

# КЛАССИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ ТЕОРИИ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ТОРМОЗНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В МОДЕЛИ ЛОКАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ

*B. A. Астапенко<sup>a\*</sup>, Л. А. Буреева<sup>b</sup>, В. С. Лисица<sup>c</sup>*

<sup>a</sup> *Московский физико-технический институт  
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

<sup>b</sup> *Научный совет по спектроскопии Российской академии наук  
117924, Москва, Россия*

<sup>c</sup> *Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123481, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 30 сентября 1999 г.

Развита классическая и квантовая теории поляризационного тормозного излучения в статистическом (томас-фермиевском) потенциале сложных атомов и ионов. Основные допущения теорий соответствуют приближениям, использованным ранее в классических и квантовых расчетах обычного тормозного излучения в статическом потенциале. Это позволяет рассмотреть на единой основе вклад обоих каналов в излучение с учетом их интерференции. Использование классической модели позволяет получить простые универсальные формулы для спектральных характеристик излучения. Теория применяется к электронам умеренных энергий, характерных для плазменных приложений, в частности, к излучению электронов на аргоноподобном ионе KII в области частот, близких к его потенциальному ионизации. Результаты расчета показывают важность учета поляризационного канала излучения для плазмы с тяжелыми ионами.

PACS: 34.80.Lx

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Процесс поляризационного тормозного излучения (ПТИ) при столкновениях заряженных частиц со сложными атомами и ионами интенсивно исследовался в последние десятилетия [1–7]. Суть этого процесса сводится, как известно [1], к динамической поляризации атомного остова налетающей заряженной частицей (обычно, электроном) с последующим излучением остова и потерей энергии частицей. Таким образом, поляризационное тормозное излучение является дополнительным (наряду с обычным тормозным излучением в статическом потенциале) каналом радиационных потерь частицы при столкновениях.

По существу здесь мы имеем дело с излучением составной (компаунд) системы «атом + налетающая частица», обусловленным ее суммарным дипольным моментом. Такой подход к тормозному излучению

был впервые сформулирован М. Борном (см. [8]) и был впоследствии применен к ряду других эффектов.

Многочисленные расчеты ПТИ проведены квантовыми методами и относятся в основном к области больших энергий налетающих частиц, (см. обзор [4]). Вместе с тем уместно поставить вопрос о вкладе поляризационного канала в излучение плазмы с тяжелыми ионами. Область энергий электронов в этом случае порядка температуры плазмы  $T$  и оказывается меньшей (или сравнимой) с потенциалом ионизации ионов. Расчеты обычного (статического) тормозного излучения показывают, что здесь хорошо работают методы классической электродинамики, позволяющие получить достаточно простые аналитические результаты для спектров тормозного излучения (см. [9]). Основанием для применимости классических методов является эффект ускорения налетающего электрона в поле атомного потенциала, в результате которого электрон «забывает» о

---

\*E-mail: astval@hotmail.com

своей первоначальной энергии, и все эффекты излучения зависят от его кинетической энергии в точке наибольшего ускорения. Именно поэтому критерием классичности является условие малости энергии излучения кванта  $\hbar\omega$  по сравнению не с начальной энергией налетающей частицы  $E$  ( $\hbar\omega \ll E$ ), а по сравнению с гораздо большей энергией электрона, ускоренного в атомном потенциале. Таким образом, классическое рассмотрение оказывается применимым также и для описания сильно неупругих процессов  $\hbar\omega \gg E$ . Это обстоятельство служит основой так называемой крамерсовой электродинамики (см. подробнее [9]).

Для многочисленных плазменных приложений основную роль играют усредненные спектральные характеристики, отвечающие движению электрона в усредненном статистическом потенциале типа Томаса–Ферми. Такие спектры находятся в хорошем соответствии с более точными расчетами по методу Хартри–Фока, как это показывают расчеты в статистическом потенциале [11]. Поэтому для получения универсальных результатов уместно использовать статистические модели также и для поляризационного излучения.

Таким образом, целью настоящей работы является расчет эффектов ПТИ при движении электрона в статистическом атомном потенциале атомов или ионов. Расчеты проводятся для классического и квантового движений электрона в рамках тех же приближений, которые использовались ранее для обычного тормозного излучения [9–14]. Результаты расчета позволяют получить простые универсальные формулы для излучения в обоих каналах с учетом интерференционных эффектов. Используемые приближения оправданы для электронов умеренных энергий, характерных для плазменных систем [9].

Для расчета вклада поляризационного канала в общее сечение столкновительно-излучательных процессов необходимо знание обобщенной (недипольной) поляризуемости мишени  $\alpha(\omega, \mathbf{q})$ . Расчет этой величины представляет собой, как известно, сложную квантовомеханическую задачу, точно решаемую только для водородоподобного иона [2]. В остальных случаях точный расчет невозможен даже в дипольном приближении.

Для ситуаций, когда основной вклад в процесс дает один внешний валентный электрон, возможно использование приближенных методов типа метода квантового дефекта и модельного потенциала [15], которые дают решение в терминах кулоновских волновых функций с нецелыми параметрами.

Если же основную роль играет многоэлектронная подоболочка, то оказывается необходимым учесть в радиационном процессе также и межэлектронных корреляционных эффектов. Расчет атомных излучательных характеристик в одноэлектронном приближении дает сильно искаженный результат. Последнее обстоятельство хорошо известно из теории фотоэффекта для многоэлектронных атомов вблизи порога фотоионизации  $d$ - и  $f$ -подоболочек [16], знание которого во всем частотном диапазоне достаточно для определения динамической (дипольной) поляризуемости атома (иона).

Основные закономерности сечения фотоэффекта и поляризуемости для атомов с замкнутыми оболочками хорошо описываются в рамках так называемого приближения случайных фаз с обменом. Основная идея данного метода состоит в том, что межэлектронные корреляционные эффекты выражаются через динамическую поляризуемость атомного остова.

Такие вычисления применительно к задаче расчета сечения поляризационного тормозного излучения на атоме в широком диапазоне частот были проведены в недавней работе [5] для электронов киловольтных энергий, рассеивающихся на атоме криптона. Следует отметить, что подобные вычисления представляют собой весьма сложную численную задачу, поскольку волновые функции атомных электронов нулевого приближения являются решениями интегро-дифференциальных уравнений Хартри–Фока.

## 2. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Цель настоящей статьи заключается, как уже отмечалось, в разработке универсальных полукачественных методов описания поляризационных эффектов в излучательных процессах при столкновении электронов с многоэлектронными атомами в широком частотном диапазоне и проведении на их основе анализа общих закономерностей указанных процессов в рамках локальной электронной плотности для поляризуемости мишени.

Основное достоинство используемого подхода заключается в его вычислительной простоте, универсальности в отношении применимости к различным мишениям и физической наглядности. Не претендуя на точное количественное описание явления, используемый метод может рассматриваться как приближенный способ описания поляризационно-интерференционных эффектов на многоэлектрон-

ных системах, применимый в широком диапазоне плазменных параметров.

В дальнейшем мы будем использовать так называемое приближение локальной электронной плотности или связанной с ней плазменной частоты, развитое Брандтом и Лундквистом ранее для расчета фотоионизации многоэлектронных атомов [17] как подход, альтернативный одноэлектронному приближению. В приближении Брандта–Лундквиста атом рассматривается как неоднородное плазменное облако с заданным распределением электронной плотности  $n(r)$ . Каждой точке пространства внутри атома соответствует своя плазменная частота

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

(Всюду, если не оговорено противное, используются атомные единицы.) Согласно классической картине, применяющейся в данной модели, поглощение излучения частоты  $\omega$  происходит при выполнении резонансного условия  $\omega = \omega_p(r)$ , чем и определяются характерные расстояния процесса  $r_p(\omega)$ .

Выражение для поляризуемости  $\alpha(\omega)$  в рамках рассматриваемой модели имеет вид

$$\alpha^{BL}(\omega) = \int_0^{R_0} \frac{\omega_p^2(r)r^2 dr}{\omega_p^2(r) - \omega^2 - i\delta} = \int \beta^{BL}(r, \omega) dr. \quad (1)$$

Здесь  $R_0$  — радиус атома (иона),  $\delta$  — бесконечно малая положительная величина.

Формула (1) дает представление динамической поляризуемости в виде интеграла по пространственной координате от некоторой функции  $\beta(r, \omega)$ , которую естественно назвать пространственной плотностью динамической поляризуемости. Эта величина в рассматриваемом локальном приближении осуществляется связь между наведенной поляризацией атома на частоте  $P(r, \omega)$  и напряженностью внешнего электрического поля  $(E(r, \omega))$ , вызывающего эту поляризацию, причем обе величины берутся в одной точке пространства (локальное приближение):

$$P(r, \omega) = \beta(r, \omega)E(r, \omega). \quad (2)$$

Отметим, что выражение (1) может быть переписано в виде интеграла по частоте, если должным образом ввести спектральную плотность силы осциллятора по следующей формуле (здесь использованы гауссовые единицы):

$$\frac{df}{d\omega} = \frac{m\omega^2}{e^2} r_p^2(\omega) \frac{dr_p(\omega)}{d\omega}, \quad (3)$$

функция  $r_p(\omega)$  определяется решением уравнения

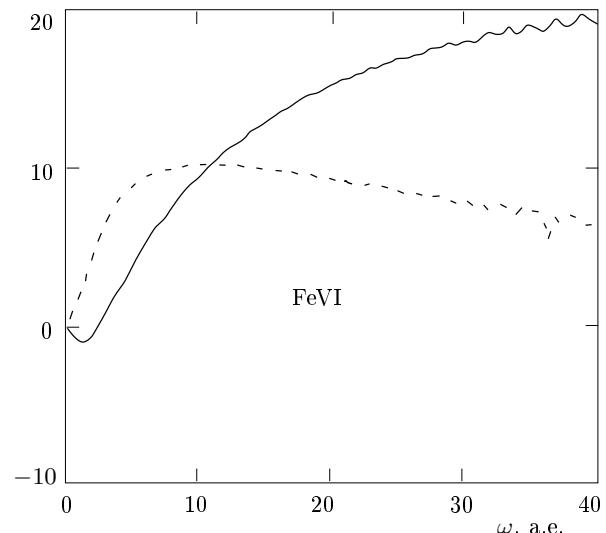
$$\omega = \omega_p(r). \quad (4)$$

В таблице 1 приведено сравнение с экспериментальными данными ( $\alpha_0^{exp}$ ) величин статических поляризуемостей (в атомных единицах) атомов и ионов с замкнутыми электронными оболочками, вычисленных различными методами в рамках статистического описания атома.

Из приведенной таблицы 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 статическая поляризуемость, вычисленная в более общем нелокальном плазменном подходе [20, 21], имеет существенно завышенное значение.

На рис. 1 приведены частотные зависимости величин  $-\omega^2 \operatorname{Re}\{\alpha(\omega)\}$  и  $\omega^2 \operatorname{Im}\{\alpha(\omega)\}$  для иона FeVI, вычисленные в приближении Брандта–Лундквиста в широком диапазоне частот. Сравнение с аналогичными зависимостями, вычисленными в рамках квантовомеханического описания мишени для многоэлектронного атома [5], показывает, что расчет в модели Брандта–Лундквиста качественно правильно описывает слаженные функции  $-\omega^2 \operatorname{Re}\{\alpha(\omega)\}$ ,  $\omega^2 \operatorname{Im}\{\alpha(\omega)\}$  без учета особенностей, вызванных оболочечной структурой атома (максимумов и мини-



**Рис. 1.** Частотные зависимости действительной и мнимой частей динамической поляризуемости иона FeVI, полученные в локальной плазменной модели Брандта–Лундквиста [17]:  $-\omega^2 \operatorname{Re}\{\alpha^{BL}(\omega)\}$  — сплошная кривая,  $\omega^2 \operatorname{Im}\{\alpha^{BL}(\omega)\}$  — штриховая кривая (значения приведены в а.е.)

**Таблица 1.** Статические поляризуемости атомов и ионов, вычисленные в рамках различных моделей (значения приведены в а.е.)

Атом (ион)	ArI	KrI	XeI	KII	PbII	CsII	SrIII	BaIII
$\alpha_0^{exp}$	11	17	27	7.5	12	16.3	6.6	11.4
$\alpha_0^{var}$	19.3	26.8	30.9	9.1	14.3	17.8	8.7	11.4
$\alpha_0^{VSh}$		21.1	25.5	6.6	11.9	15.3	7.5	9.7
$\alpha_0^{BL}$	22	24	27	8.6	11.6	13.5	7	8.4

*Примечание.*  $\alpha_0^{var}$  — расчет вариационным методом [18];  $\alpha_0^{VSh}$  — расчет в статистической модели [19];  $\alpha_0^{BL} = R_0^3/3$  — расчет в модели Брандта–Лундквиста для атома (иона) Томаса–Ферми–Дирака.

мумов вблизи порогов ионизации подоболочек). Из рис. 1, в частности, следует (в соответствии с физической картиной), что функция  $-\omega^2 \operatorname{Re}\{\alpha(\omega)\}$  (в атомных единицах) стремится к полному числу электронов  $N$  в ионе с ростом частоты  $\omega$ , а функция  $\omega^2 \operatorname{Im}\{\alpha(\omega)\}$  резко уменьшается в высокочастотном пределе до нуля.

Итак, из анализа низкочастотного и высокочастотного пределов можно ожидать, что использование модели Брандта–Лундквиста дает в первом приближении разумную аппроксимацию для динамической поляризуемости атома (иона).

Для расчетов сечения поляризационного тормозного излучения введем в рассмотрение поляризационный потенциал взаимодействия с ионом, находящимся во внешнем однородном электромагнитном поле  $\mathbf{E}(\omega)$  частоты  $\omega$ :

$$V_{pol}(\mathbf{R}, \omega) = \int d\mathbf{r} \frac{\delta\rho(\mathbf{r}, \omega)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|}. \quad (5)$$

Здесь  $\delta\rho(\mathbf{r}, \omega)$  — пространственная плотность возмущения электронного заряда, индуцированного в ионном осте под действием внешнего поля,  $R$  — радиус-вектор налетающей частицы. Отметим, что предлагаемый подход годится и для расчета спонтанных процессов: в этом случае под  $\mathbf{E}(\omega)$  нужно понимать поле квантовых флуктуаций. Возмущение электронного заряда  $\delta\rho(\mathbf{r}, \omega)$  связано с наведенной в ионном осте поляризацией  $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega)$ :

$$\delta\rho(\mathbf{r}, \omega) = \operatorname{div} \mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega). \quad (6)$$

Величина  $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega)$  в локальном приближении дается формулой (2).

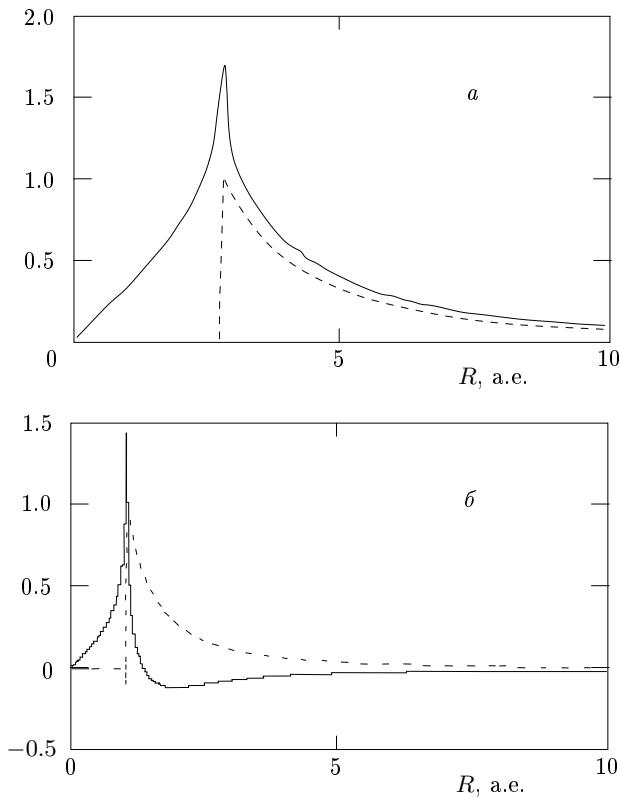
Распределение электронной плотности в атоме (ионе) всюду в дальнейшем будем предполагать сферически-симметричным.

Собирая выписанные формулы и используя разложение обратного расстояния  $|\mathbf{r} - \mathbf{R}|^{-1}$  по сферическим гармоникам, после несложных алгебраических преобразований и интегрирования по угловым переменным получаем для поляризационного потенциала в локальном приближении следующее выражение:

$$V_{pol}(\mathbf{R}, \omega) = \frac{\mathbf{R}\mathbf{E}(\omega)}{R^3} \int_0^R \beta(r, \omega) 4\pi r^2 dr. \quad (7)$$

Существенно, что данная формула описывает недипольный потенциал взаимодействия налетающей частицы с возмущенным ионным оством, что выражается в наличии в верхнем пределе интегрирования модуля радиуса-вектора  $R$  этой частицы. Данное обстоятельство имеет простую электростатическую интерпретацию: внешний заряд взаимодействует только с частью электронного облака внутри сферы радиуса  $R$ , если процесс идет без возбуждения связанных электронов мишени.

На рис. 2а, б представлены результаты расчета действительной и мнимой частей поляризационного потенциала, нормированного на амплитуду внешнего электрического поля, для иона КII. Расчет проведен в приближении локальной плазменной частоты с использованием электронной плотности ионного оства в модели Томаса–Ферми–Дирака [18] для двух частот электромагнитного поля  $\omega = 0.9$  (а) и 3 а. е. (б) по формуле (7). В обоих случаях действительная часть поляризационного потенциала имеет максимум на расстоянии, определяемом уравнением (4). На этом расстоянии локальная диэлектрическая проницаемость мишени обращается в нуль и одновременно появляется мнимая добавка к поляриза-



**Рис. 2.** Действительная и мнимая части поляризационного потенциала, нормированные на амплитуду электромагнитного поля, на частотах  $\omega = 0.9$  а.е. (а), 3 а.е. (б) как функции расстояния до ядра иона KII. Расчет в приближении Брандта–Лундквиста с использованием электронной плотности Томаса–Ферми–Дира.  $\text{Re } Up(r)$  — сплошные кривые,  $\text{Im } Up(r)$  — штриховые кривые

ционному потенциалу (для меньших расстояний она равна нулю).

Отметим, что похожие формы потенциала были получены в работе [20] для неоднородной плазменной частицы в электромагнитном поле методом решения дифференциального уравнения с соответствующими граничными условиями.

Используя выражение для поляризационного потенциала, можно получить формулу для наведенного дипольного момента в ионном остеце рассеивающейся частицей. Действительно, с учетом

$$V_{pol}(\mathbf{R}, \omega) = -\mathbf{E}(\omega)\mathbf{D}_{pol}(\mathbf{R}, \omega), \quad (8)$$

находим

$$\mathbf{D}_{pol}(\mathbf{R}, \omega) = -\frac{\mathbf{R}}{R^3} \int_0^R \beta(r, \omega) 4\pi r^2 dr. \quad (9)$$

Наведенный в атомном (ионном) остеце дипольный момент  $\mathbf{D}_{pol}(\mathbf{R}, \omega)$  является функцией частоты внешнего поля и радиуса-вектора налетающей частицы:

$$\text{Re} \{ \mathbf{D}^{BL}(\omega, \mathbf{R}) \} = \frac{\mathbf{R}}{R^3} \text{V.P.} \int_0^R \frac{\omega_p^2(r)r^2 dr}{\omega_p^2(r) - \omega^2}, \quad (9a)$$

$$\begin{aligned} \text{Im} \{ \mathbf{D}^{BL}(\omega, \mathbf{R}) \} = & \frac{\mathbf{R}}{R^3} \frac{\pi}{2} \omega^2 \times \\ & \times \frac{r_p^2(\omega)}{|d\omega_p(r_p)/dr|} \theta(R - r_p(\omega)), \end{aligned} \quad (9b)$$

где  $\theta$  — функция Хевисайда. Полный (с учетом статического) излучающий дипольный момент системы налетающая частица + атом (ион) равен

$$\mathbf{D}_{tot}(\mathbf{R}, \omega) = \mathbf{R} - \frac{\mathbf{R}}{R^3} \int_0^R \beta(r, \omega) 4\pi r^2 dr. \quad (10)$$

Формула (10) является исходной для проведения расчетов поляризационных эффектов в локальном приближении. Она соответствует учету двух каналов радиационно-столкновительного процесса: статического (первое слагаемое в (10)) и поляризационного (второе слагаемое). Поскольку эти слагаемые входят в выражение для полного излучающего дипольного момента системы мишень + налетающая частица, выражение (10), будучи подставленным в стандартную формулу для сечения процесса или соответствующей интенсивности, будет описывать также и интерференционные эффекты, связанные с взаимодействием каналов.

### 3. КЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ТОРМОЗНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА НА МНОГОЭЛЕКТРОННОМ ИОНЕ

Борновский параметр  $\eta$ , характеризующий движение плазменных электронов в условиях термодинамически равновесной плазмы, больше или порядка единицы:

$$\eta = \frac{Ze^2}{\hbar v} \geq 1 \quad (11)$$

(здесь использованы обычные единицы измерения).

Неравенство (11) обратно борновскому условию и соответствует (в пределе сильного неравенства) квазиклассическому приближению по движению налетающей частицы. Именно в рамках квазиклассики

(или, точнее, полуклассического подхода [9, 11, 14]) В. И. Коганом с сотрудниками был проведен подробный анализ статического канала тормозного излучения, в частности, развито так называемое вращательное приближение, позволяющее весьма просто рассчитывать спектральные сечения основных радиационных процессов, включая также и рекомбинацию.

Сравнение с квантовомеханическими численными расчетами [10] продемонстрировало высокую точность полуклассического подхода и, в частности, вращательного приближения в теории статического тормозного излучения [12, 13]. Поэтому естественным представляется использовать полуклассический подход также и в исследовании поляризационного тормозного излучения на многоэлектронном ионе и сконструировать на его основе обобщение вращательного приближения, включающее описание поляризационного канала.

При классическом рассмотрении столкновительно-излучательного процесса вводится, как известно [22], величина  $\kappa$ , называемая эффективным излучением:

$$\kappa = \int_0^\infty \Delta E(\rho) 2\pi \rho d\rho. \quad (12)$$

Здесь  $\Delta E(\rho)$  — полное излучение одной налетающей частицы с заданным прицельным параметром  $\rho$ . В дальнейшем мы будем также интересоваться спектральным эффективным излучением  $d\kappa(\omega)/d\omega$ , выражение для которого в дипольном приближении по взаимодействию со электромагнитным полем в излучаемой волне для спонтанного процесса имеет вид

$$\frac{d\kappa(\omega)}{d\omega} = \frac{4\omega^4}{3c^3} \int_0^\infty |\mathbf{D}(\omega, \rho)|^2 \rho d\rho. \quad (13)$$

Здесь  $\mathbf{D}(\omega, \rho)$  — фурье-образ излучающего дипольного момента системы на частоте  $\omega$ , вычисленный вдоль траектории налетающей частицы, характеризуемой прицельным параметром  $\rho$ .

Между величиной  $d\kappa/d\omega$  и спектральным сечением тормозного излучения существует простая связь:

$$\frac{d\kappa}{d\omega} = \hbar\omega \frac{d\sigma}{d\omega}$$

(здесь использованы обычные единицы).

Для учета интерференционно-поляризационных эффектов в качестве  $\mathbf{D}(\omega, \rho)$  в дальнейшем будем

использовать временной фурье-образ от полного дипольного момента:

$$\mathbf{D}_{tot}(\omega, \rho) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{D}_{tot}(\mathbf{R}(t, \rho, v_i), \omega) e^{i\omega t} dt, \quad (14)$$

в котором функция  $\mathbf{D}_{tot}(\mathbf{R}, \omega)$  дается выражением (10). Таким образом, в классике при вычислении спектрального эффективного излучения нужно знать закон движения налетающей частицы:

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}(t, \rho, v_i), \quad (15)$$

где  $v_i$  — ее начальная скорость.

При исследовании сильно неупругих процессов рассеяния удобно выразить временной фурье-образ дипольного момента налетающей частицы (первое слагаемое формулы (10)) через фурье-образ силы, действующей на частицу со стороны мишени. Тогда из (10) можно получить для фурье-образа полного излучающего дипольного момента системы (формула (14)) следующее выражение:

$$\mathbf{D}_{tot}(\omega, \rho) = \frac{1}{\omega^2} \left\{ \frac{\mathbf{R}}{R} \frac{dU(R)}{dR} \right\}_{\omega, \rho} - \left\{ \frac{\mathbf{R}}{R^3} \int_0^R \beta(r, \omega) 4\pi r^2 dr \right\}_{\omega, \rho}. \quad (16)$$

Здесь фигурные скобки обозначают взятие фурье-образа с учетом зависимости (15).

Таким образом, выражения (12), (13) и (16) дают формальное решение рассматриваемой задачи. Дальнейшее упрощение этих формул невозможно, поскольку зависимость (15) для движения налетающей частицы в потенциале Томаса–Ферми (и его модификаций) не выражается в аналитическом виде (в отличие от движения в кулоновском поле).

Для проведения численных расчетов удобно от независимой переменной времени ( $t$ ) перейти к независимой переменной  $R$  — расстоянию от налетающей частицы до ядра. С этой целью воспользуемся стандартным представлением траекторного времени и угла поворота радиуса-вектора налетающей частицы через  $R$  и параметры  $\rho, v_i$ :

$$t(R, \rho, v_i) = \int_{r_{min}(\rho, v_i)}^R \frac{dR}{v_r(R, \rho, v_i)}, \quad (17)$$

$$\varphi(R, \rho, v_i) = \rho v_i \int_{r_{min}(\rho, v_i)}^R \frac{dR}{v_r(R, \rho, v_i) R^2}. \quad (18)$$

Здесь  $v_r(R, \rho, v_i)$  — радиальная скорость:

$$v_r(R, \rho, v_i) = \sqrt{v_i^2 + 2|U(R)| - v_i^2 \rho^2 / R^2}, \quad (19)$$

$r_{min}(\rho, v_i)$  — минимальное расстояние сближения налетающей частицы с центром рассеивающего потенциала, определяемое решением уравнения

$$v_r(R, \rho, v_i) = 0. \quad (20)$$

Используя (16)–(19), можно вычислить декартовы проекции (на фокальные оси координат) фурьеобраза излучающего дипольного момента системы:

$$\begin{aligned} (\mathbf{D}_{pol})_x(\omega, \rho) = 2 \int_{r_{min}}^{\infty} \cos(\varphi(R, \rho)) \cos(\omega t(R, \rho)) \times \\ \times D_p(\omega, R) \frac{dR}{v_r(R, \rho)}, \end{aligned} \quad (21)$$

где  $D_p(\omega, R)$  определяется модулем вектора (10). Выражение для компоненты  $(\mathbf{D}_{pol})_y$  получается путем замены в (21) косинусов на синусы.

Статистическое приближение, как известно, хорошо описывает свойства атома в области локализации большинства его электронов. В областях же вблизи ядра и на границе иона, где становятся существенными одноэлектронные эффекты, точность статистического приближения заметно падает. В частности, на границе иона электронная плотность и локальная плазменная частота вообще обращаются в нуль в статистической модели. Здесь существенный вклад в поляризацию вносят одноэлектронные возбуждения. Их следует учесть в области частот порядка потенциала ионизации остова, где размеры орбиты электрона становятся больше размеров остова иона в статистической модели. Фактически здесь наряду с коллективной плазменной частотой колебаний электронной плотности проявляются собственные колебания электрона в поле остова<sup>1)</sup>. Этот эффект можно приближенно учесть путем сдвига частоты  $\omega$  в формуле для поляризуемости мишени на величину  $\Delta\omega$ , так чтобы максимум фотопоглощения приходился на одноэлектронный потенциал ионизации.

Приведем результаты вычислений спектрального эффективного излучения для рассеяния электрона на ионе КП при следующих значениях параметров:  $v_i = 1.4$  а.е.,  $\omega = 0.9$  а.е. Выбор этих величин определен тем, что в условиях термодинамически

<sup>1)</sup> Авторы благодарны И. И. Собельману, указавшему на это обстоятельство.

равновесной плазмы наибольший интерес представляет излучение электронами тепловых энергий (поправка потенциала ионизации иона) фотонов с энергией, близкой к начальной энергии налетающей частицы (потенциал ионизации иона КП равен 1.16 а.е.)

Для расчета наведенного в ионном остове дипольного момента воспользуемся плотностью поляризуемости мишени в приближении Брандта–Лундквиста (формула (1)), сдвинутой по частоте на величину  $\Delta\omega = 0.6$  а.е. в сторону больших частот. Тогда частотная зависимость динамической поляризуемости ионного остова будет соответствовать своему квантовомеханическому аналогу.

Электронная плотность ионного остова, определяющая локальную плазменную частоту, рассчитывалась на основании численного интегрирования уравнения Томаса–Ферми–Дирака (с обменной и корреляционной поправками) с использованием приведенного ионного радиуса  $x_0 = 8.91$  отн. ед. Напомним, что приведенный ионный радиус есть отношение ионного радиуса  $R_0$  к радиусу Томаса–Ферми  $a_{TF} = 0.8853/Z^{1/3}$ .

В данном случае «локальный плазменный радиус» (см. (4)) равен  $r_p(\omega) = 2.77$  а.е.

Введем в рассмотрение характерный радиус излучения в крамерсовском пределе  $r_{eff}(\omega, v_i)$  (см. [9, 14]), определяющий частоту вращения электрона по орбите и являющийся решением уравнения

$$\frac{v_i^2}{2} + |U(r)| = \frac{\omega^2 r^2}{2}. \quad (22)$$

Эта величина определяет эффективное расстояние излучения по статическому каналу. Существенно, что в крамерсовском пределе величина  $r_{eff}(\omega, v_i)$  растет с увеличением начальной скорости.

Рассмотрим излучение фотона с энергией 0.9 а.е. при рассеянии электрона припороговой энергией (1 а.е.) на ионе КП. Зависимости проекций дипольного момента, наведенного в ионном остове на частоте излучаемого фотона, от прицельного параметра  $\rho$ , полученные в рамках рассматриваемой модели, представлены в табл. 2.

Расчет в статистическом потенциале Томаса–Ферми–Дирака показывает, что для прицельных расстояний, меньших 1.4 а.е., угол рассеяния превышает  $180^\circ$ , что соответствует началу явления за кручивания налетающей частицы вокруг мишени.

С другой стороны, для этих прицельных параметров нарушается условие квазиклассичности. Тем не менее, для расчета поляризационного канала это оказывается несущественным, поскольку малые расстояния до ядра дают в него малый вклад.

**Таблица 2.** Компоненты наведенного дипольного момента в ионе КII в зависимости от прицельного расстояния  
(значения приведены в а.е.)

$\rho$	1	1.5	2	2.5	3	4	5	6
$r_{\min}$	0.163	0.8	1.58	2.2	2.74	3.76	4.75	5.7
$\text{Re } Dp_x$	-0.1	1.48	1.0	1.48	2.4	0.73	0.36	0.16
$\text{Re } Dp_y$	-1.59	2.1	2.9	2.4	1.7	0.86	0.33	0.17
$\text{Im } Dp_x$	-0.37	1.15	-0.03	-0.22	1.05	0.88	0.29	0.13
$\text{Im } Dp_y$	-1	0.54	1.1	1.25	1.33	0.68	0.3	0.14

**Таблица 3.** Вклад различных проекций наведенного в осте КII дипольного момента в эффективное излучение по поляризационному каналу (значения приведены в а.е.)

Проекции	$x$ -проекция		$y$ -проекция		Полный
	Реальная	Мнимая	Реальная	Мнимая	
Поляризационный канал	$5.3 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-6}$	$5.4 \cdot 10^{-6}$	$2.4 \cdot 10^{-6}$	$1.46 \cdot 10^{-5}$

Результаты расчета по формулам (13)–(21) значений эффективного излучения (в атомных единицах) по поляризационному каналу с подразделением на вклады  $x$ - и  $y$ -проекций приведены в табл. 3.

Введем  $R$ -фактор, характеризующий относительный вклад поляризационного канала в тормозное излучение, по формуле

$$R(\omega) = \frac{d\kappa^{pol}(\omega)}{d\kappa^{st}(\omega)}. \quad (23)$$

Для сравнительной оценки относительной величины поляризационного канала воспользуемся результатом расчета вклада статического канала в рамках вращательного приближения (см. [9, 14]).

Расчет в модели Томаса–Ферми–Дирака для спектрального эффективного излучения по статическому каналу дает

$$\left\{ \frac{d\kappa_{st}^{rot}}{d\omega} \right\}_{TFD} (\text{КII}, \omega = 0.9 \text{ а.е.}) = 5.46 \cdot 10^{-6} \text{ а.е.}$$

Отсюда следует, что  $R$ -фактор в рамках вращательного приближения равен

$$\{R\}_{clas, TFD}^{BL, rot} (\text{КII}, \omega = 0.9 \text{ а.е.}) = 2.67. \quad (24)$$

Таким образом, классическая оценка для приведенных выше значений параметров дает следующую нижнюю границу для величины  $R$ -фактора на частоте вблизи потенциала ионизации иона КII для на-

летающей частицы пороговых энергий ( $T$  — энергия налетающей частицы):

$$R(\text{КII}, \omega \approx I_p \approx T) \geq 2, \quad (25)$$

и, следовательно, вклад поляризационного канала заметно превышает вклад статического в эффективное излучение тормозного излучения.

#### 4. ОПИСАНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ В РАМКАХ ОБОБЩЕННОГО ВРАЩАТЕЛЬНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

В теории статического тормозного излучения существует весьма эффективный метод приближенного расчета интенсивности излучения квазиклассической частицы (так называемое вращательное приближение [9, 14]) который результативно оказался более оправданным, чем последовательное классическое рассмотрение. Физическое обоснование данного подхода лежит в пространственной ограниченности области, ответственной за излучение налетающей частицей достаточно высокочастотных фотонов.

Высокочастотность, отвечающая области так называемой крамерсовой электродинамики, понимается в смысле выполнения неравенства

$$\omega > \omega_{eff}^{Coul} = \frac{\omega Z_{eff}}{v_i^3}. \quad (26)$$

Отметим, что количественно вращательное приближение дает разумный результат и в случае  $\omega \approx \omega_{eff}^{Coul}$ .

Для сечения тормозного излучения, интегрального по прицельному параметру, эффективное расстояние ( $r_{eff}$ ) зависит только от излучаемой частоты и потенциала мишени и определяется уравнением (22).

Формально вращательное приближение соответствует подстановке в равенство для полного эффективного статического тормозного излучения делта-функции от разности частот  $\omega$  и частоты вращения налетающей частицы на расстоянии  $r_{eff}$ :

$$\omega_{rot}(r) = \frac{\sqrt{v_i^2 + 2|U(r)|}}{r}. \quad (27)$$

Таким образом, приходим к следующей формуле для спектрального эффективного излучения во вращательном приближении [9]:

$$\left\{ \frac{d\kappa_{st}(\omega)}{d\omega} \right\}_{rot} = \frac{8\pi}{3c^3 v_i} \int_0^\infty \left( \frac{dU(r)}{dr} \right)^2 \times \\ \times \sqrt{1 - \frac{U(r)}{v_i^2/2}} \delta(\omega - \omega_{rot}(r)) r^2 dr. \quad (28)$$

В формуле (28) утрачена информация о векторном характере излучающего дипольного момента налетающей частицы. Это связано с тем, что в высокочастотном приближении (26) основной вклад в сечение процесса дает  $x$ -компоненту дипольного момента налетающей частицы. Иная ситуация для поляризационного канала: для приведенных в табл. 3 параметров вклады обеих проекций примерно равны. Поэтому при обобщении вращательного приближения с целью учета поляризационного канала необходимо принять во внимание особенности пространственного формирования обеих декартовых проекций дипольного момента остова иона на оси фокальной системы координат.

Анализ показывает, что фурье-компоненты  $y$ -проекции излучающего дипольного момента остова мишени определяются расстояниями порядка  $r_p(\omega)$ , в то время как  $x$ -компонента определяется расстояниями наибольшего сближения налетающей частицы с мишенью  $r_{min}$ .

Поэтому естественно сделать следующее обобщение вращательного приближения для поляризационного канала:

$$\left\{ \frac{d\kappa_{pol}(\omega)}{d\omega} \right\}_{rot} = \left\{ \frac{d\kappa_{pol}(\omega)}{d\omega} \right\}_x^{rot} + \left\{ \frac{d\kappa_{pol}(\omega)}{d\omega} \right\}_y^{rot}, \quad (29)$$

где

$$\left\{ \frac{d\kappa_{pol}(\omega)}{d\omega} \right\}_x^{rot} = \\ = \frac{8\pi}{3c^3 v_i^2} \left[ \frac{|f_x^{pol}(\omega, R)|^2 v_r(R, \rho=0)}{|d\omega_{rot}/dR|} \right]_{R=r_{eff}(\omega)}, \quad (29a)$$

и

$$\left\{ \frac{d\kappa_{pol}(\omega)}{d\omega} \right\}_y^{rot} = \\ = \frac{8\pi}{3c^3 v_i^2} \left[ \frac{|f_y^{pol}(\omega, R)|^2 v_r(R, \rho=0)}{|d\omega_{rot}/dR|} \right]_{R=r_p(\omega)}. \quad (29b)$$

Выражение для проекции зависящей от частоты поляризационной силы имеет вид

$$f_{x,y}^{pol} = \frac{\omega^2 R_{x,y}}{R^3} \int_0^R \beta(r, \omega) 4\pi r^2 dr. \quad (30)$$

Заметим, что формулу (30) можно переписать следующим образом:

$$f_{x,y}^{pol} = \frac{R_{x,y}}{R^3} N_{eff}(R, \omega). \quad (30a)$$

Здесь

$$N_{eff}(R, \omega) = \omega^2 \int_0^R \beta(r, \omega) 4\pi r^2 dr \quad (31)$$

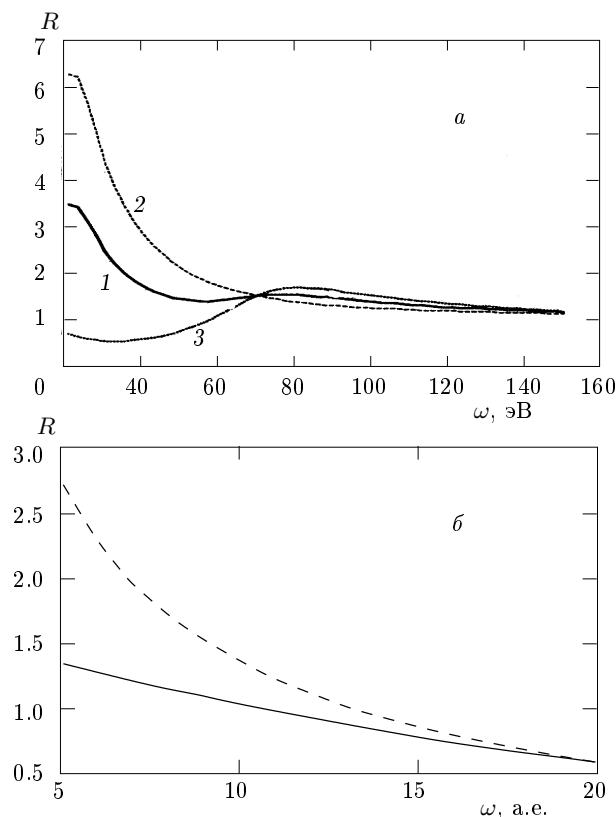
— зависящий от частоты и расстояния до ядра мишени эффективный электронный заряд, определяющий сечение тормозного излучения по поляризационному каналу.

Формулы (29)–(31) соответствуют простой физической интерпретации поляризационного тормозного излучения в духе классической электродинамики как излучения, возникающего вследствие ускорения эффективного электронного заряда мишени под действием силы со стороны рассеивающейся налетающей частицы.

В соответствии с разбиением спектрального эффективного излучения по поляризационному каналу на сумму вкладов двух проекций наведенного дипольного момента мишени для спектрального  $R$ -фактора в рамках обобщенного вращательного приближения можно записать

$$R^{rot}(\omega) = \frac{1}{2} (R_x^{rot}(\omega) + R_y^{rot}(\omega)). \quad (32)$$

Численный коэффициент  $1/2$  в (32) возник вследствие приближенной замены квадратов синуса и косинуса угла поворота налетающей частицы на их среднее значение.



**Рис. 3.** а) Частотная зависимость \$R\$-фактора в различных вариантах обобщенного вращательного приближения, когда в сечении ПТИ выделяется: (1) эффективный радиус статического канала, (2) «плазменный» радиус, (3) их полусумма. б) Сравнение \$R\$-фактора, вычисленного в обобщенном вращательном приближении (сплошная линия), с высокочастотным \$R\$-фактором (штриховая линия) для пороговых энергий налетающей частицы на ионе КИІ

На рис. 3а приведены частотные зависимости трех типов \$R\$-факторов, фигурирующих в формуле (32), для иона КІІ и пороговых энергий налетающей частицы. Существенно, что величины \$R\$-факторов сравниваются вдали от порога ионизации мишени. Вблизи порога (для рассматриваемых энергий налетающей частицы) превалирует вклад \$y\$-компоненты.

Анализ в рамках рассматриваемого приближения показывает, что с ростом энергии налетающей частицы относительный вклад \$x\$-компоненты возрастает, достигая своего максимального значения при энергии \$(T = v\_i^2/2)\$, определяемой равенством

$$r_{eff}(T, \omega) = r_p(\omega). \quad (33)$$

Физический смысл формулы (33) ясен: обобщенное вращательное приближение предсказывает оп-

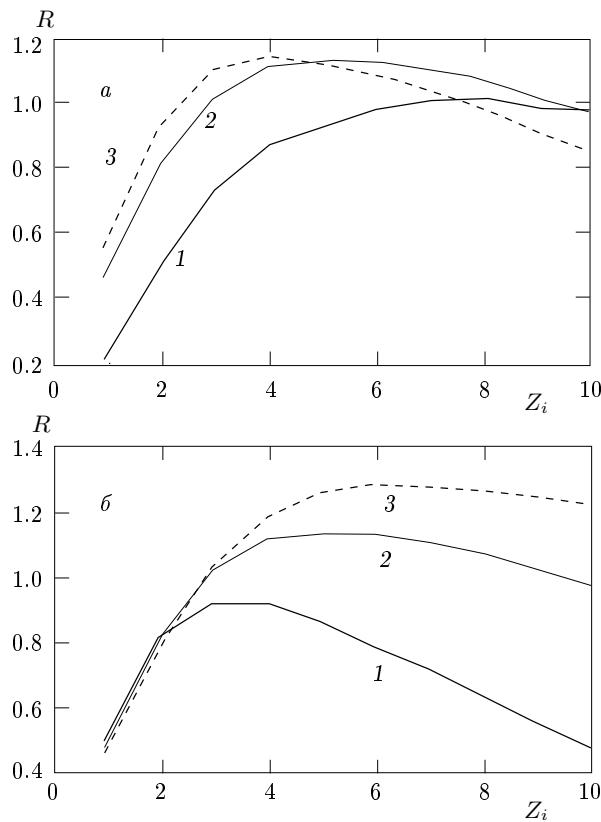
тимальное значение начальной энергии налетающей частицы, при котором эффективный радиус излучения по статическому каналу совпадает с «плазменным» радиусом, соответствующим максимуму пространственной плотности поляризуемости мишени на данной частоте \$\omega\$.

Для \$\hbar\omega = 24.5\$ эВ энергия налетающей частицы, удовлетворяющая уравнению (33), равна: \$T\_{opt} = 75\$ эВ при рассеянии на ионе КІІ.

Использование данной модели позволяет ответить на важный вопрос: начиная с каких частот «работает» высокочастотное приближение для поляризационного канала тормозного излучения. Сравнение результатов расчета в обобщенном вращательном приближении с высокочастотным спектральным \$R\$-фактором приведено на рис. 3б. Из этого рисунка видно, что высокочастотное приближение при рассеянии налетающей частицы пороговой энергии на ионе КІІ справедливо для \$\omega > \omega^{hf} = 20\$ а.е. С ростом энергии налетающей частицы величина \$\omega^{hf}\$ возрастает.

Из рис. 3 вытекают следующие важные следствия расчетов в рамках обобщенного вращательного приближения. Вклады поляризационного и статического каналов в спектральное сечение тормозного излучения на ионе КІІ для электронов пороговых энергий сравниваются (\$R = 1\$) на частоте \$\omega^\* = 10\$ а.е. Максимум \$R\$-фактора достигается для частот порядка потенциала ионизации мишени. При этом обобщенное вращательное приближение дает следующее значение для \$R\$-фактора: \$R\_{max}^{rot} \approx 3\$. Заметим, что данная величина представляет собой оценку снизу, поскольку модель Брандта–Лундквиста занижает величину поляризуемости. С другой стороны, квантовый расчет дает несколько меньшее значение \$R\_{max}\$ и существенно более низкое значение частоты \$\omega^\*\$.

На рис. 4 представлены зависимости спектрального \$R\$-фактора от заряда иона для разных частот тормозного излучения (а) и зарядов ядра (б), вычисленные для налетающих частиц пороговых энергий. Данный рисунок демонстрирует наличие (в рамках используемого здесь обобщенного вращательного приближения) оптимального заряда иона \$Z\_i^{opt}\$, при котором величина \$R\$-фактора (на характерной для данного иона частоте) максимальна. Из рис. 4а следует, что оптимальный заряд \$Z\_i^{opt}\$ растет с уменьшением частоты излучения, а максимальное значение \$R\$-фактора при этом несколько уменьшается. С ростом заряда ядра иона (рис. 4б) величина \$Z\_i^{opt}\$ смещается в область больших значений, а величина \$R\$-фактора заметно увеличивается. В то же



**Рис. 4.** Вычисления в обобщенном вращательном приближении зависимостей  $R$ -фактора от заряда иона на фиксированной частоте, кратной частоте ионизации мишени в модели Томаса-Ферми  $\omega = kT_p^{TF}$ : (а) как функции заряда иона на различных частотах:  $k = 1$  (1), 2 (2), 3 (3); (б) как функции заряда иона ( $k = 2$ ) при различных зарядах ядра:  $Z = 30$  (1), 60 (2), 90 (3)

время для малых зарядов иона  $R$ -факторы, вычисленные на соответствующих (разных!) характерных частотах, не зависят от заряда ядра.

## 5. КВАНТОВЫЙ РАСЧЕТ ТОРМОЗНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА МНОГОЭЛЕКТРОННОМ АТОМЕ (ИОНЕ)

Вычислим эффективное излучение при сильно неупругом рассеянии налетающей частицы на многоэлектронном ионе с учетом поляризационного канала для квантового движения налетающего электрона.

Отметим, что квантовый расчет тормозного излучения по статическому каналу для иона Томаса-Ферми был впервые проведен в работе [12]. Результат оказался в хорошем соответствии с последова-

тельными квантовомеханическими вычислениями, сделанными для хартри-фоковского остова мишени, и, кроме того, подтвердил высокую точность полу-классического вращательного приближения.

Квантовый расчет существенно упрощается в силу сферической симметрии рассеивающего потенциала. В этом случае можно применить стандартный метод [23] разложения волновой функции налетающей частицы по сферическим гармоникам или квантовому числу орбитального момента  $l$ . Соответствующая фиксированному значению  $l$  составляющая волновой функции представляет собой произведение радиальной и угловой частей. Угловая часть, как известно, является шаровой функцией, а радиальная часть  $u(r, l, p)$  удовлетворяет уравнению Шредингера со следующим граничным условием на бесконечности:

$$u(r \rightarrow \infty, l, p) \rightarrow \frac{2}{r} \times \sin \left( pr + \frac{Z_i}{p} \ln(2pr) - \frac{\pi}{2} l + \delta(l, p) \right). \quad (34)$$

Здесь  $p$  — импульс налетающей частицы,  $\delta(l, p) = \delta^{Coul}(l, p) + \Delta\delta(l, p)$  — полный сдвиг фаз, равный сумме кулоновского  $\delta^{Coul}(l, p)$  и некулоновского  $\Delta\delta(l, p)$  сдвигов фаз, который может быть вычислен по формуле [24]

$$\sin(\Delta\delta(l, p)) = \frac{1}{2p} \int_0^\infty \left( \frac{Z_i}{r} - |U(r)| r \right) \times u(r, l, p) u^{Coul}(r, l, p) r^2 dr. \quad (35)$$

Здесь  $u^{Coul}(r, l, p)$  — решение радиального уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом иона.

Для проведения численных вычислений удобно перейти к вспомогательной радиальной волновой функции:  $\nu(r, l, p) = r^{-l} u(r, l, p)$ , удовлетворяющей уравнению Шредингера:

$$\nu'' + 2 \frac{l+1}{r} \nu' + (p^2 - 2U(r)) \nu = 0 \quad (36)$$

(штрих означает дифференцирование по радиусу) со следующими граничными условиями:

$$\nu(0) = 1, \quad \nu'(0) = -\frac{Z}{l+1}. \quad (36a)$$

Здесь  $Z$  — заряд ядра иона. Чтобы удовлетворить асимптотике (34), введем нормировочный коэффициент  $N$  по формуле

$$N = \left\{ r^{l+1} \sqrt{\nu^2 + [p^{-1} \nu']^2} \right\}_{r \rightarrow \infty}. \quad (37)$$

**Таблица 4.** Частотные зависимости интенсивности тормозного излучения по статическому и поляризационному каналам на ионе КII, вычисленные в рамках обобщенного вращательного приближения и для квантового движения налетающей электронов (значения приведены в а.е.)

$\omega$	0.6	0.9	2	3	4	5.4	9	18	36
$W_{st}$	6.4(-6)	7.5(-6)	3.6(-6)	6.9(-6)	1(-5)	1.3(-5)	1.6(-5)	1.4(-5)	1(-5)
$W_{st}^{rot}$	3.6(-6)	5.5(-6)	8.6(-6)	9.4(-6)	9.7(-6)	9.6(-6)	9(-6)	7.4(-6)	5.4(-6)
$W_p$	3.7(-6)	1.1(-5)	7.9(-6)	6.5(-6)	5.8(-6)	4.4(-6)	2.6(-6)	1.6(-6)	8.2(-7)
$W_p^{rot}$	8.6(-6)	1.4(-5)	1.2(-5)	1(-5)	1.1(-5)	1(-5)	1(-5)	2.9(-6)	9.3(-7)

Окончательно имеем для волновой функции

$$u(r, l, p) = \left( \frac{2}{N} \right) r^{l+1} \nu(r, l, p). \quad (38)$$

С использованием функций (38) для спектральной интенсивности тормозного излучения получаем следующее выражение:

$$\frac{dW}{d\omega} = \frac{2}{3c^3 p_i^3 p_f} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) [ |M_{l,l+1}|^2 + |M_{l+1,l}|^2 ]. \quad (39)$$

Здесь введены радиальные матричные элементы  $M_{l,l+1}$ ,  $M_{l+1,l}$ , взятые между волновыми функциями (38) от модуля силы, действующей на налетающую частицу и вызывающей тормозное излучение по определенному каналу.

Для статического канала выражение для соответствующей силы дается производной от потенциала — это обычная сила, определяющая движение налетающей частицы в статическом поле ионамишени. Модуль силы, приводящей к излучению по поляризационному каналу, может быть получен из (30), он определяется недипольной динамической поляризуемостью ионного остова и равен

$$f^{pol} = -\frac{\omega^2}{R^2} \int_0^R \beta(r, \omega) 4\pi r^2 dr. \quad (40)$$

Поскольку выражение для пространственной плотности поляризуемости, вообще говоря, имеет мнимую часть, поляризационная сила (40) и соответствующий радиальный матричный элемент  $M_{l,l'}$  наряду с действительной также содержат мнимую компоненту. Радиальный матричный элемент от статической силы, естественно, чисто действительный.

Полный матричный элемент, фигурирующий в (39), является суммой статического и поляризационного слагаемых, причем их действительные части

дают интерференционное слагаемое в выражении для интенсивности тормозного излучения, а мнимая часть поляризационного матричного элемента в интерференцию каналов вклада не дает.

Формально бесконечный ряд по квантовому числу орбитального момента  $l$  в выражении для интенсивности тормозного излучения (39) быстро сходится для сильно неупругих процессов, которыми мы здесь интересуемся. Например, для  $\omega/T \approx 0.7-0.9$  (при рассеянии налетающей частицы на ионе КII) основной вклад в интенсивность тормозного излучения дают первые 3-4 слагаемых этого ряда. Заметим, что ситуация прямо противоположна для слабо неупругих процессов, когда ряд по  $l$  сходится очень медленно.

В табл. 4 приведены результаты вычислений спектральной интенсивности тормозного излучения по формуле (39) с учетом вклада поляризационного канала при сильно неупругом рассеянии налетающей частицы ( $\omega/T = 0.9$ ) на ионе КII. Для сравнения в таблице помещены аналогичные величины, рассчитанные в рамках обобщенного вращательного приближения. Все значения даны в атомных единицах. В скобках помещен показатель степени факто-ра 10, на который умножается число перед скобками.

Из табл. 4, в частности, следует, что наилучшее совпадение квантового расчета и обобщенного вращательного приближения имеет место для малых частот вблизи потенциала ионизации иона-мишени. Наихудшее — для частот порядка 9 а.е., когда спектральная интенсивность тормозного излучения по статическому каналу, вычисленная в рамках квантового подхода, достигает своего максимального значения. Расчет показывает, что для этой частоты основной вклад в излучение по поляризационному каналу дает мнимая часть наведенного в осте дипольного момента и орбитальное квантовое число

$l = 2$ . Максимум вклада поляризационного канала приходится на частоту вблизи потенциала ионизации мишени.

Анализ расчетных данных показывает, что в области малых и больших частот основной вклад в тормозное излучение по поляризационному каналу дает действительная часть наведенного в осте мишени дипольного момента. В области же «средних» частот ( $I_p < \omega \leq Z$ ) в поляризационном канале преувеличивает мнимая часть дипольного момента осте. Этот вывод следует также из расчетов ПТИ в рамках приближения случайных фаз с обменом для поляризуемости остеа [5].

На рис. 5 $a, b$  представлены результаты квантового расчета, соответственно, спектрального  $R$ -фактора и относительного вклада в интенсивность тормозного излучения интерференционного члена при рассеянии налетающей частицы на ионе КII для двух значений отношения  $\omega/T$ . Видно, что спектральный  $R$ -фактор имеет максимум вблизи потенциала ионизации мишени, ширина которого уменьшается с уменьшением степени неупругости процесса (отношения  $\omega/T$ ), в то же время значение  $R$ -фактора в максимуме при этом несколько увеличивается. Основное отличие от результатов обобщенного вращательного приближения состоит в том, что спектральный  $R$ -фактор, вычисленный для квантового движения налетающей частицы, более резко уменьшается с ростом частоты в области «средних» частот  $I_p < \omega \leq Z$ .

Рисунок 5 $b$  демонстрирует величину и характер межканальной интерференции как функцию частоты тормозного излучения. В частотном диапазоне  $\omega \leq I_p$  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 степени неупругости тормозного излучения роль интерференции падает, так как при этом пространственные области формирования статического и поляризационного каналов слабее перекрываются. Это видно из рис. 5 $b$ , откуда также следует, что для менее неупругого процесса частотный диапазон деструктивной интерференции оказывается несколько затянутым в сторону высоких частот. Для  $\omega \leq I_p$  характер и величина межканальной интерференции слабо зависят от степени неупругости

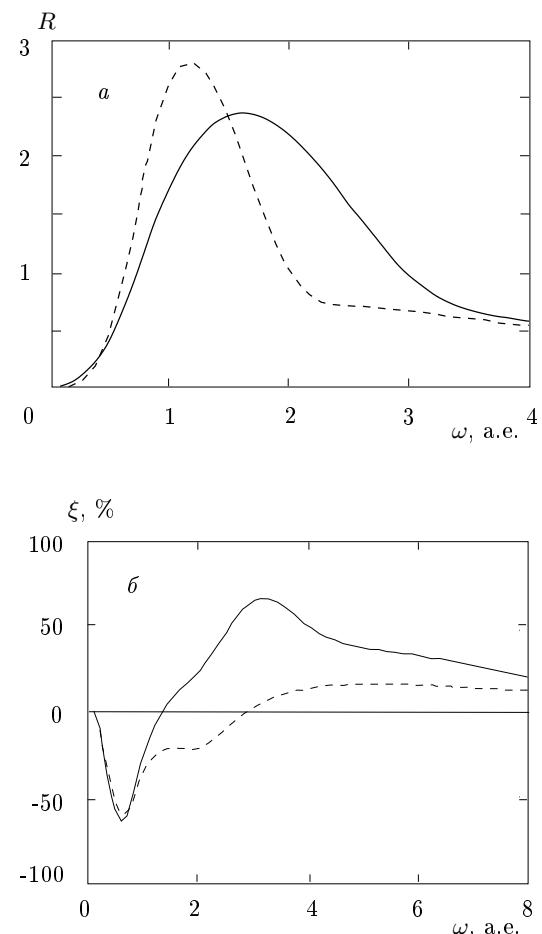


Рис. 5. Результаты квантового (по движению налетающей частицы) расчета спектрального  $R$ -фактора ( $a$ ) и вклада интерференции в интенсивность тормозного излучения ( $b$ ) для двух значений параметра неупругости  $\omega/T = 0.9$  (сплошная линия), 0.6 (штриховая линия) при рассеянии налетающей частицы на ионе КII

процесса.

Основной вывод квантового рассмотрения сводится к тому, что вклад поляризационного канала в интенсивность сильно неупругого тормозного излучения, возрастаая от нуля в области низких частот степенным образом [6], наиболее значителен вблизи частоты ионизации иона-мишени и резко уменьшается с ростом частоты вследствие эффектов проникновения налетающей частицы в осте мишени. При этом ширина частотного максимума  $R$ -фактора увеличивается с ростом неупругости процесса.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе развит универсальный подход к описанию поляризационных эффектов в тормозном излучении электронов тепловых энергий на многоэлектронном ионе в широком спектральном диапазоне с использованием модели локальной электронной плотности для поляризуемости мишени. Проведен анализ вклада поляризационного канала в спектральное сечение тормозного излучения для квазиклассического и квантового движений налетающей частицы с учетом ее проникновения в остов мишени и различных степеней неупругости процесса. Построено обобщенное вращательное приближение, позволяющее просто оценивать величину сечения ПТИ в рамках статистической модели ионамишени единым образом для всех зарядов ядра и степеней ионизации.

На основании проведенного анализа установлено, что вклад поляризационного канала в сечение тормозного излучения электронов тепловых энергий максимален вблизи частоты ионизации ионамишени. При этом величина  $R$ -фактора (отношения вклада каналов) примерно равняется двум. Спектральный  $R$ -фактор, возрастаюший степенным образом в области низких частот, резко уменьшается после достижения экстремального значения вследствие эффектов проникновения налетающей частицы в остов мишени. Ширина соответствующего максимума возрастает с ростом неупругости процесса. Для характерных частот порядка заряда иона (в атомных единицах)  $R$ -фактор составляет 10–15 процентов.

Межканальная интерференция в спектральной зависимости интенсивности тормозного излучения наиболее существенна вблизи потенциала ионизации мишени, составляя в экстремумах более 60% от суммарной интенсивности процесса. Для частот меньших порога ионизации интерференция носит деструктивный характер, а для больших частот — конструктивный. Роль межканальной интерференции уменьшается с уменьшением неупругости рассеяния налетающей частицы, поскольку при этом сильнее разделяются пространственные области формирования каналов тормозного излучения.

В рамках развитого в статье обобщенного вращательного приближения показано, что существует оптимальный заряд иона ( $Z_i^{opt}$ ), при котором величина спектрального  $R$ -фактора на частоте, кратной характерной частоте ионизации иона Томаса–Ферми, максимальна. Это значение уменьшается с ростом

частоты тормозного излучения и возрастает с увеличением заряда иона.

Таким образом, можно сделать вывод о важности поляризационных и интерференционных эффектов в тормозном излучении на многоэлектронных ионах для характерных плазменных значений параметров.

Авторы благодарны В. М. Буймистрову, В. И. Гервидсу, В. И. Когану, А. Б. Кукушкину, И. И. Собельману за полезные обсуждения и стимулирующие дискуссии.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 98-02-16763) и гранта МНТЦ № 856-98.

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Поляризационное тормозное излучение частиц и атомов*, под ред. В. Н. Цытовича, И. М. Ойрингеля, Наука, Москва (1987).
2. A. Dubois and A. Maquet, Phys. Rev. A **40**, 4288 (1989).
3. В. А. Астапенко, А. Б. Кукушкин, ЖЭТФ **111**, 419 (1997).
4. V. Korol and A. V. Solov'yov, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **30**, 1105 (1997).
5. А. В. Король, А. Г. Лялин, О. И. Оболенский, А. В. Соловьев, ЖЭТФ **114**, 458 (1998).
6. L. Bureyeva and V. Lisitsa, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **31**, 1477 (1998).
7. В. А. Астапенко, ЖЭТФ **115**, 1619 (1999).
8. N. F. Mott and H. S. W. Massey, *The theory of atomic collisions*, Oxford (1973).
9. V. I. Kogan, A. B. Kukushkin, and V. S. Lisitsa, Phys. Rep. **213**, 1 (1992).
10. R. H. Pratt and H. K. Tseng, Phys. Rev. A **11**, 1797 (1975).
11. В. И. Гервидс, В. И. Коган, Письма в ЖЭТФ **22**, 308 (1975).
12. В. П. Жданов, М. И. Чибисов, ЖТФ **47**, 1804 (1977).
13. В. П. Жданов, Физика плазмы **4**, 128 (1978).
14. В. И. Коган, А. Б. Кукушкин, ЖЭТФ **86**, 1164 (1987).

15. Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, *Теория многофотонных процессов в атомах*, Атомиздат, Москва (1978).
16. М. Я. Амусья, *Атомный фотoeffект*, Наука, Москва (1987).
17. W. Brandt and S. Lundqvist, Phys. Rev. **139**, A612 (1965).
18. П. Гамбош, *Статистическая теория атома и ее применение*, ИЛ, Москва (1951).
19. А. В. Виноградов, В. П. Шевелько, Труды ФИАН **119**, 158 (1980).
20. А. В. Виноградов, О. И. Толстыхин, ЖЭТФ **96**, 1204 (1989).
21. А. В. Виноградов, О. И. Толстыхин, ЖЭТФ **96**, 61 (1989).
22. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, Москва (1967).
23. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
24. А. Мессиа, *Квантовая механика*, т. 1, Наука, Москва (1978).