

РАДИАЦИОННЫЕ ПОТЕРИ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ РАССЕЯНИИ НА ТОМАС-ФЕРМИЕВСКОМ АТОМЕ

В. А. Астапенко^{a}, Л. А. Буреева^b, В. С. Лисица^c*

^a *Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

^b *Научный совет по спектроскопии Российской академии наук
117924, Москва, Россия*

^c *Российский научный центр «Курчатовский институт»
123481, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 5 июля 2001 г.

Представлена универсальная теория и результаты расчетов тормозного излучения электронов на сложных атомах с учетом динамической поляризации остова в диапазоне энергий от 0.5 до 10 кэВ, характерном для радиационных потерь энергии в горячей плазме с тяжелыми ионами. В основе рассмотрения лежит статистическая модель атома и квазиклассическое приближение для налетающего электрона. Модель учитывает проникновение налетающего электрона в атомный остов, оказывающее существенное влияние на соотношение поляризационного и статического каналов излучения. Прослежен вклад поляризационного канала как в спектральные, так и полные радиационные потери электронов при различных излучаемых частотах, зарядах ядра и энергиях налетающей частицы. Показано, что вклад поляризационного канала оказывается сравнимым с рассчитанным ранее вкладом статического канала в широком диапазоне параметров. Результаты модели находятся в разумном количественном соответствии с детальными квантовомеханическими расчетами, выполненными для отдельных атомов.

PACS: 34.80.Lx

1. ВВЕДЕНИЕ

Радиационные потери электронов в непрерывном спектре при рассеянии на тяжелых атомах связаны с их тормозным излучением в поле атомного потенциала (ниже мы не рассматриваем потери, обусловленные возбуждением атомных электронов и соответствующие дискретному спектру излучения). Особенностью этих процессов является проникновение налетающего электрона внутрь атомного остова, приводящее к увеличению эффективного заряда, с которым взаимодействует электрон. Вследствие этого эффекта зависимость спектра тормозного излучения от частоты имеет возрастающий характер, а в чисто кулоновском поле — убывающий (см. обзор [1]). Указанное явление играет важную роль в диагностике и радиационных потерях плазмы с тяжелыми ионами, обладающими значительным элект-

ронным остовом. Фактически речь идет о взаимодействии электронов с энергией от 0.5 до 10 кэВ с атомами с зарядом ядра более 20.

Расчеты тормозного излучения в статическом атомном потенциале проводились различными методами: в рамках борновского приближения [2], на основании полуклассического подхода [3], численным решением уравнения Шредингера в потенциале Томаса–Ферми [4, 5], методом самосогласованного поля [6], квазиклассическим методом [7]. В последнем случае было показано, что для умеренных энергий электронов, характерных для плазмы, классическое приближение для атомных потенциалов является точным. Более того, при расчетах спектров в области высоких частот, ответственных за наибольшие потери энергии электроном, возможно использование так называемого «вращательного приближения», которое учитывает излучение с наиболее искривленного участка траектории электрона в

*E-mail: astval@hotmail.com

атомном потенциале. В рамках этого приближения спектр тормозного излучения целиком определяется динамикой рассеяния электрона и выражается в виде функционала от этого потенциала (подробнее см. [1, 7], а также ниже). Подробное сравнение результатов классического и квантового расчетов подтвердило высокую точность классического метода. Она составляет около 5% для чисто кулоновского потенциала и колеблется в зависимости от структуры ионного остова в пределах 20% для сложных ионов.

Несмотря на хорошее в целом соответствие между указанными теориями, основанными на статическом потенциале электрон-атомного взаимодействия, сравнение расчетных данных [6] с экспериментальными [8] показывает систематическое расхождение данных для атомов с большим значением заряда ядра ($Z > 60$), особенно заметное в низкочастотном диапазоне.

Указанное расхождение теории с экспериментом может быть обусловлено рядом причин, в том числе и вкладом поляризационного канала, связанного с динамической поляризацией атомного остова, которая не учитывается при рассмотрении обычного (статического) тормозного излучения. Многочисленные расчеты поляризационного тормозного излучения (ПТИ) указывают на то, что вклад этого процесса может быть сравним и даже превосходить вклад статического канала. Детальный квантовомеханический расчет ПТИ на многоэлектронном атоме в широком спектральном диапазоне был проведен в [10] для криптона методом случайных фаз с обменом. Расчеты спектров ПТИ, аналогичные вычислениям, выполненным для статического потенциала [7], проведены в настоящей работе. В качестве рабочей теоретической модели выбрана статистическая модель атома и квазиклассическое приближение, аналогичное использованному в работе [7] для статического тормозного излучения (СТИ). Тем самым оказывается возможным прямое сравнение ПТИ и СТИ для всех типов атомов, широкого диапазона частот излучаемых квантов и энергий налетающих частиц.

2. ВРАЩАТЕЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ В ТЕОРИИ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ТОРМОЗНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Как отмечалось во Введении, вращательное приближение успешно применялось в расчетах статического излучения квазиклассических электронов на атомном потенциале [7]. Высокая точность этого метода сочетается с простотой вычислений. Выраже-

ние для спектрального эффективного излучения по статическому каналу, впервые полученное в [7], имеет вид (в работе используются атомные единицы измерения)

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

Здесь A — нормировочный множитель, $U(r)$ — атомный потенциал,

$$f_{st}(r) = -\frac{dU}{dr} = \frac{Z_{eff}(r)}{r^2} \quad (2)$$

— обычная «статическая» сила, действующая на налетающий электрон, $Z_{eff}(r)$ — эффективный заряд атома на расстоянии r от ядра, T — начальная кинетическая энергия налетающей частицы, $\omega_{rot}(r)$ — «вращательная» частота, определяемая равенством

$$\omega_{rot}(r, T) = \frac{\sqrt{2(T + |U(r)|)}}{r}. \quad (3)$$

Величина $\omega_{rot}(r, T)$ естественно возникает в квазиклассическом пределе матричных элементов, определяющих спектр тормозного излучения в атомном потенциале. Введение дельта-функции в уравнение (1) означает преобладание матричных элементов с разностью частот $\omega - \omega_{rot}$ над соответствующими матричными элементами с их суммой (см. [7]). Поскольку те же квазиклассические волновые функции налетающего электрона фигурируют и при расчете поляризационного тормозного излучения, естественно использовать вращательное приближение также и для поляризационного канала.

Простейший вариант вращательного приближения в теории ПТИ состоит в замене в формуле (1) «статической» силы на «поляризационную» [11]. Поляризационная сила, зависящая от частоты, определяется выражением

$$f_{pol}(r, \omega) = \frac{N_{pol}(r, \omega)}{r^2}, \quad (4)$$

где $N_{pol}(r, \omega)$ — эффективный заряд атомного остова, обуславливающий излучение на частоте ω по поляризационному каналу. В модели локальной электронной плотности [11] он может быть представлен в виде

$$N_{pol}(r, \omega) = \omega^2 \left| \int_0^r \beta(r', \omega) 4\pi r'^2 dr' \right|. \quad (5)$$

Здесь $\beta(r, \omega)$ — пространственная плотность динамической поляризуемости мишени, для которой в дальнейшем будем использовать приближение Брандта–Лундквиста [12], соответствующее статистической плазменной модели атома:

$$\beta(r, \omega) = \frac{n(r)}{4\pi n(r) - \omega^2 - i0}, \quad (6)$$

где $n(r)$ — локальная электронная плотность атомного остова. Наличие текущего радиуса (расстояния до ядра) в верхнем пределе интегрирования формулы (5) описывает проникновение налетающего электрона в остов мишени и связанные с этим эффекты (см. ниже).

Следует отметить, что введение поляризационной силы (4)–(6) является в значительной степени условным, поскольку она определяется как действительной, так и мнимой частью поляризуемости (6). Возможная интерференция статического и поляризационного каналов излучения может быть связана только с действительной частью. Относительная малость интерференционных эффектов, подтверждаемая численными расчетами [10], связана с тем, что поляризационные эффекты пропорциональны, согласно (5), квадрату излучаемой частоты ω^2 , и потому вклад действительной части поляризуемости может быть замечен при достаточно больших ω . Однако из-за проникновения налетающего электрона в остов эффективный заряд остова (5) уменьшается, тогда как эффективный заряд Z_{eff} увеличивается, поэтому интерференционные члены численно малы. Таким образом, малость интерференционного вклада обусловлена эффектами проникновения налетающего

электрона в остов мишени, которые существенны в рассматриваемом диапазоне частот и энергий. Следует отметить, что интерференция статического и поляризационного каналов может играть важную роль в тех случаях, когда указанным проникновением можно пренебречь [13], либо оно не существенно [14].

Подход, основанный на (5), (6), можно назвать приближением локальной плазменной частоты. Он адекватен рассмотрению поляризационных эффектов в рамках статистических моделей атома.

Подставляя (4) в (1), получаем для спектральных потерь энергии на излучение по поляризационному каналу в рамках вращательного приближения следующее выражение:

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{pol}^{rot} = \frac{8\pi A}{3c^3\sqrt{2T}} \int_0^\infty N_{pol}^2(r, \omega) \times \sqrt{1 + \frac{|U(r)|}{T}} \delta(\omega - \omega_{rot}(r)) r^{-2} dr. \quad (7)$$

Здесь уместно отметить малость электростатического взаимодействия электронов друг с другом по сравнению с их взаимодействием с ядром, превышающим, как известно, первое в 7 раз в модели Томаса–Ферми (см. задачу к п. 70 [15]). Это обстоятельство позволяет при рассмотрении ПТИ использовать ту же траекторию движения налетающего электрона, что и при СТИ.

Наличие дельта-функции в (1) и (7) позволяет провести интегрирование в явном виде. Тогда с учетом (3) находим для статического канала (ср. [7]):

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{st}^{rot} = \frac{8\sqrt{3}\pi\omega}{3c^3\sqrt{2T}} \frac{Z_{eff}^2(r_{eff}(\omega, T))}{\omega^2 r_{eff}^3(\omega, T) + Z_{eff}(r_{eff}(\omega, T))} \sqrt{1 + \frac{|U(r_{eff}(\omega, T))|}{T}} r_{eff}^2(\omega, T). \quad (8)$$

Аналогично, для поляризационного канала имеем

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{pol}^{rot} = \frac{8\sqrt{3}\pi\omega}{3c^3\sqrt{2T}} \frac{N_{pol}^2(r_{eff}(\omega, T), \omega)}{\omega^2 r_{eff}^3(\omega, T) + Z_{eff}(r_{eff}(\omega, T))} \sqrt{1 + \frac{|U(r_{eff}(\omega, T))|}{T}} r_{eff}^2(\omega, T). \quad (9)$$

В формулах (8), (9) введен характерный радиус излучения во вращательном приближении r_{eff} [1, 7], определяемый из уравнения

$$2(T + |U(r)|) = \omega^2 r^2. \quad (10)$$

Физический смысл (10) заключается в том, что излучение в рассматриваемом подходе определяется

расстоянием до ядра мишени, на котором частота излучения совпадает с угловой скоростью вращения классического электрона в поле атома в точке максимального сближения.

Из формул (8), (9) следует выражение для спектрального R -фактора во вращательном приближении:

$$R^{(rot)}(\omega, T) = \left\{ \frac{d\kappa_{pol}(\omega, T)}{d\kappa_{st}(\omega, T)} \right\}^{(rot)} = \left[\frac{N_{pol}(r, \omega)}{Z_{eff}(r)} \right]_{r=r_{eff}(\omega, T)}^2. \quad (11)$$

Выражение для полных энергетических потерь на тормозное излучение по статическому и поляризованному каналам можно получить, проинтегрировав (8), (9) по частоте до начальной кинетической энергии T . С другой стороны, это интегрирование можно провести в формулах (1) и (7), содержащих дельта-функцию. Тогда для полного эффективного излучения по каждому из каналов имеем

$$\kappa_{st} = \frac{8\sqrt{3}\pi}{3c^3\sqrt{2T}} \times \int_{r_{eff}(T, T)}^{\infty} Z_{eff}^2(r) \sqrt{1 + \frac{|U(r)|}{T}} r^{-2} dr, \quad (12)$$

$$\kappa_{pol}^{rot} = \frac{8\sqrt{3}\pi}{3c^3\sqrt{2T}} \int_{r_{eff}(T, T)}^{\infty} N_{pol}^2(r, \omega_{rot}(r, T)) \times \sqrt{1 + \frac{|U(r)|}{T}} r^{-2} dr. \quad (13)$$

Таким образом, формулы (8), (9) и (12), (13) с учетом (3), (5), (6) дают решение поставленной задачи для квазиклассических электронов в общем виде, если известен потенциал мишени и электронная плотность ее остова. Ниже данный подход будет использован для вычисления спектральных и полных энергетических потерь в рамках статистической модели атома.

3. ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ ЗАРЯД В РАМКАХ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АТОМА

Как видно из выражений (9), (13), ключевой величиной, определяющей в рассматриваемом приближении излучение по поляризованному каналу, является зависящий от частоты эффективный поляризацонный заряд $N_{pol}(r, \omega)$, на свойствах которого мы остановимся в данном разделе.

Сначала запишем общие соотношения для поляризацонного заряда в приближении локальной электронной плотности, вытекающие из формул (5),

(6). Легко видеть, что N_{pol} удовлетворяет правильной высокочастотной асимптотике,

$$N_{pol}^{\infty}(r) = N_{pol}(r, \omega \rightarrow \infty) = N_e(r) = \int_0^r 4\pi n(r) r^2 dr, \quad (14)$$

следующей также и из квантовомеханического выражения для поляризуемости. Здесь $N_e(r)$ — число атомных электронов в сфере радиуса r . Естественно, что для $r > R_0$ (R_0 — размер атома) величина $N_e(r)$ равна полному числу электронов в остове мишени N_{0e} .

В низкочастотном пределе из (5), (6) получаем

$$N_{pol}^{(0)}(r, \omega) = \omega^2 \left[\theta(r - R_0) \frac{R_0^3}{3} + \theta(R_0 - r) \frac{r^3}{3} \right]. \quad (15)$$

Заметим, что следующее из (15) выражение для статической дипольной поляризуемости мишени

$$\alpha_0 = \omega^{-2} N_{pol}^{(0)}(r > R_0, \omega) = \frac{R_0^3}{3}$$

дает для атомов и ионов с замкнутыми оболочками и достаточно большим числом связанных электронов $N_{0e} \geq 30$ разумную точность, если размер атома (иона) рассчитывается в модели Томаса–Ферми–Дирака [11].

В статистических моделях электронную плотность остова нейтрального атома, определяющую поляризацонный заряд (см. (5), (6)), можно представить в виде [15]

$$n(r) = Z^2 f \left(\frac{r}{r_{TF}} \right). \quad (16)$$

Здесь $r_{TF} = b/Z^{1/3}$ — радиус Томаса–Ферми, Z — заряд ядра,

$$b = \left(\frac{9\pi^2}{128} \right)^{1/3} \approx 0.8853.$$

Вид функции $f(x)$ определяется выбором статистической модели. В модели Томаса–Ферми имеем [15]

$$f_{TF} = \frac{1}{4\pi b^3} \left(\frac{\chi(x)}{x} \right)^{3/2}, \quad (17)$$

где $\chi(x)$ — функция Томаса–Ферми. Приведем также выражение для $f(x)$ в статистической модели Ленца–Йенсена, лучше описывающее поведение электронной плотности на больших расстояниях от ядра [16]:

$$f_{LJ}(x) \approx 3.7e^{-\sqrt{9.7x}} \frac{(1 + 0.26\sqrt{9.7x})^3}{(9.7x)^{3/2}}. \quad (18)$$

Отметим, что для $x \leq 1$ функции (17) и (18) дают практически совпадающие результаты.

Подставляя в (5), (6) формулы (16), (17) получаем в модели Томаса–Ферми следующее представление для поляризационного заряда:

$$N_{pol}(r, \omega, Z) = Zg\left(\frac{r}{r_{TF}}, \frac{\omega}{Z}\right). \quad (19)$$

Здесь введена универсальная функция

$$g(x, \nu) = \nu^2 \left| \int_0^x \frac{\chi^{3/2}(x') \sqrt{x'} dx'}{b^{-3} (\chi(x')/x')^{3/2} - \nu^2 - i0} \right|, \quad (20)$$

представляющая собой нормированный на полное число атомных электронов поляризационный заряд как функцию безразмерного расстояния $x = r/r_{TF}$ и приведенной частоты $\nu = \omega/Z$. Формулы (19), (20) дают универсальное представление поляризационного заряда в модели Томаса–Ферми.

Заметим, что (19), (20) обобщают однопараметрический закон подобия для дипольной поляризуемости атома Томаса–Ферми, впервые полученный в [17], на случай двух переменных. Дипольный предел для величины N_{pol} получается из (19), (20), если верхний предел интегрирования в (20) заменить на бесконечность: $g^{dip}(\nu) = g(x \rightarrow \infty, \nu)$.

Сравнение результатов расчета в рамках рассматриваемого подхода реальной и мнимой частей дипольной поляризуемости атома криптона (умноженных на квадрат частоты) с результатами квантовомеханических вычислений в приближении случайных фаз с обменом, взятых из [10], показывает, что в случае атома Томаса–Ферми метод локальной плазменной частоты усредненным образом описывает точную спектральную зависимость, учитывающую оболочечную структуру атома. Для слеттеровской электронной плотности используемый метод приводит к появлению максимумов и минимумов, связанных с ионизацией электронных подслоев, однако при этом теряется универсальность описания, характерная для атома Томаса–Ферми. Таким образом, можно утверждать, что используемое приближение дает для величины дипольной поляризуемости атома разумную точность, не описывая при этом квантовомеханические особенности распределения атомных электронов.

В дальнейшем нас будет интересовать поляризационный заряд, рассчитанный во вращательном приближении, $N_{pol}^{(rot)}(\omega, T)$, поскольку он учитывает эффекты проникновения налетающих частиц в остов мишени, существенные для квазиклассических элек-

тронов. Соответствующее выражение можно получить с помощью формулы (5) и равенства

$$N_{pol}^{(rot)}(\omega, T) = N_{pol}(r_{eff}(\omega, T), \omega). \quad (21)$$

Здесь $r_{eff}(\omega, T)$ представляет собой решение уравнения (10). Отсюда для нормированного поляризационного заряда во вращательном приближении имеем

$$g^{(rot)}(\nu, t) = g(x_{eff}(\nu, t), \nu), \quad (22)$$

где $t = bT/Z^{4/3}$ — приведенная энергия, $x_{eff}(\nu, t)$ — решение уравнения (10), переписанного через параметры ν и t .

4. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ТОРМОЗНЫЕ ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ РАССЕЙНИИ НА АТОМЕ ТОМАСА–ФЕРМИ

Спектральные потери энергии квазиклассических электронов по обычному (статическому) каналу при рассеянии на атоме Томаса–Ферми рассчитывались в [7] как с использованием вращательного приближения (в области его применимости $\nu > 3t$), так и в низкочастотном диапазоне ($\nu < 3t$) с помощью линейной интерполяции к «транспортному» пределу. Сравнение полученных результатов с результатами квантовомеханических расчетов [6], проведенное в [7], показало высокую точность используемых приближений. В рамках вращательного приближения получим универсальное выражение для спектральных тормозных потерь по поляризационному каналу при рассеянии квазиклассических электронов на томас-фермиевском атоме. Это удобно сделать в терминах R -фактора (11), представляющего собой отношение вкладов поляризационного и статического механизмов излучения. Переходя в формулах (4) и (11) к приведенным переменным, легко получить следующее выражение:

$$\tilde{R}_{TF}^{(rot)}(\nu, t) = \left[\frac{g(x, \nu)}{\chi(x) + x|\chi'(x)|} \right]_{x=x_{eff}(\nu, t)}^2, \quad (23)$$

$$3t < \nu < \nu_{hf} \leq 10.$$

Здесь штрих обозначает дифференцирование по аргументу, $g(x, \nu)$ — нормированный поляризационный заряд, определяемый формулой (20). Максимальная приведенная частота ν_{hf} определяется из закона сохранения энергии и является функцией приведенной начальной энергии и заряда ядра:

$$\nu_{hf} = \frac{Z^{1/3}}{b} t.$$

Переход к обычным частоте и энергии осуществляется с помощью равенства

$$R_{TF}^{(rot)}(\omega, T) = \tilde{R}_{TF}^{(rot)}\left(\frac{\omega}{Z}, \frac{Tb}{Z^{4/3}}\right), \quad (24)$$

$$\frac{b}{Z^{1/3}}T < \omega < T.$$

Таким образом, выражения (23), (24), (20) и определение $x_{eff}(\nu, t)$ дают универсальное (справедливое для всех зарядов ядра) представление для спектрального R -фактора в рассматриваемом подходе. Эти формулы следует дополнить выражением для спектральных потерь по статическому каналу (8), которое для атома Томаса–Ферми выражается через приведенные переменные следующим образом:

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{st}^{rot} = \frac{8\sqrt{3}\pi Z^{2/3}b^{5/2}\nu}{3c^3\sqrt{2t}} \times \left\{ \frac{x^4 [(\chi/x)']^2 \sqrt{1 + \chi/xt}}{b^3x\nu^2 + |(\chi/x)'|} \right\}_{x=x_{eff}(\nu, t)}. \quad (25)$$

Эквивалентное формуле (25) выражение было впервые получено в [7] в терминах фактора Гаунта для вращательного приближения. В кулоновском ($\chi(x) = 1$) и крамерсовском ($x_{eff}^{-1} > t$) пределах из (25) можно получить

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{st}^{rot, Coul} = \left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)^{Kramers} = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}c^3} \frac{Z^2}{T}. \quad (26)$$

Выражение для спектрального излучения по поляризационному каналу получается из (25) путем замены

$$x^2(\chi/x)' \rightarrow g(x, \nu),$$

следующей из (23):

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{pol}^{rot} = \frac{8\sqrt{3}\pi Z^{2/3}b^{5/2}\nu}{3c^3\sqrt{2t}} \times \left\{ \frac{g(x, \nu)^2 \sqrt{1 + \chi/xt}}{b^3x\nu^2 + |(\chi/x)'|} \right\}_{x=x_{eff}(\nu, t)}. \quad (27)$$

Приведем здесь также соответствующее выражение, полученное в [17] в приближении Борна–Бете, в приведенных переменных:

$$\left(\frac{d\kappa}{d\omega}\right)_{pol}^{B-B} = \frac{8}{3c^3} \frac{Z^{2/3}}{t} |g_{dip}(\nu)|^2 \times \ln\left(\frac{1}{\nu} \sqrt{\frac{2t}{b^3}}\right), \quad t > \frac{1}{8bZ^{2/3}}. \quad (28)$$

Здесь $g_{dip}(\nu) = g(x \rightarrow \infty, \nu)$ — нормированный поляризационный заряд (20) в дипольном приближении. Из (28) следует, что в приближении Борна–Бете в отличие от вращательного приближения имеется ограничение на частоту сверху: $\nu < 1.7\sqrt{t}$.

На рис. 1 представлены зависимости эффективного излучения электрона на атоме Томаса–Ферми от приведенной частоты по поляризационному и статическому каналам для двух значений начальной энергии налетающих частиц, рассчитанные в рамках различных приближений. Кривые 1 и 3 описывают поляризационный канал, рассчитанный в рамках соответственно вращательного приближения и приближения Борна–Бете (28). При расчете зависимости 2, относящейся к статическому каналу, в низкочастотном диапазоне был использован фактор Гаунта $g_0(t)$ для атома Томаса–Ферми в «транспортном» пределе. Соответствующая интерполяция для функции $g_0(t)$ была получена с помощью данных работы [18]. Из рис. 1 следует, что вращательное приближение в диапазоне $\nu < t$ дает для поляризационного излучения результат, практически совпадающий с результатом использования приближения Борна–Бете. Заметим, что неравенство $\nu < t$ может быть переписано в виде: $\omega < bT/Z^{1/3}$. Следовательно, для больших Z оно соответствует условию применимости низкочастотного приближения в теории тормозного излучения. В этом случае рассеивающийся на нейтральном атоме электрон слабо возбуждается излучательным процессом, и его движение при расчете поляризационного тормозного излучения можно считать равномерным и прямолинейным даже для медленных электронов [13]. Этим оправдывается адекватность использования приближения Борна–Бете для поляризационного канала в низкочастотном диапазоне. Таким образом, в силу хорошего сопряжения кривых 1 и 3 вращательное приближение мы будем применять для расчета поляризационного излучения во всей рассматриваемой спектральной области. Уменьшение величины $(d\kappa/d\omega)_{pol}^{rot}$ с ростом частоты, изображенное на рис. 1, является следствием эффектов проникновения налетающих частиц в остов мишени, оно, однако, не столь резкое, как это следует из расчета в приближении Борна–Бете. Первоначальный рост $(d\kappa/d\omega)_{pol}$ с ростом частоты, хорошо известный из теории поляризационного тормозного излучения [9], обусловлен фактором ν^2 , входящим в определение поляризационного заряда (20). Таким образом, спектральная зависимость интенсивности поляризационного тормозного излучения имеет максимум, центральная частота которого смещается в область вы-

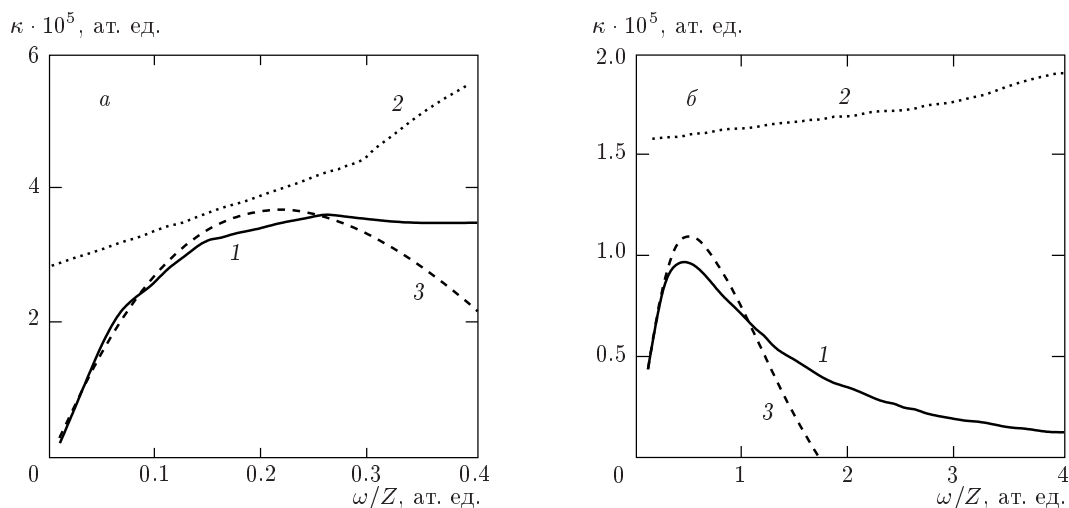


Рис. 1. Спектральное эффективное излучение электрона на атоме Томаса–Ферми ($Z = 60$) в зависимости от приведенной частоты $\nu = \omega/Z$ для различных значений приведенной энергии налетающего электрона $t = 0.1$ (а), 1 (б); 1 — по поляризационному каналу (во вращательном приближении), 2 — по статическому каналу, 3 — по поляризационному каналу (в приближении Борна–Бете)

соких частот с ростом начальной энергии налетающих частиц. Данный факт соответствует выводу работы [17], где в борновском приближении было получено соотношение $\omega_{max} \approx 0.8T$. Из рис. 1 также следует, что в рассматриваемом диапазоне изменения параметров вклад поляризационного канала меньше вклада статического, причем разница возрастает с ростом энергии налетающих частиц.

На рис. 2 представлено спектральное эффективное излучение по статическому и поляризационному каналам электронов с энергией 1 кэВ и 5 кэВ, рассеивающихся на атоме криптона, рассчитанное в настоящей работе (кривые 1, 3) и последовательными квантовомеханическими методами в [10] (кривые 2, 4). Расчет зависимостей для статического канала проводился нами с помощью формулы (23) и упоминавшейся выше процедуры линейной интерполяции в область малых частот $\nu < 3t$ [7]. Отметим, что расчет статического тормозного излучения в [10] был осуществлен в рамках приближения искаженных плоских волн методом суммирования частичных вкладов различных угловых моментов с использованием точного потенциала атома криптона. Видно, что результаты обоих подходов для статического канала очень близки. Небольшое различие кривых 3 и 4 в высокочастотной области связано с определенным произволом выбора верхней частотной границы линейной интерполяции. Для поляризационного канала наш результат сильнее отличается от результата [10], полученного в приближе-

нии случайных фаз с обменом, которое учитывает не только индивидуальные квантовомеханические особенности движения атомных электронов, но и межчастичные корреляционные эффекты. Это различие наиболее существенно вблизи потенциалов ионизации электронных подоболочек, где реальная и мнимая части атомной поляризуемости обладают резонансными структурами. Для электронов с энергией 1 кэВ широкий провал в спектральной зависимости интенсивности ПТИ связан с ионизацией $3d$ -подоболочки атома криптона. В случае электронов с энергией 5 кэВ, показанном на рис. 2б, провал на кривой 2 обусловлен ионизацией $2p$ -подоболочки. Его относительная ширина заметно меньше, поэтому и соответствие результатов используемого подхода с последовательным квантовомеханическим расчетом лучше. Следует отметить, что в [10] (в отличие от настоящей работы) учитывалась также и межканальная интерференция и было показано, что влияние этой интерференции на полную интенсивность тормозного излучения невелико. Интерференционные эффекты наиболее заметны вблизи потенциалов ионизации электронных подоболочек и в высокочастотной области спектра. Они, по-видимому, обуславливают различие кривых 1 и 2 рис. 2б для энергии фотонов, большей 2200 эВ. В целом рис. 2 демонстрирует разумную точность используемого метода для расчета поляризационного тормозного излучения на многоэлектронном атоме.

Отметим, что относительный вклад поляризаци-

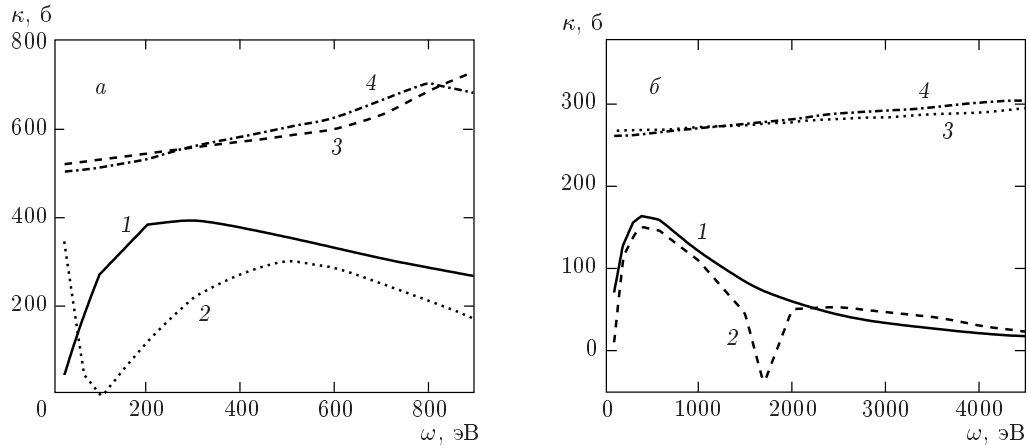


Рис. 2. Спектральная интенсивность тормозного излучения электрона с энергиями 1 кэВ (*а*) и 5 кэВ (*б*) на атоме криптона по различным каналам: 1 — поляризационный канал (расчет данной работы), 2 — поляризационный канал с учетом вклада интерференции (расчет в приближении случайных фаз с обменом [10]), 3 — вклад статического канала (расчет данной работы), 4 — вклад статического канала (расчет [10])

онного канала на заданной приведенной частоте увеличивается с ростом начальной энергии электрона, хотя максимальное значение R -фактора уменьшается с ростом энергии налетающих частиц. Это обстоятельство связано с тем, что эффективный радиус излучения в рамках вращательного приближения возрастает с ростом энергии налетающих частиц, если частота излучения фиксирована. Спектральный R -фактор достигает своего максимума при $\nu_{max} \approx 0.15-0.45$, причем ν_{max} возрастает с ростом энергии налетающих частиц, в то время как для быстрых электронов $\nu_{max} \approx 1$ [20]. Интересно отметить, что для медленных электронов ($T < I$, I — потенциал ионизации атома) максимум вклада ПТИ смещен в сторону высоких частот [13, 19], что связано с отсутствием проникновения налетающей частицы в остов мишени.

Формула (24) для R -фактора позволяет исследовать его зависимость от заряда ядра атома Томаса-Ферми при фиксированных значениях частоты излучения и энергии налетающих частиц. Соответствующие расчеты для различных значений частоты и одинаковой начальной энергии в килоэлектронвольтовом диапазоне показывают, что относительный вклад поляризационного канала увеличивается с ростом заряда ядра. При одной и той же начальной энергии величина R -фактора оказывается большей для меньшей частоты излучения.

Предсказываемый развитой в настоящей работе теорией ПТИ рост относительного вклада поляризационного механизма с увеличением заряда ядра на-

ходится в качественном соответствии с экспериментальным результатом работы [8]. В [8] было обнаружено примерно двукратное превышение измеренной интенсивности тормозного излучения в низкочастотной области для больших зарядов ядра ($Z \approx 90$) по сравнению с результатом квантовомеханического расчета СТИ (без учета поляризационного канала) [6]. В то же время для малых и умеренных значений Z имелось хорошее соответствие между экспериментом и данными точной теории обычного (статического) тормозного излучения. Следует отметить, что количественно указанное превышение не описывается полностью развитой здесь теорией ПТИ и, возможно, является следствием вклада других излучательных процессов, таких как, например, двухфотонное тормозное излучение, что отмечалось в [8].

На рис. 3 представлено суммарное (по статическому и поляризационному каналам) эффективное излучение для трех значений заряда ядра атома Томаса-Ферми как функция энергии фотона. Видно, что вклад ПТИ модифицирует общий вид спектра по сравнению с чисто статическим случаем (см. кривые 3, 4 рис. 2).

5. ПОЛНЫЕ ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ КВАЗИКЛАССИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ РАССЕЯНИИ НА АТОМЕ ТОМАСА-ФЕРМИ

Общее выражение (12) для полных энергетических потерь по статическому каналу, впервые полу-

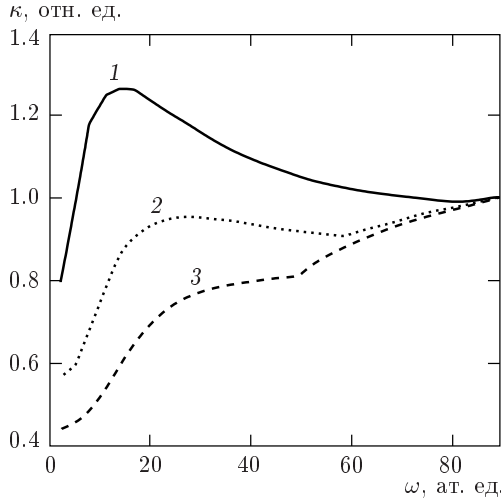


Рис. 3. Спектры тормозного излучения с учетом поляризационного канала, нормированные на их значения при $\omega = 90$ ат. ед., для электрона с энергией 100 ат. ед., рассеивающегося на атоме Томаса–Ферми с различными значениями заряда ядра: $Z = 30$ (1), 60 (2), 90 (3)

ченное в [3] в рамках полуклассического подхода, может быть переписано для атома Томаса–Ферми в приведенных переменных:

$$\kappa_{st} \left(T = \frac{Z^{4/3}}{b} t \right) = \frac{8\sqrt{3}\pi\sqrt{b}}{3c^3} \frac{Z^{5/3}}{\sqrt{2t}} \times \int_{x_{eff}(\nu_{hf}, t)}^{\infty} \left[\left(\frac{\chi(x)}{x} \right)' \right]^2 \sqrt{1 + \frac{\chi(x)}{tx}} x^2 dx. \quad (29)$$

Здесь, как и в формуле (23), $\nu_{hf} = (Z^{1/3}/b)t$ — приведенная частота, соответствующая высокочастотной границе тормозного излучения. Существенно, что для справедливости выражения (29) не требуется выполнения критерия вращательного приближения, $\nu > \nu_{min}^{(rot)}(t) \approx 3t$, а необходимо лишь соблюдение условия квазиклассичности движения рассеивающегося электрона, $t \leq 1$. С другой стороны, правильный нормировочный множитель может быть получен только путем сравнения полуклассического результата [3] с квазиклассическим пределом точного квантовомеханического выражения для спектрального сечения (см. [7]).

Переписывая аналогичным образом формулу (13) для полных потерь энергии по поляризацион-

ному каналу, получаем

$$\kappa_{pol} \left(T = \frac{Z^{4/3}}{b} t \right) \approx \kappa_{pol}^{rot}(t) = \frac{8\sqrt{3}\pi\sqrt{b}}{3c^3} \frac{Z^{5/3}}{\sqrt{2t}} \times \int_{x_{eff}(\nu_{hf}, t)}^{\infty} g^2(x, \nu_{rot}(x, t)) \sqrt{1 + \frac{\chi(x)}{tx}} x^{-2} dx. \quad (30)$$

Здесь функция $g(x, \nu)$ представляет собой нормированный поляризационный заряд (20), $\nu_{rot}(x, t)$ — зависящая от приведенного расстояния и энергии приведенная вращательная частота, выражение для которой следует из (3):

$$\nu_{rot}(x, t) = \sqrt{\frac{2}{b^3} \frac{t + \chi(x)/x}{x^2}}. \quad (31)$$

Выражение (30) для полных энергетических потерь по поляризационному каналу получено во вращательном приближении, которое, как это было показано в предыдущем разделе, хорошо описывает ПТИ (в противоположность СТИ) и в низкочастотном диапазоне.

Заметим, что формулы (29), (30), в отличие от соответствующих выражений для спектральных потерь (25), (27), содержат (помимо стоящего перед интегралом множителя $Z^{5/3}$) явную зависимость от заряда ядра. Она возникает вследствие зависимости от Z нижнего предела в интеграле по безразмерному расстоянию x . Действительно, нижний предел интеграла дается решением уравнения

$$t + \frac{\chi(x)}{x} = \frac{bZ^{2/3}}{2} x^2 t^2, \quad (32)$$

которое содержит параметр Z . Таким образом, для полных потерь энергии квазиклассического электрона при рассеянии на атоме Томаса–Ферми отсутствует точный закон подобия по приведенной частоте и энергии, характерный для спектральных энергетических потерь. Расчет, однако, показывает, что зависимость нижнего предела интегрирования от Z в выражении (30) весьма слабая: при изменении заряда ядра в два раза величина $x_{eff}(\nu_{hf}, t)$ меняется на 10–15%. Следовательно, можно сделать вывод о наличии приближенного закона подобия полных радиационных потерь энергии на атоме Томаса–Ферми.

С точки зрения унификации излучательных процессов имеет смысл отметить, что выражение (29) может быть представлено в форме, аналогичной (30), если ввести эффективный (нормированный) излучающий по статическому каналу заряд

$$g_{st}(x) = x^2 \left(\frac{\chi(x)}{x} \right)'$$

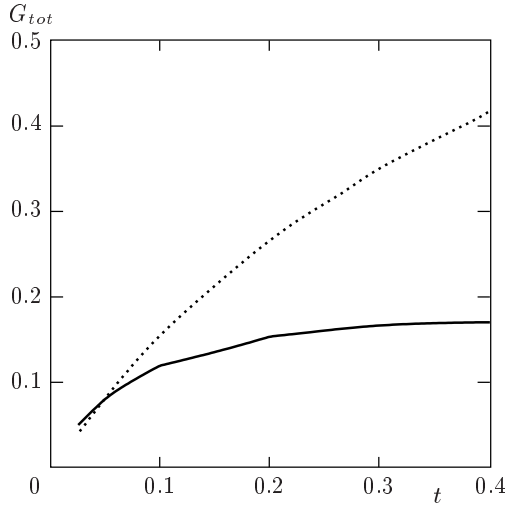


Рис. 4. Фактор Гаунта для полных потерь энергии при рассеянии квазиклассического электрона на атоме Томаса–Ферми ($Z = 60$) по статическому (пунктир) и поляризационному (сплошная кривая) каналам как функция приведенной энергии $t = bT/Z^{4/3}$ (T — начальная энергия электрона в атомных единицах)

Во вращательном приближении эффективный поляризационный заряд на малых расстояниях до ядра возрастает, оставаясь практически независимым от энергии налетающих частиц, и совпадает с радиальным распределением электронного заряда остова. На больших расстояниях поляризационный заряд становится убывающей функцией расстояния, причем его величина оказывается большей для больших значений энергии налетающих частиц. Если принять во внимание зависимость вращательной частоты $\nu_{rot}(x, t)$ от расстояния до ядра и энергии налетающих частиц, перечисленные факты могут быть объяснены следующим образом. На малых расстояниях согласно (3) величина $\nu_{rot}(x, t)$ велика (вне зависимости от параметра t), и для поляризационного заряда справедливо высокочастотное приближение (12), в котором его распределение совпадает с радиальным распределением электронного заряда остова. На больших расстояниях от ядра вращательная частота уменьшается тем быстрее, чем меньше начальная энергия, и поляризационный заряд начинает убывать, как следует из его определения (формула (20)).

На рис. 4 представлена зависимость фактора Гаунта — отношения эффективного излучения электрона на атоме Томаса–Ферми ($Z = 60$) к своему крамерсовскому аналогу — от приведенной энергии

налетающих частиц для статического и поляризационного каналов процесса. Видно, что имеется весьма узкая область доминирования поляризационного излучения над статическим в низкоэнергетическом диапазоне $t < 0.05$, что в пересчете на обычные единицы для заданного заряда ядра соответствует неравенству $T < 360$ эВ. Заметим, что для таких энергий налетающих частиц характерные излучаемые частоты лежат на границе применимости приближения Брандта–Лундквиста для расчета поляризуемости мишени. Из рис. 4 также следует, что полные потери по поляризационному каналу с ростом энергии электрона быстро достигают значения насыщения, в отличие от потерь по статическому каналу, интенсивно возрастающих до кулоновского предела. Быстрое насыщение энергетических потерь на поляризационное излучение объясняется увеличением роли эффекта проникновения электрона в остов мишени с ростом энергии налетающих частиц и связанным с этим уменьшением поляризационного заряда. В результате рассеивающимся электроном по поляризационному каналу излучаются в основном относительно низкие частоты, так что возрастание его энергии не приводит к росту полных энергетических потерь на поляризационное излучение.

По аналогии со спектральным R -фактором (23), (24) можно ввести R -фактор для полных потерь энергии, который в приведенных единицах имеет вид

$$\tilde{R}_{tot}(t, Z) = \frac{\kappa_{pol}(t, Z)}{\kappa_{st}(t, Z)}. \quad (33)$$

В размерных энергетических единицах имеем

$$R_{tot}(T, Z) = \tilde{R}_{tot}\left(\frac{Tb}{Z^{4/3}}, Z\right). \quad (34)$$

Зависимость R_{tot} от начальной энергии электрона (в обычных единицах) для различных значений заряда ядра атома представлена на рис. 5. Видно, что в энергетическом диапазоне $T > 1$ кэВ роль поляризационных эффектов в полных тормозных потерях монотонно уменьшается с ростом энергии налетающих частиц. Для фиксированной начальной энергии относительный вклад поляризационного канала возрастает с увеличением заряда ядра атома-мишени, как и для спектральных радиационных потерь (см. предыдущий раздел).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследована роль поляризации остова мишени в спектральных и полных радиационных

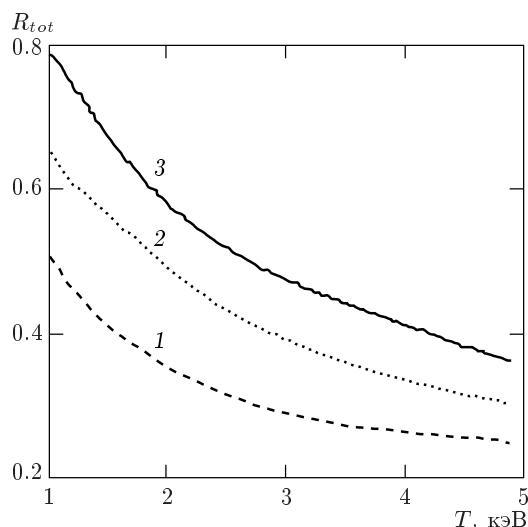


Рис. 5. Зависимость R -фактора, характеризующего относительный вклад поляризационного канала в полные энергетические потери, от начальной энергии при рассеянии квазиклассических электронов на атоме Томаса–Ферми с различными значениями заряда ядра: $Z = 30$ (1), 60 (2), 90 (3)

потерях квазиклассических электронов с энергией 1–10 кэВ при их рассеянии на атоме Томаса–Ферми. С использованием вращательного приближения получено универсальное выражение для эффективного спектрального излучения по поляризационному каналу в терминах приведенной частоты и энергии, описывающее процесс единым образом для всех зарядов ядра. Показано, что в отличие от СТИ вращательное приближение в теории ПТИ допускает правильный предельный переход в низкочастотный диапазон и поэтому может быть использовано для расчета полных энергетических потерь.

Статистическая модель атома обеспечивает высокую точность для статического канала тормозного излучения. В случае поляризационного канала точность этой модели сохраняется лишь в среднем, тогда как вблизи потенциалов ионизации электронных оболочек расхождение статистической модели с квантовыми расчетами [10] становится значительным.

На основании анализа частотных и энергетических зависимостей R -фактора установлено, что вклад поляризационного механизма максимален в области низких частот $\nu \approx 0.15$ – 0.45 , где R -фактор имеет значение порядка единицы, причем центральная частота максимума возрастает с ростом энергии налетающих частиц. Величина R -фактора на фик-

сированной частоте увеличивается с уменьшением энергии рассеиваемого электрона в высокочастотной области и уменьшается в низкочастотной.

Показано, что относительная величина поляризационного излучения для фиксированной частоты и энергии налетающих частиц возрастает с увеличением заряда ядра атома, что находится в качественном соответствии с имеющимися экспериментальными данными [8].

Анализ величины полных энергетических потерь на поляризационное излучение показал, что они составляют долю, сравнимую с потерями на обычное (статическое) тормозное излучение. Область доминирования поляризационного канала определяется неравенством

$$T < 0.05 \frac{Z^{4/3}}{b} \text{ ат.ед.},$$

при этом характерные излучаемые частоты лежат на границе применимости использованной модели. С ростом энергии налетающих частиц поляризационные тормозные потери при рассеянии квазиклассического электрона на атоме Томаса–Ферми быстро достигают значения насыщения вследствие эффектов проникновения рассеиваемого электрона в остов мишени, в то время как обычные тормозные потери продолжают интенсивно расти (для $t \leq 1$). Характерная величина относительного вклада поляризационного канала в полные потери энергии в энергетическом диапазоне 1–5 кэВ изменяется от 80 до 25 %, уменьшаясь с ростом энергии и увеличиваясь с ростом заряда ядра атома.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что роль поляризационных эффектов в тормозном излучении электронов умеренных энергий на атоме возрастает с увеличением заряда ядра, а также с уменьшением частоты и энергии налетающих частиц.

Авторы выражают благодарность В. И. Когану и А. Б. Кукушкину за полезные обсуждения методов расчета статического канала тормозного излучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 01-02-16305) и Министерства науки РФ по теме «Фундаментальная спектроскопия».

ЛИТЕРАТУРА

1. V. I. Kogan, A. B. Kukushkin, and V. S. Lisitsa, Phys. Rep. **213**, 1 (1992).
2. В. Д. Кириллов, Б. А. Трубников, С. А. Трушин, Физика плазмы **1**, 218 (1975).

3. В. И. Гервидс, В. И. Коган, Письма в ЖЭТФ **22**, 308 (1975).
4. В. П. Жданов, М. И. Чибисов, ЖЭТФ **47**, 1804 (1977).
5. В. П. Жданов, Физика плазмы **4**, 128 (1978).
6. С. М. Lee, L. Kissel, R. H. Pratt, and H. K. Tseng, Phys. Rev. A **13**, 1714 (1976).
7. В. И. Коган, А. Б. Кукушкин, ЖЭТФ **87**, 1164 (1984).
8. R. Hipper, K. Saeed, I. McGregor, and H. Kleinpoppen, Phys. Rev. Lett. **46**, 1622 (1981).
9. *Поляризаационное тормозное излучение частиц и атомов*, под ред. В. Н. Цытовича, И. М. Ойрингеля, Наука, Москва (1987).
10. А. В. Король, А. Г. Лялин, О. И. Оболенский, А. В. Соловьев, ЖЭТФ **114**, 458 (1998).
11. В. А. Астапенко, Л. А. Буреева, В. С. Лисица, ЖЭТФ **117**, 496 (2000).
12. W. Brandt and S. Lundqvist, Phys. Rev. A **139**, 612 (1965).
13. Б. А. Зон, ЖЭТФ **77**, 44 (1979).
14. В. А. Астапенко, ЖЭТФ **115**, 1619 (1999).
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
16. П. Гамбош, *Статистическая теория атома и ее применения*, Изд-во иностр. лит., Москва (1951).
17. В. А. Астапенко, Л. А. Буреева, В. С. Лисица, ЖЭТФ **117**, 906 (2000).
18. В. В. Иванов, А. Б. Кукушкин, В. И. Коган, Физика плазмы **15**, 1531 (1989).
19. В. Касьянов, А. Старостин, ЖЭТФ **48**, 295 (1965).
20. V. A. Astapenko, Laser Phys. **11**, 1042 (2001).