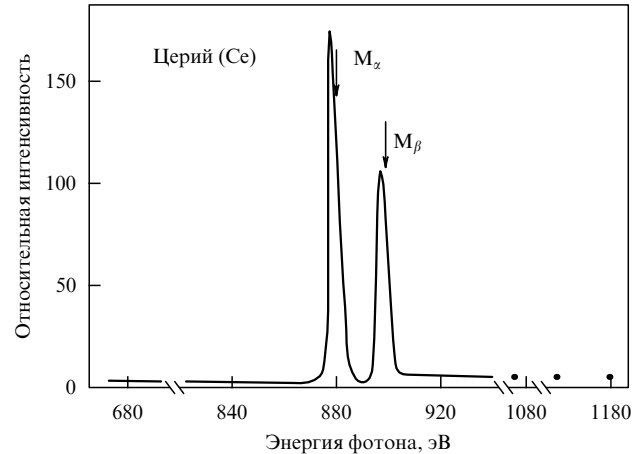


Рис. 16. Зависимость от энергии электронного пучка интенсивности тормозного излучения с захватом электрона в 4f-состояние при рассеянии на металлическом церии [136].

максимума при 900,2 эВ. Отношение интенсивностей пиков 5:3 приблизительно равно статистическим весам M_5 - и M_4 -уровней, а их центральные частоты несколько сдвинуты в сторону меньших энергий по отношению к частотам M_α - и M_β -линий. Это смещение отличается знаком от соответствующего смещения максимума излучения вблизи потенциала ионизации 4d-оболочки по отношению к максимуму фотопоглощения в лантане [101] и ксеноне [100]. Из рисунка 16 также видна упоминавшаяся выше асимметрия спектральной формы 4f-структуры.

В цитированных экспериментальных работах была дана качественная интерпретация полученных результатов, основывавшаяся на предположении, что увеличение сечения неупругого рассеяния излучающего электрона в 4f-состояние связано с образованием короткоживущего возбужденного состояния отрицательного иона $3d^{-1}4f^2$. При этом подчеркивалось, что для атомов рассматривавшихся мишеней имеет место сильное перекрытие 4f-волновых функций с 3d-волновыми функциями, что обеспечивает сильную пространственную связь между соответствующими состояниями.

В работе [137] были теоретически воспроизведены асимметричные резонансы в ТИ, наблюдавшиеся в экспериментах [135, 136], с помощью представления о поляризационном механизме ТИ. В работе, в частности, отмечалось, что важная роль поляризационного канала в рассматривавшихся случаях обусловлена большой поляризуемостью 3d-подоболочек атомов лантана и церия. Качественно картина сводилась к следующему: рассеивающийся электрон, помимо излучения, обусловленного собственным дипольным моментом, своим кулоновским полем возбуждает осциллирующий дипольный момент на атомном переходе ($3d^9 4f$)-(3d¹⁰), что и приводит к резонансному возрастанию интенсивности 4f-структуры. В рамках этого подхода полный излучающий дипольный момент представляет собой сумму двух слагаемых — прямого и поляризационного — в соответствии с выражением [137]

$$D(E) \propto \langle 4f|z|E_g \rangle - \frac{\langle 4f 4f|1/r_{21}|3d E_g \rangle \langle 3d|z|4f \rangle}{E_{4f} + E_{4f} - E_{3d} - i \cdot \Gamma/2 - E} + \text{+ обменные члены.} \quad (9.6)$$

Здесь E — энергия налетающего электрона, E_g — g -составляющая его волновой функции, Γ — ширина резонансного состояния отрицательного иона ($3d^{-1}4f^2$), z — проекция радиус-вектора налетающего электрона. Для относительной интенсивности, являющейся аналогом спектрального R -фактора (см. введение), было получено выражение

$$R(E) = \frac{I(E)}{I_0(E)} = \left| 1 + \sum_{i=1}^2 \frac{a_i(E)}{E - E_i + i \cdot \Gamma/2} \right|^2. \quad (9.7)$$

Здесь введены функции $a_i(E) = g_i b(E)$, где g_i — статистические веса состояний и $b(E)$ — константа связи, определяемая через соответствующие радиальные интегралы. Константа связи была вычислена из первых принципов, в результате было получено значение $b(E = 62 \text{ Ry}) = 1,1 \text{ Ry}$, что оказалось в разумном соответствии с экспериментальными данными $b = 10 - 15 \text{ эВ}$ [135].

С помощью (9.6) была рассчитана интенсивность $4f$ -пика на основании дипольной формулы $I(E) \propto |D(E)|^2$ с учетом тонкого расщепления $3d$ -подоболочки. Для грубого сравнения с экспериментом на лантане в работе использовались следующие значения параметров: $\Gamma = 0,2 \text{ Ry}$ — ширина резонанса, $E_2 - E_1 = 1,2 \text{ Ry}$ — величина тонкого расщепления. В результате проведенных модельных вычислений были воспроизведены основные черты явления, наблюдавшиеся в эксперименте, такие, как асимметрия эмиссионных резонансов с интерференционным провалом в низкочастотном крыле линии. Кроме того, рассчитанная энергетическая отстройка интерференционного минимума от первого максимума оказалась равной 10 эВ , что находится в соответствии с экспериментальным значением, равным $10 - 15 \text{ эВ}$ [135]. Наряду с этим рассчитанное превышение интенсивности излучения в $4f$ -пиках над фоновой интенсивностью оказалось несколько меньше экспериментально зарегистрированного.

Рассмотренный эффект резонансного увеличения интенсивности излучения $4f$ -структуры вблизи потенциала ионизации $3d$ -подоболочки не имеет места для частот, соответствующих возбуждению $4d$ -электронов, о чем, в частности, свидетельствует расчет [138]. В работе [106] отмечалось, что данный факт, по-видимому, связан с малой вероятностью образования двухэлектронных короткоживущих состояний ($4d^9 4f^2$) в лантане.

10. Заключение

Эффекты поляризационного излучения обладают, как следует из проведенного рассмотрения, чрезвычайным разнообразием, включающим в себя радиационные переходы различных типов. Для электронов интенсивность поляризационного излучения на сложных атомах и ионах меняется в широких пределах, определяемых обобщенной поляризуемостью мишени и эффективным зарядом иона, воздействующим на электрон и изменяющимся от заряда иона до заряда ядра. Характер излучения может быть когерентным или некогерентным по вкладу атомных электронов в зависимости от величины передаваемого мишени импульса.

В практических приложениях интерес представляют интегральные характеристики ПИ, такие, как полные радиационные потери плазмы с тяжелыми ионами. Вклад поляризационного канала естественно характеризовать интегральным R -фактором (R_{tot}), представляющим

собой отношение интегральных по частоте поляризационных потерь к интегральным потерям по статическому каналу. Зависимость фактора R_{tot} от энергии налетающего электрона для различных зарядов ядра показана на рис. 17. Видно, что вклад поляризационного канала оказывается сравнимым с вкладом статического канала, особенно в области умеренных энергий электронов. При увеличении энергии усиливается их проникновение в остов и доля поляризационного канала уменьшается.

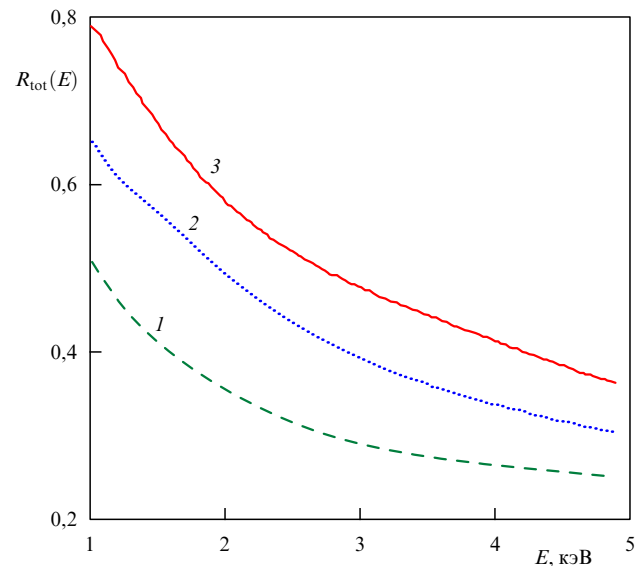


Рис. 17. Зависимость R -фактора, характеризующего относительный вклад поляризационного канала в полные энергетические потери, от начальной энергии при рассеянии квазиклассических электронов на атоме Томаса–Ферми с различным значением заряда ядра: $Z = 30$ (кривая 1); $Z = 60$ (2); $Z = 90$ (3).

Большой интерес имеет исследование поляризационных эффектов в спектрах линейчатого излучения многозарядных ионов, проявляющих себя в виде массива линий связанно-связанных переходов, отвечающих атомным состояниям со сложной электронной конфигурацией остова. С увеличением заряда иона, т.е. частоты радиационных переходов, все большую роль должна играть динамическая поляризуемость, остова в отличие от статической поляризуемости, характерной для переходов в щелочных элементах.

Несомненный интерес представляют также прямые измерения поляризационной рекомбинации. По-видимому, это наиболее просто сделать в экспериментах с многозарядными ионами в накопительных кольцах. Здесь, однако, наблюдение поляризационной рекомбинации связано с невыясненной до сих пор причиной значительного увеличения полной вероятности рекомбинации, зафиксированной также для ионов, вообще не имеющих электронного остова [83].

Поляризационное излучение тяжелых частиц, в частности, многозарядных ионов при их движении в плотных газовых или твердотельных мишенях, исследовано в значительно меньшей степени, чем поляризационное излучение электронов. Основная проблема при исследовании данного круга явлений состоит в разделении собственно поляризационного излучения и излучения вторичных электронов, образовавшихся в результате ионизации вещества мишени.

Поляризационное излучение, включая поляризационную рекомбинацию, является существенным эффектом для процессов неупругого рассеяния электронов на металлических кластерах вблизи частоты гигантского резонанса [86, 139]. Радиационные свойства кластеров к настоящему времени достаточно хорошо изучены (см. [140]). Они могут быть использованы для расчетов поляризационных характеристик этих объектов и соответствующих им интенсивностей ПИ (см. [141]). Представляется интересным исследование такого рода явлений на наночастицах других типов, таких, как полупроводниковые и диэлектрические нанокристаллы.

Подробно исследованные теоретически [94, 103] интерференционные эффекты в неупругом рассеянии электронов на мишенях с остовом, обусловленные взаимодействием обычного и поляризационного каналов, требуют своей экспериментальной верификации и изучения перспектив практического использования.

Значительный интерес связан с исследованиями излучения горячих газов, подвергающихся воздействию ударных или кавитационных волн в процессе сонолюминесценции. ТИ рассматривается в качестве возможного механизма излучения в этом явлении [142]. Здесь возможно создание условий, когда ПИ преобладает над обычным каналом, определяющимся упругим электрон-атомным рассеянием [9, 143].

Весьма интересным, хотя и не ясным до конца, остается вопрос о роли поляризационного излучения в условиях холодной среды. Речь идет об уже отмечавшемся во введении излучении холодной среды, в которой практически отсутствует возбуждение внутренних степеней свободы, способных обеспечить излучение. В этих условиях единственным каналом излучения является поляризационный канал, обеспечивающий радиационное остывание при любой конечной температуре. Возможность осуществления соответствующих экспериментов нуждается в дополнительном обосновании.

Таким образом, можно констатировать, что концепция поляризационного излучения, помимо своего важного методологического значения, оказалась весьма плодотворной как теоретический базис для обнаружения новых эффектов и углубления представлений об уже известных излучательных процессах. Здесь уместно отметить существенное отставание от теории экспериментальной разработки данной тематики, необходимой для дальнейшего развития этого направления.

Авторы выражают глубокую благодарность В.М. Буймистрову, Б.М. Смирнову и А.Н. Старостину за ценные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 01-02-16305) и Миннауки по теме "Фундаментальная спектроскопия".

Список литературы

1. Поляризационное тормозное излучение атомов и частиц (Под ред. В Н Цытовича, И М Ойрингеля) (М.: Наука, 1987)
2. Bureyeva L A, Lisitsa V S *J. Phys. B* **31** 1477 (1998)
3. Мотт Н, Месси Г *Теория атомных столкновений* (М.: Мир, 1969)
4. Капица С П *ЖЭТФ* **39** 1367 (1960)
5. Тер-Микаелян М Л *ДАН СССР* **134** 318 (1960)
6. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Электродинамика сплошных сред* (М.: Наука, 1982)
7. Fermi E *Z. Phys.* **29** 315 (1924)
8. Амусья М Я, Кучиев М Ю, Соловьев А В *Письма в ЖЭТФ* **10** 1025 (1984)
9. Frommhold L *Collision-induced Absorption in Gases* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1993)
10. Dubois A, Maquet A *Phys. Rev. A* **40** 4288 (1989)
11. Brandt W, Lundqvist S *Phys. Rev.* **139** A612 (1965)
12. Амусья М Я, Черепков Н А, Шапиро С Г *ЖЭТФ* **63** 889 (1972)
13. Гамбош П *Статистическая теория атома и ее применения* (М.: ИИЛ, 1951)
14. Виноградов А В, Шевелько В П *Труды ФИАН* **119** 158 (1980)
15. Stott M J, Zaremba E *Phys. Rev. A* **21** 12 (1980)
16. Zangwill A, Soven P *Phys. Rev. A* **21** 1561 (1980)
17. Brandt W, Eder L, Lundqvist S *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **7** 185 (1967)
18. Король А В и др. *ЖЭТФ* **114** 458 (1998)
19. Уланцев А Д, Шевелько В П *Оптика и спектроскоп.* **65** 1003 (1988)
20. Elden B *Phys. Scripta* **17** 565 (1978)
21. Виноградов А В, Толстухин О И *ЖЭТФ* **96** 1204 (1989)
22. Рапопорт Л П, Зон Б А, Манаков Н Л *Теория многофотонных процессов в атомах* (М.: Атомиздат, 1978)
23. Буймистров В М, Трахтенберг Л И *ЖЭТФ* **69** 108 (1975)
24. Головинский П А, Зон Б А *Оптика и спектроскоп.* **45** 854 (1978)
25. Амусья М Я *Атомный фотоэффект* (М.: Наука, 1987)
26. Делоне Н Б, Крайнов В П *ЖЭТФ* **83** 2021 (1982)
27. Бейгман И Л *ЖЭТФ* **100** 125 (1991)
28. Amusia M Ya, Ivanov V K, Kupchenko V A *J. Phys. B* **18** 3871 (1985)
29. Rost J M *J. Phys. B* **28** L601 (1995)
30. Головинский П А, Киян И Ю *УФН* **160** 97 (1990)
31. Blondel C et al. *J. Phys. B* **2** 839 (1992)
32. Головинский П А, Зон Б А *ЖТФ* **50** 1847 (1980)
33. Раддиг А А, Смирнов Б М *Параметры атомов и атомных ионов* (М.: Энергоатомиздат, 1986)
34. Берсукер И Б *Оптика и спектроскоп.* **2** 97 (1957)
35. Nameed S, Herzenberg A, James M G *J. Phys. B* **1** 822 (1968)
36. Nameed S *Phys. Rev.* **179** 16 (1969)
37. Веселов М Г, Штофф А В *Оптика и спектроскоп.* **26** 321 (1969)
38. Бейгман И Л, Вайнштейн Л А, Шевелько В П *Оптика и спектроскоп.* **28** 425 (1970)
39. Chichkov B N, Shevelko V P *Phys. Scripta* **23** 1055 (1981)
40. Schnopper H W *Phys. Rev.* **131** 2558 (1963)
41. Agnew L *Bull. Am. Phys. Soc.* **11** 327 (1966)
42. Salop A, Pollack E, Bederson P *Phys. Rev.* **124** 1431 (1961)
43. Kukushkin A B, Lisitsa V S *Phys. Lett. A* **159** 184 (1991)
44. Lisitsa V S *Atoms in Plasmas* (Berlin: Springer-Verlag, 1994)
45. Percival I C, Seaton M I *Philos. Trans. Roy. Soc.* **251** 113 (1958)
46. Фирсов О Б, Чибисов М И *ЖЭТФ* **39** 1770 (1960)
47. Касянов В А, Старостин А Н *ЖЭТФ* **48** 295 (1965)
48. Буймистров В М *УФЖ* **17** 640 (1972)
49. Амусья М Я, Балтенков А С, Пайзиев А А *Письма в ЖЭТФ* **24** 366 (1976)
50. Буймистров В М, Трахтенберг Л И *ЖЭТФ* **73** 850 (1977)
51. Зон Б А *ЖЭТФ* **73** 128 (1977)
52. Зон Б А *ЖЭТФ* **77** 44 (1979)
53. Буймистров В М, Кротов Ю А, Трахтенберг Л И *ЖЭТФ* **79** 808 (1980)
54. Ishii K, Morita S *Phys. Rev. A* **30** 2278 (1984)
55. Ishii K, Morita S, Tawara H *Phys. Rev. A* **13** 131 (1976)
56. Амусья М Я и др. *ЖЭТФ* **88** 383 (1985)
57. Астапенко В А и др. *ЖЭТФ* **88** 1560 (1985)
58. Low F E *Phys. Rev.* **110** 974 (1958)
59. Амусья М Я, Зимкина Т М, Кучиев М Ю *ЖТФ* (5) 1424 (1982)
60. Астапенко В А, Буреева Л А, Лисица В С *ЖЭТФ* **117** 496 (2000)
61. Астапенко В А, Буреева Л А, Лисица В С *ЖЭТФ* **117** 906 (2000)
62. Astapenko V A, Bureyeva L A, Lisitsa V S *Phys. Scripta T* **86** 62 (2000)
63. Коган В И, Гервидс В И *Письма в ЖЭТФ* **22** 308 (1975)
64. Жданов В П, Чибисов М И *ЖТФ* **47** 1804 (1977)
65. Lee C M et al. *Phys. Rev. A* **13** 1714 (1976)
66. Коган В И, Кукушкин А Б *ЖЭТФ* **87** 1164 (1984)
67. Kogan V I, Kukushkin A B, Lisitsa V S *Phys. Rep.* **213** 1 (1992)
68. Гинзбург В Л, Цытович В Н *Переходное излучение и переходное рассеяние* (М.: Наука, 1984)
69. Акопян А А, Цытович В Н *Физика плазмы* **1** 673 (1975)
70. Акопян А А, Цытович В Н *ЖЭТФ* **71** 166 (1977)
71. Цытович В Н *Труды ФИАН* **66** 191 (1973)

72. Астапенко В А "Излучение и поглощение фотонов при многочастичных взаимодействиях", Дис. ... канд. физ.-мат. наук (М.: МФТИ, 1985)
73. Астапенко В А *Физика плазмы* **27** 6 (2001)
74. Астапенко В А, Буймистров В М, Кротов Ю А *ЖЭТФ* **93** 825 (1987)
75. Biggs F, Mendelsohn L B, Mann J B *At. Data Nucl. Data Tabl.* **16** 201 (1975)
76. Astapenko V A, Bureeva L A, Lisitsa V S *Laser Phys.* **10** 960 (2000)
77. Оболенский О И "Поляризационное тормозное излучение электронов внутренних оболочек атомов", Дис. ... канд. физ.-мат. наук (СПб: ФТИ, 2000)
78. Тер-Микаелян М Л *Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях* (Ереван: Изд-во АН АрмССР, 1969)
79. Астапенко В А и др. *Физика плазмы* **15** 202 (1989)
80. Насонов Н Н, Сафронов А Г *ЖТФ* **62** 1 (1992)
81. Иверонова В И, Ревкевич Г П *Теория рассеяния рентгеновских лучей* (М.: Наука, 1972)
82. Nasonov N *Nucl. Instrum. Meth. B* **145** 19 (1998)
83. Muller A et al. *Phys. Scripta* **37** 61 (1991)
84. Виноградов А В, Толстихин О И *ЖЭТФ* **96** 61 (1989)
85. Kim L, Pratt R H *Phys. Rev. A* **36** 45 (1987)
86. Connerade J P, Solovoyov A V *J. Phys. B* **29** 365 (1996)
87. Nahar S N *Phys. Rev. A* **55** 1980 (1997)
88. Woods D T, Shull J M, Sarazin C L *Astrophys. J.* **249** 399 (1981)
89. Hahn Y J. *Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **41** 315 (1989)
90. Arnaud M, Raymond J *Astrophys. J.* **398** 395 (1992)
91. Бункин Ф В, Федоров М В *ЖЭТФ* **49** 1215 (1965)
92. Берсон И Я *ЖЭТФ* **80** 1727 (1981)
93. Головинский П А *ЖЭТФ* **94** 87 (1988)
94. Астапенко В А, Кукушкин А Б *ЖЭТФ* **111** 419 (1997)
95. Лисица В С, Савельев Ю А *ЖЭТФ* **92** 484 (1987)
96. Головинский П А, Долгополов М А *ТМФ* **95** 418 (1993)
97. Макаров А А *ЖЭТФ* **85** 1192 (1983)
98. Касьянов В А, Старостин А Н *ЖЭТФ* **76** 944 (1979)
99. Касьянов В А, Старостин А Н *Квант. электрон.* **8** 1059 (1981)
100. Rizzo J E, Klewe R C *Brit. J. Appl. Phys.* **17** 1137 (1966)
101. Трахтенберг Л И *Оптика и спектроск.* **44** 863 (1978)
102. Kracke G et al. *J. Phys. B* **27** 3241 (1994)
103. Астапенко В А *ЖЭТФ* **115** 1619 (1999)
104. Astapenko V A *Laser Phys.* **9** 1032 (1999)
105. Verkhovtzeva E T, Gnatchenko E V, Pogrebnyak P S *J. Phys. B* **16** L613 (1983)
106. Зимкина Т М, Шулаков А С, Брайко А П *ФТТ* **23** 2006 (1981)
107. Зимкина Т М и др. *ФТТ* **25** 26 (1983)
108. Верховцева Э Т и др. *ЖЭТФ* **98** 797 (1990)
109. Ткаченко А А, Гнатченко Е В, Верховцева Э Т *Оптика и спектроск.* **78** 208 (1995)
110. Bethe H, Heitler W *Proc. R. Soc. London Ser. A* **146** 83 (1934)
111. Блажевич С В и др. *Письма в ЖЭТФ* **59** 498 (1994)
112. Blazhevich S V et al. *Phys. Lett. A* **211** 309 (1996)
113. Blazhevich S V et al. *Phys. Lett. A* **254** 230 (1999)
114. Блажевич С В и др. *Изв. вузов. Физика* **44** 66 (2001)
115. Kleiner V L, Nasonov N N, Safronov A G *Phys. Status Solidi B* **181** 223 (1994)
116. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Теория поля* (М.: Наука, 1973)
117. Schnopper H W et al. *Phys. Lett. A* **47** 61 (1974)
118. Saris F W et al. *Phys. Rev. Lett.* **28** 717 (1972)
119. Kienle P et al. *Phys. Rev. Lett.* **31** 1099 (1973)
120. Jakubassa D H, Kleber M Z. *Phys. A* **48** R2515 (1995)
121. Weingartshofer A et al. *Phys. Rev. Lett.* **39** 269 (1977)
122. Kroll N M, Watson K M *Phys. Rev. A* **8** 804 (1973)
123. Beilin E L, Zon B A *J. Phys. B* **16** L159 (1983)
124. Wallbank B, Holmes J K *Phys. Rev. A* **48** R2515 (1993)
125. Varro S, Ehloltzky F *Phys. Lett. A* **203** 203 (1995)
126. Jannssen J C. R. *Acad. Sci* **101** 649 (1885)
127. Tabisz G C, Allin E J, Welsh H L *Can. J. Phys.* **47** 2859 (1969)
128. Смирнов Б М *Асимптотические методы в теории атомных столкновений* (М.: Атомиздат, 1973)
129. Bosomworth D R, Gush H P *Can. J. Phys.* **43** 751 (1965)
130. Buontempo U et al. *Chem. Phys.* **66** 1278 (1977)
131. Herzberg G *Astrophys. J.* **115** 337 (1952)
132. Buimistrov V M *Phys. Lett. A* **30** 136 (1969)
133. Mason N J *Rep. Prog. Phys.* **56** 1275 (1993)
134. Бейгман И Л, Чичков Б Н *Письма в ЖЭТФ* **46** 395 (1987)
135. Liefeld R J, Burr A F, Chamberlain M B *Phys. Rev. A* **9** 316 (1974)
136. Chamberlain M B, Burr A F, Liefeld R J *Phys. Rev. A* **9** 663 (1974)
137. Wendin G, Nuroh K *Phys. Rev. Lett.* **39** 48 (1977)
138. Nuroh K, in *VI Int. Conf. VUV Rad. Phys.*, Ext. Abstracts. Vol. 1 (Virginia, USA, 1980) p. 1
139. Connerade J P, Solovoyov A V *J. Phys. B* **29** 3529 (1996)
140. Smirnov B M *Clusters and Small Particles: in Gases and Plasmas* (New York: Springer, 2000)
141. Brechignac C, Connerade J P *J. Phys. B* **27** 3795 (1994)
142. Frommhold L *Phys. Rev. E* **58** 1899 (1998)
143. Frommhold L, Hammer D, Private communication (2001)

Polarization effects in atomic transitions

V.A. Astapenko

Moscow Physico-Technical Institute
141700 Dolgoprudnyi, Moskovskaya obl., Institutskii per. 9, Russian Federation
Tel. (7-095) 576-3255. Fax (7-095) 408-6155
E-mail: astval@hotmail.com

L.A. Bureeva

Institute of Spectroscopy, Russian Academy of Sciences
142190 Troitsk, Moskovskaya obl., Russian Federation
Tel. (7-095) 135-1420. Fax (7-095) 132-6508
E-mail: bureeva@sci.lebedev.ru

V.S. Lisitsa

Russian Research Centre 'Kurchatov Institute', Institute of Nuclear Fusion
pl. Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russian Federation
Tel. (7-095) 196-7334. Fax (7-095) 943-0073
E-mail: lisitsa@nfi.kiae.ru

In this review an attempt is made to provide a unified description of various types of atomic core polarization effects in the free-free, free-bound and bound-bound transitions of charged particles in the field of a multielectron atom — effects that have generally been treated independently in various contexts for over 40 years. For all types of transitions, both classical and quantum models are used for describing the scattering and energy re-emission of a particle interacting with the atomic core. Experimental and theoretical results are given for the oscillator strengths of atoms and multiply charged ions; polarization phenomena associated with the photoeffect; a new polarization recombination channel; and the Bremsstrahlung of electrons and relativistic and heavy particles on complex atoms and ions.

PACS numbers: 32.10.Dk, 32.80.Cy, 34.80.Dp

Bibliography — 143 references

Received 31 May 2001, revised 31 July 2001