УДК 539.186

О НАХОЖДЕНИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ПОГЛОЩЕНИЯ СВЕТА В СВОБОДНО-СВОБОДНЫХ ПЕРЕХОДАХ

В. Д. Кукин, В. С. Ростовский, Н. П. Юдин

(кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

Рассмотрен метод вычисления матричного элемента электрического дипольного перехода между состояниями непрерывного спектра. Получены рекуррентные формулы для расчета вклада в матричный элемент от интеграла по области вне атома по значениям волновых функций и их производных на границе.

1. Как известно [1—4], при нахождении коэффициентов поглощения фотонов в нагретых газах (плазме) или излучательной способности нагретых газов необходимо учитывать свободно-свободные электронные переходы, т. е. такие переходы, в которых начальное и конечное состояния электрона принадлежат непрерывному спектру. Согласно основным принципам квантовой теории [5], вероятность $w(p, \omega)$ поглощения фотона с частотой ω электроном с импульсом p и сечение $d\sigma(p', \omega)/d\omega$ тормозного излучения электроном с импульсом p' даются следующей формулой:

$$w(p, \omega)=\frac{\pi^2 p'^2}{8\alpha^3 p\omega^2} n_e n_A \frac{d\sigma(p', \omega)}{d\omega}=$$

$$=\frac{64\pi^2}{3} n_e n_A \frac{\omega}{p^2 p'} \sum_{l=0}^{\infty} l_> |R_{l',l}(p', p)|^2. \tag{1}$$

Здесь n_e, n_A — концентрации электронов и ионов,

$$\omega=(p')^2-p^2; \tag{2}$$

$$R_{l',l}(p', p)=\int_0^{\infty} rP_{E'l'}(r)\, P_{El}(r)\, dr, \tag{3}$$

$P_{El}(r)$ — радиальные части волновых функций электронов, вне атома удовлетворяющие уравнению с чисто кулоновским потенциалом

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2z}{r}-E\right] P_{E,l}(r)=0 \tag{4}$$

и ведущие себя асимптотически как

$$P_{E,l}(r)\sim\frac{1}{\sqrt{\pi p}}\sin\left(pr+\frac{z}{p}\ln(2pr)-\frac{\pi l}{2}+\arg\left(1+l-i\frac{z}{p}\right)+\delta_l\right), \tag{5}$$

где z — заряд атомного остатка, $E=p^2$ — энергия, δ_l — сдвиг фазы из-за некулоновости потенциала; система единиц — атомная, энергия — в ридбергах, нормировка — на δ-функцию по энергии.

Легко видеть, что интеграл (3) не имеет определенного значения на верхнем пределе и, следовательно, при нахождении амплитуд свободно-свободных переходов возникает не совсем тривиальная задача о выделении из него физически осмысленных значений. Естественно, что эта проблема была замечена давно [1], и в случае чисто кулоновского поля, когда интегралы берутся в явном виде, был указан разумный рецепт выделения физических значений интегралов перекрытия. Однако для полей, отличных от кулоновского поля точечного заряда, когда приходится проводить разложение по парциальным волнам и использовать расчеты на ЭВМ, общего решения вопроса не существует. Водородоподобные оценки хороши для высоких орбитальных моментов [7]. Для не слишком высоких энергий применяются оценки матричного элемента в доминирующей области, вне атома [8]. При этом вклад внутренней области учитывается лишь косвенно, по сдвигу фазы, полученному из квантового дефекта. В работе [9] матричный элемент (3) внутри атома находится численно, а во внешней области оценивается по квазиклассике.

Одному из способов расчета радиального матричного элемента перехода (3) и посвящена настоящая работа.

2. Как известно [6, 3], неопределенность интеграла в (3) возникает из-за того, что «слишком рано», т. е. до вычисления амплитуд поглощения фотонов, совершается переход от пространственно локализованных волновых пакетов к нелокализованным стационарным состояниям непрерывного спектра. Поэтому рецепт выделения физических амплитуд из интеграла (3) сводится к тому, чтобы либо с самого начала работать с волновыми пакетами, либо включить в (3) «фактор сходимости» $e^{-\lambda r}$ и после завершения расчетов устремить λ к нулю. Технически более простым оказывается второй рецепт, и мы в дальнейшем будем следовать именно ему. Таким образом, радиальный интеграл (3) мы будем записывать в виде

$$R_{l',l}(p', p) = \lim_{\lambda\to 0} \int\limits_0^\infty P_{E'l'}(r)\, P_{El}(r)\, e^{-\lambda r}\, r dr. \tag{6}$$

Разобьем область интегрирования в (6) на две части — от нуля до a и от a до ∞. Граничной точкой может служить любая достаточно удаленная точка вне атома, т. е. в области, где потенциал чисто кулоновский. Более точные ограничения на a будут указаны ниже.

Как правило, во внутренней области потенциал отличен от кулоновского и волновые функции $P(r)$ находятся численным интегрированием уравнения типа (4). Поэтому интегрирование в (6) по внутренней области, от 0 до a, тоже проводится численно и никаких затруднений не вызывает. Однако интеграл по внешней области, $a \leqslant r < \infty$, в длинноволновом приближении также может дать заметный вклад в амплитуды (6). Ниже будет показано, что значение этого «внешнего» интеграла может быть представлено в виде асимптотического ряда по степеням $1/a$. Коэффициенты этого ряда находятся по рекуррентным формулам и в конечном счете могут быть выражены через значения волновых функций и их производных в точке $r=a$.

Рассмотрим несколько более общую функцию

$$R^n_{\text{asimp}} = \lim_{\lambda\to 0} \int\limits_a^\infty r^n P_1(r)\, P_2(r)\, e^{-\lambda r}\, dr, \tag{7}$$

где P_1 и P_2 — два решения уравнения (4). Покажем, что $R^n{}_{\text{asimp}}$ может быть представлена в виде асимптотического ряда. Для удобства записи вводим безразмерные величины

$$L = l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1);\ M = l_1(l_1+1) - l_2(l_2+1);$$

$$\gamma = (E_1+E_2)/(E_1-E_2),$$

параметр обратной длины $\mu=\sqrt{E_1-E_2}$ и два безразмерных «параметра малости» $\alpha=4z/(a\mu^2)$ и $\beta=1/(\mu a)$, оба $\sim 1/a$. Вводим также набор базисных функций

$$v_1(r)=\frac{1}{\mu}P_1P_2;\quad v_2(r)=\frac{2}{\mu^3}P_1'P_2';$$
$$v_3(r)=\frac{1}{\mu^2}(P_1P_2'+P_1'P_2);\quad v_4(r)=\frac{1}{\mu^2}(P_1P_2'-P_1'P_2), \tag{8}$$

где $P'=dP/dr$, и вспомогательных величин

$$g_i^{(n)}(a)=\mu\frac{1}{a^n}\lim_{\lambda\to 0}\int_a^\infty r^n v_i(r)\,e^{-\lambda r}\,dr,\quad i=1,\ 2,\ 3,\ 4. \tag{9}$$

В частности, $\overline{R}^n_{\text{asimp}}=a^n g_1^{(n)}$.

Подставим $\Phi(r)=(r/a)^n v_i(r)$ в очевидную формулу

$$\Phi(a)+\lim_{\lambda\to 0}\int_a^\infty\frac{d\Phi}{dr}e^{-\lambda r}\,dr=0$$

и заменим с помощью уравнения (4) производные v_i' через сами функции v_i. При этом получается система рекуррентных уравнений для $g_i^{(n)}$, которую удобнее записать в матричной форме

$$Fg^{(m)}=v+G(m)\,g^{(m-1)}+Hg^{(m-2)}, \tag{10}$$

где

$$v=\begin{pmatrix}v_1\\v_2\\v_3\\v_4\end{pmatrix};\quad g^{(m)}=\begin{pmatrix}g_1^{(m)}\\g_2^{(m)}\\g_3^{(m)}\\g_4^{(m)}\end{pmatrix};$$

$$F=\begin{pmatrix}0&0&-1&0\\0&0&\gamma&1\\\gamma&-1&0&0\\-1&0&0&0\end{pmatrix};\quad G(m)=\begin{pmatrix}\beta m&0&0&0\\0&\beta m&-\alpha&0\\-\alpha&0&\beta m&0\\0&0&0&\beta m\end{pmatrix};$$

$$H=\beta^2\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&L&M\\L&0&0&0\\-M&0&0&0\end{pmatrix}. \tag{11}$$

Все элементы матриц G и H содержат параметры малости α и β (условием малости $\alpha\ll 1$ и $\beta\ll 1$ определяется выбор граничной точки $r=a$), поэтому формулы (10) позволяют получить асимптотически сходящийся ряд по степеням параметров малости α и β для нахождения $g_i^{(n)}$. Если обрезать его (при достаточно удаленных отрицательных значениях $m=n+2-N$) и ввести для краткости записи новые матрицы

$$S=F^{-1};\quad B(m)=G(m)S;\quad C=HS, \tag{12}$$

искомые $g^{(n)}$ могут быть записаны в виде

$$g^{(n)} = \Big(\sum_{m\geqslant 0}^{N} D^{(m)}(n) \Big) v, \tag{13}$$

где матрицы $D^{(m)}(n)$ находятся по рекуррентной формуле

$$D^{(0)} = 0, \quad D^{(1)}(n) = S; \quad D^{(m+2)}(n) = D^{(m+1)}(n)\, B(n-m) + D^{(m)}(n)\, H. \tag{14}$$

Приведем вид матриц S, $B(m)$ и C:

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -\gamma \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad B(m) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\beta m \\ \alpha & 0 & -\beta m & -\beta m\gamma \\ -\beta m & 0 & 0 & \alpha \\ \beta m\gamma & \beta m & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$C = \beta^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma M - L & M & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -L \\ 0 & 0 & 0 & M \end{pmatrix}. \tag{12a}$$

Так как для вычисления матричных элементов (7) достаточно знать лишь первую строку матричного равенства (13),

$$R^{n}_{\text{asimp}} = a^n g^{(n)}_1 = a^n \Big(\sum_{m\geqslant 0}^{N} D^{(m)}(n) \Big)_{1i} v_i,$$

то, вводя для первой строки матрицы D особое обозначение A, $A_i = D_{1i}$, искомый результат можно записать в виде

$$R^{(n)}_{\text{asimp}} = a^n \Big(\sum_{m\geqslant 1}^{N} A^{(m)}_i(n) \Big) v_i,$$

где

$$\begin{gathered} A^{(0)}_i = \{0,\ 0,\ 0,\ 0\}; \quad A^{(1)}_i = \{0,\ 0,\ 0,\ -1\}, \\ A^{(m+2)}_i(n) = A^{(m+1)}_j B_{ji}(n-m) + A^{(m)}_j C_{ji}, \end{gathered} \tag{15}$$

или в явном виде

$$\begin{aligned} A^{(m+2)}_1(n) &= [\alpha A^{(m+1)}_2 - \beta(n-m) A^{(m+1)}_3 + \beta\gamma(n-m) A^{(m+1)}_4] + \\ &+ \beta^2 [(\gamma L - M) A^{(m)}_2]; \\ A^{(m+2)}_2(n) &= [-\beta(n-m) A^{(m+1)}_4] + \beta^2 [M A^{(m)}_2]; \\ A^{(m+2)}_3(n) &= [-\beta(n-m) A^{(m+1)}_2]; \\ A^{(m+2)}_4(n) &= [-\beta(n-m) A^{(m+1)}_1 - \beta\gamma(n-m) A^{(m+1)}_2 + \alpha A^{(m+1)}_3] + \\ &+ \beta^2 [-L A^{(m)}_3 + M A^{(m)}_4]. \end{aligned} \tag{16}$$

Формулы (15), (16) содержат интересующий нас результат, т. е. позволяют вычислить асимптотическую часть (7) матричного элемента

(3). Еще раз напомним, что ряды (13) и (15) — асимптотические и должны быть оборваны до того, как члены ряда начнут возрастать, т. е. пока все элементы матрицы B малы (что определяется подбором подходящих граничного радиуса a и номера N обрезания ряда (15), $|\beta\gamma(n-2+N)|\leqslant 1$).

3. Подведем итоги. Предложенная нами методика позволяет провести вычисление радиальной части матричного элемента (3) перехода любой мультипольности для электрона в произвольном поле. При этом во внутренней области волновые функции и интеграл находятся численно, а во внешней области условно сходящийся интеграл выражается через значения функций и их производных на границе в виде асимптотического ряда.

Заметим, что все полученные формулы применимы также и для частного случая $z=0$, т. е. для переходов в поле нейтрального атома с потенциалом, убывающим быстрее $1/r$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Sommerfeld A., Mane A.//Ann. Phys. 1935. **23**. P. 589. [2] Бабиков В.//Физика плазмы и проблемы управляемых термоядерных реакций. М., 1958. Т. 2. С. 226. [3] Фирсов О. Б., Чибисов М. И.//ЖЭТФ. 1960. **39**. С. 1770. [4] Касьянов В., Старостин А.//ЖЭТФ. 1965. **48**. С. 295. [5] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1974. [6] Гольдбергер М., Ватсон К. Теория столкновений. М., 1967. [7] Burgess A., Hummer D. H., Tully J. A.// //Phil. Trans. 1970. **A266**. P. 225. [8] Peach G.//Mem. Roy. Astr. Soc. 1967. **71**. P. 13. [9] Summers H. P. Preprint JET-P(86)06.

Поступила в редакцию
26.06.87

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1988. Т. 29, № 6

УДК 535.241.13:534.23.8

СПЕКТРАЛЬНЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА АКУСТООПТИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ НА ОГРАНИЧЕННОМ ЗВУКОВОМ ПУЧКЕ

М. А. Воронова, В. Н. Парыгин

(*кафедра физики колебаний*)

Решается задача дифракции Брэгга на ограниченном звуковом столбе с помощью нового метода, использующего четырехмерное спектральное представление светового и звукового пучков.

Решение задачи дифракции светового пучка на звуковом пучке произвольной конфигурации представляет большой интерес в акустооптических приложениях. На сегодняшний день эта задача полностью не решена, так как в рамках существующих методов она представляется очень сложной и трудоемкой. В настоящей работе предлагается новый подход к такого класса задачам. Он опирается на изложенный в [1] метод расчета дифракции расходящейся световой волны на произвольном акустическом сигнале. Существенное отличие состоит в том, что распределение поля в пучках представляется через четырехмерный спектр. Это значительно упрощает результаты.

Рассмотрим применение спектрального метода для оптически изотропного случая. Введем обозначения: $\mathbf{r}=\left\{x,\ y,\ z,\ i\dfrac{c}{n}t\right\}$ — четырехмерный вектор координаты, $\mathbf{k}=\left\{k_x,\ k_y,\ k_z,\ \dfrac{i\omega}{c}n\right\}$ — четырехмер-