

РАСЧЕТ ТОРМОЗНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМАХ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ЭНЕРГИЙ ФОТОНОВ

*В. П. Романихин**

*Российский федеральный ядерный центр —
Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
607190, Саров, Нижегородская обл., Россия*

Поступила в редакцию 4 сентября 2001 г.

Выполнен расчет полных спектров тормозного излучения на атомах криптона в диапазоне фотонных энергий 10–25000 эВ и лантана вблизи потенциала ионизации $4d$ -оболочки. Обобщенная поляризуемость атомов вычислялась на основе простого полуклассического приближения локальной электронной плотности и экспериментальных данных по фотопоглощению. Проведено сравнение с результатами расчета методом искаженных парциальных волн (DPWA) для Kr и с экспериментальными данными для La.

PACS: 34.80.Lx

1. ВВЕДЕНИЕ

Тормозное излучение, возникающее при столкновениях заряженных частиц с атомами, формируется за счет двух различных механизмов. Первый из них обусловлен ускорением частицы в статическом поле атома [1], второй — динамической поляризацией атома электромагнитным полем налетающей частицы [2]. Спектральное распределение фотонов с энергией ω , испускаемых частицей при торможении в статическом поле атома, описываются гладкой кривой, убывающей приблизительно как $1/\omega$. В отличие от статического, поляризационный механизм обычно приводит к появлению довольно мощных пиков и провалов в спектрах излучения вблизи потенциалов ионизации атомных оболочек.

Вычисление спектров тормозного излучения электронов с учетом поляризационного механизма уже выполнено для целого ряда атомов (см. например [3–6]). Из результатов этих работ можно сделать вывод, что для расчета вклада поляризационного канала в общее сечение тормозного излучения необходимо знание обобщенной поляризуемости атомов мишени. Точная квантовомеханическая оценка этой величины чрезвычайно трудоемка в вычислительном отношении, поэтому разработка простых

приближенных методов расчета представляется достаточно актуальной задачей.

В настоящей работе обобщенная поляризуемость атомов рассчитывается на основе простого полуклассического приближения локальной электронной плотности [7, 8] и экспериментальных данных по фотопоглощению, что избавляет от сложных вычислений с учетом межэлектронных корреляций. Все расчеты проведены в атомной системе единиц $e = m = \hbar = 1$.

2. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

В дипольном приближении спектральная интенсивность излучения фотонов с энергией ω , записанная в форме ускорения и усредненная по поляризациям фотонов, равна [1, 9]

$$\omega \frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{4p_2}{3(2\pi c)^3 p_1} \int |\langle \psi_2^* | \mathbf{a} | \psi_1 \rangle|^2 d\Omega_2, \quad (1)$$

где p_1 и ψ_1 — импульс и волновая функция электрона до излучения, p_2 и ψ_2 — импульс и волновая функция электрона после излучения, $d\Omega_2$ — элемент телесного угла рассеяния электрона, \mathbf{a} — оператор ускорения. Волновые функции ψ нормированы на одну частицу в единице объема.

Будем считать, что пространственная ориентация атомов мишени произвольна, поэтому рассеяние электронов является аксиально-симметричным.

*E-mail: zvenigorod@expd.vniief.ru

В этом случае волновые функции электрона ψ допускают разложение [9]

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{R_l(r, p)}{r}, \quad (2)$$

где θ — угол между векторами \mathbf{p} и \mathbf{r} , $R_l(r, p)$ — радиальная волновая функция электрона с импульсом p и угловым моментом l , P_l — полиномы Лежандра. После подстановки (2) в (1) и интегрирования по угловым переменным получаем

$$\omega \frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{32p_2}{3c^3 p_1} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) (|M_{l,l+1}|^2 + |M_{l+1,l}|^2), \quad (3)$$

где

$$M_{l,l'} = \int_0^{\infty} R_l(r, p_1) a R_{l'}(r, p_2) dr. \quad (4)$$

Оператор ускорения a записывается в виде суммы статической и поляризационной составляющих [8]

$$a = a_{st} + a_{pol}, \quad (5)$$

$$a_{st} = \frac{\partial U(r)}{\partial r}, \quad a_{pol} = -\frac{\omega^2}{r^2} \alpha(\omega, r),$$

где $U(r)$ — потенциал атома, $\alpha(\omega, r)$ — обобщенная поляризуемость атома, взятая в координатной форме. Поскольку величина $\alpha(\omega, r)$ является существенно комплексной, выражение (3) будет описывать также и интерференцию между статическим и поляризационным каналами излучения.

Как уже упоминалось во Введении, вычисление обобщенной поляризуемости $\alpha(\omega, r)$ представляет собой весьма сложную квантовомеханическую задачу, поэтому для ее расчета использован полумэмпирический подход, подобный предложенному в работе [5]. С этой целью функция $\alpha(\omega, r)$ записывается в виде произведения

$$\alpha(\omega, r) = \alpha(\omega) G(\omega, r), \quad (6)$$

где $\alpha(\omega)$ — обычная дипольная поляризуемость атома.

В работе [5] показано, что вся информация о межэлектронных корреляциях содержится в множителе $\alpha(\omega)$, поэтому для расчета функции $G(\omega, r)$ авторы [5] применяли приближение Хартри–Фока. В настоящей работе использована более простая модель локальной электронной плотности [7, 8], согласно которой атом рассматривается как неоднородное плазменное образование с электронной плотностью $\rho(r)$ и плазменной частотой $\omega_p(r)$:

$$\omega_p^2(r) = 4\pi\rho(r). \quad (7)$$

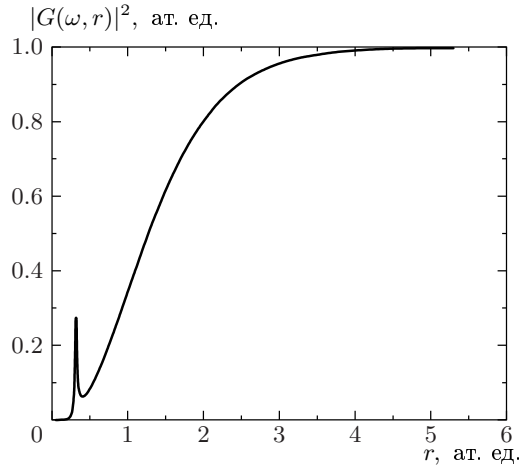


Рис. 1. Функция $|G(\omega, r)|^2$ для Kr в приближении локальной электронной плотности, $\omega = 500$ эВ

Поглощение излучения частоты ω в рамках этой модели происходит при выполнении резонансного условия $\omega = \omega_p(r)$, а выражение для обобщенной поляризуемости имеет вид

$$\alpha_L(\omega, r) = \int_0^r \frac{\omega_p^2(r') r'^2 dr'}{\omega_p^2(r') - \omega^2} + i \frac{\pi \omega^2 r_p^2(\omega)}{2 d\omega_p^2(r)/dr} \Theta(r - r_p(\omega)), \quad (8)$$

где $r_p(\omega)$ — функция, обратная к (7), Θ — функция Хевисайда.

Из анализа, проделанного в работе [8], следует, что модель локальной электронной плотности дает вполне разумную аппроксимацию для поляризуемости атома. Используя выражение (8), легко получить требуемое приближение для функции $G(\omega, r)$:

$$G(\omega, r) \approx \frac{\alpha_L(\omega, r)}{\alpha_L(\omega, \infty)}. \quad (9)$$

На рис. 1 представлен результат расчета функции $G(\omega, r)$ для атома Kr при энергии фотона ω , равной 500 эВ. Обращает на себя внимание резонансный пик на расстоянии, определяемом условием $\omega = \omega_p(r)$.

В отличие от $G(\omega, r)$, дипольная поляризуемость $\alpha(\omega)$ должна быть известна по возможности точно, поэтому она рассчитывалась на основе компиляции эмпирических данных программой OPTCON компании Moxgraf. Дипольная поляризуемость может быть вычислена также по экспериментальным значениям сечения фотопоглощения $\sigma_\gamma(\omega)$ при помо-

щи дисперсионного соотношения и оптической теоремы [2, 5]

$$\alpha(\omega) = \frac{c}{2\pi^2} \int_0^\infty d\omega' \frac{\sigma_\gamma(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} + i \frac{c}{4\pi\omega} \sigma_\gamma(\omega). \quad (10)$$

3. НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ РАСЧЕТА

Радиальные волновые функции $R_l(r, p)$ рассчитывались фазовым методом [10]. Этот метод обеспечивает их удобную параметризацию, упрощая тем самым вычисление интегралов (4). Использовалось следующее представление волновых функций

$$R_l(r, p) = \exp(A_l) pr [j_l(pr) \cos \delta_l - n_l(pr) \sin \delta_l], \quad (11)$$

где j_l и n_l — сферические функции Бесселя, δ_l — частичные фазовые сдвиги. Амплитудные функции $A_l(r)$ и фазовые сдвиги $\delta_l(r)$ получаются из дифференциальных уравнений

$$\frac{d\delta_l}{dr} = -2pr^2 U(r) [j_l(pr) \cos \delta_l - n_l(pr) \sin \delta_l]^2, \quad (12)$$

$$\frac{dA_l}{dr} = -2pr^2 U(r) [j_l(pr) \cos \delta_l - n_l(pr) \sin \delta_l] \times [j_l(pr) \sin \delta_l + n_l(pr) \cos \delta_l]. \quad (13)$$

Радиальные волновые функции $R_l(r, p)$ в случае больших значений углового момента l мало отличаются от неискаженных волновых функций свободного электрона. Поэтому при $l > l_{max}$ фазовые сдвиги считаются равными нулю, а вместо $R_l(r, p)$ подставляются сферические функции Бесселя $j_l(pr)$. Величину l_{max} можно грубо оценить из следующих соотношений:

$$l_{max} \approx pr_{max}, \quad U(r_{max}) \approx \varepsilon \frac{p^2}{2}, \quad (14)$$

где ε — некоторое малое число, характеризующее степень искажения волновой функции.

В качестве потенциала атома $U(r)$ использовалась простая аналитическая аппроксимация [11], полученная путем подгонки к точному потенциалу Хартри–Фока

$$U(r) = -\frac{Z}{r} \sum_{j=1}^3 A_j \exp(-\alpha_j r), \quad (15)$$

где A_j и α_j — подгоночные коэффициенты, Z — заряд ядра атома. Эта аппроксимация позволяет также легко вычислить плазменную частоту (7)

$$\omega_p^2(r) = \frac{Z}{r} \sum_{j=1}^3 A_j \exp(-\alpha_j r) \alpha_j^2. \quad (16)$$

Опыт показал, что использование аналитического потенциала (15) значительно ускоряет расчет и не вносит заметных погрешностей в результат.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Результаты расчета сечений полного тормозного излучения, возникающего при рассеянии электронов с энергиями 1, 5, 10 и 25 кэВ на атоме криптона, показаны на рис. 2–5 тонкими линиями. На этих же рисунках представлены результаты расчетов, полученные в работе [6] методом искаженных парциальных волн (DPWA). Они изображены толстыми линиями.

В целом результаты наших расчетов удовлетворительно согласуются с результатами [6]. В области энергий фотонов $\omega = 10$ –100 эВ наблюдается пик, обусловленный вкладом виртуальных дипольных возбуждений из 4s- и 4p-подоболочек. Для энергий фотонов $\omega = 100$ –1000 эВ в полном спектре тормозного излучения появляется второй максимум, связанный с дипольными возбуждениями электронов промежуточных 3s-, 3p- и 3d-подоболочек. Для энергий фотонов, превышающих 2000 эВ, полное сечение довольно монотонно зависит от ω , за исклю-

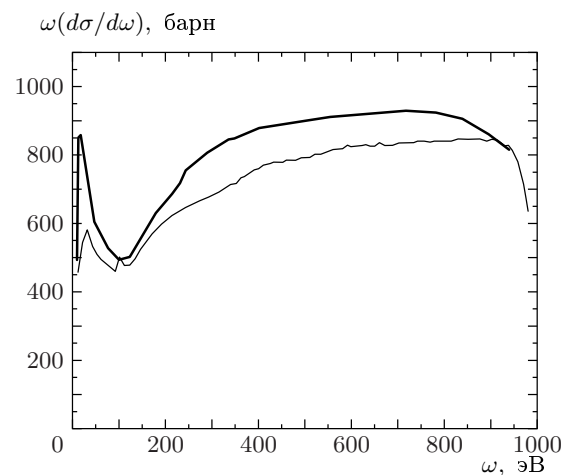


Рис. 2. Сечения полного тормозного излучения электронов с энергией 1 кэВ на атоме Кр. Жирная кривая — DPWA [6], тонкая кривая — приближение локальной плотности

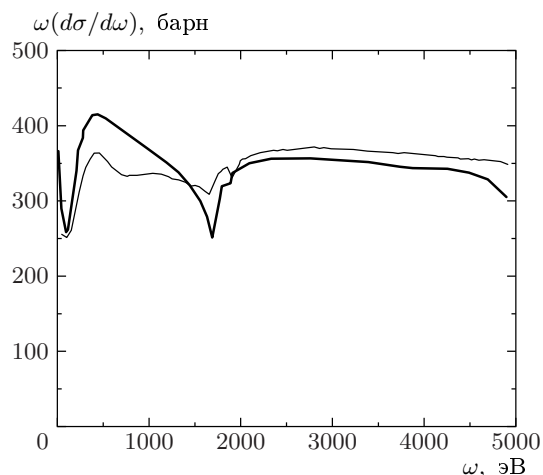


Рис. 3. Сечения полного тормозного излучения электронов с энергией 5 кэВ на атоме Kr. Жирная кривая — DPWA [6], тонкая кривая — приближение локальной плотности

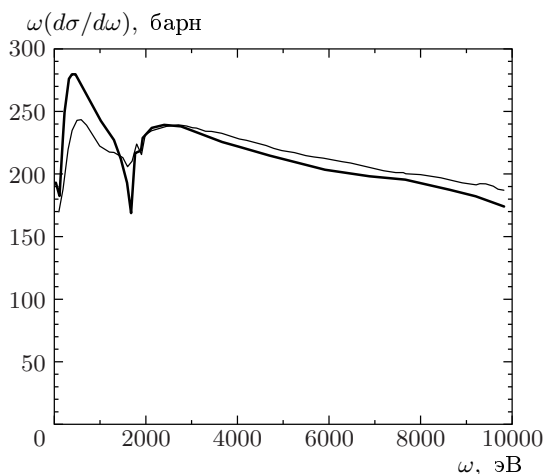


Рис. 4. Сечения полного тормозного излучения электронов с энергией 10 кэВ на атоме Kr. Жирная кривая — DPWA [6], тонкая кривая — приближение локальной плотности

чением области вблизи потенциалов ионизации 2s- и 2p-подоболочек атома Kr.

Различия в спектрах тормозного излучения, рассчитанных этими двумя методами, проявляются, главным образом, в мягкой области спектров. Как правило, пики и провалы в этой области, рассчитанные с использованием приближения локальной плотности, оказываются меньше по величине, чем рассчитанные методом DPWA. Одной из причин этого расхождения могут быть различия между значениями дипольной поляризуемости $\alpha(\omega)$ атомов Kr, получающимися в рамках метода DPWA, и экспе-

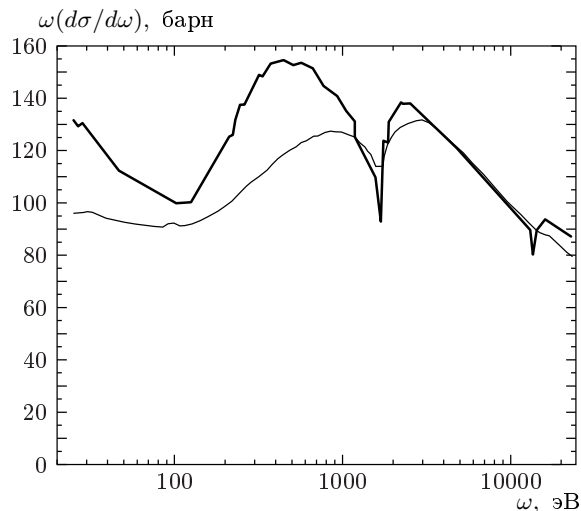


Рис. 5. Сечения полного тормозного излучения электронов с энергией 25 кэВ на атоме Kr. Жирная кривая — DPWA [6], тонкая кривая — приближение локальной плотности

риментальными значениями, использованными в настоящей работе. Действительно, качественная зависимость спектра поляризационного излучения от ω может быть оценена как

$$\left(\omega \frac{d\sigma}{d\omega}\right)_{pol} \approx |\omega^2 \alpha(\omega)|^2 g(\omega), \quad (17)$$

где $g(\omega)$ — некая гладкая монотонно убывающая функция. Из (17) видно, что $\alpha(\omega)$ самым непосредственным образом влияет на спектр поляризационного тормозного излучения.

На рис. 6 показаны графики $\text{Im}[\omega^2 \alpha(\omega)]$, предсказываемые методом DPWA [6] (толстая линия), и использованные в настоящей работе результаты компиляции экспериментальных данных программой OPTCON (тонкая линия). Видно, что различие между ними действительно составляет 15–20% в мягкой области спектра, что приводит к соответствующему различию в спектрах тормозного излучения.

Другой возможной причиной расхождений может являться использование волновых функции электрона, рассчитанных на невозмущенном потенциале атома в рамках приближения Хартри–Фока. Известно [2], что в этом случае результаты расчета сечений тормозного излучения, выполненные в форме ускорения и в форме длины, могут несколько различаться.

Результат расчета спектра поляризационного излучения на атоме лантана вблизи потенциала иони-

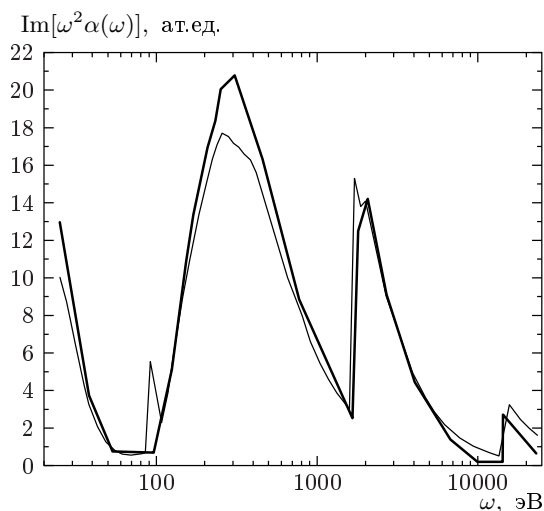


Рис. 6. Мнимая часть дипольной поляризуемости. Жирная линия — DPWA [6], тонкая линия — программа OPTCON

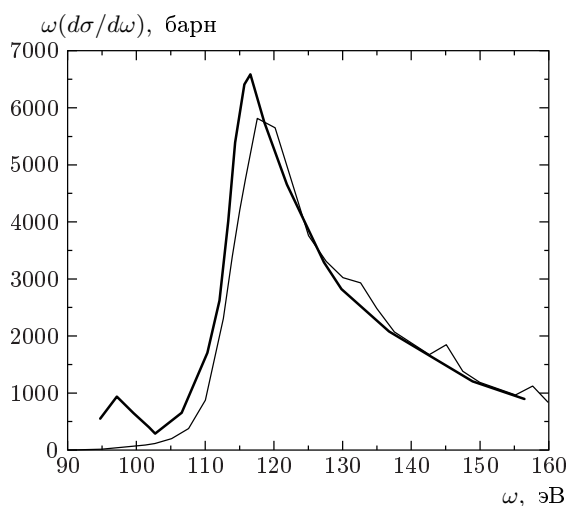


Рис. 7. Сечения поляризационного тормозного излучения электронов с энергией 500 кэВ на атоме La. Жирная кривая — эксперимент [12], тонкая кривая — приближение локальной плотности

зации $4d$ -подоболочки (тонкая кривая) показан на рис. 7 вместе с экспериментальными данными [5, 12] (жирная кривая). Из рисунка видно, что предлагаемый метод обеспечивает неплохое совпадение расчета с экспериментом.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен полуэмпирический метод теоретического описания и расчета спектров

полного тормозного излучения, позволяющий простыми средствами учесть явления, связанные с межэлектронными корреляциями. Вычислены спектры тормозного излучения на атомах криптона в диапазоне энергий 10–25000 эВ, а также на атомах лантана вблизи потенциала ионизации $4d$ -подоболочки. Несмотря на простоту моделей, использованных в теоретическом описании поляризационного тормозного излучения, результаты наших расчетов в целом удовлетворительно согласуются с результатами других вычислений и с известными экспериментальными данными. Следует отметить, что подобная методика может быть использована для расчета спектров тормозного излучения электронов и на более сложных объектах, например молекулах.

Работа выполнена при поддержке Международного научно-технического центра (проект № 1126).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1989).
2. М. Я. Амусья, *Тормозное излучение*, Энергоатомиздат, Москва (1990).
3. A. V. Korol, A. G. Lyalin, and A. V. Solov'yov, *J. Phys. B* **28**, 4947 (1995).
4. Н. Б. Авдонина, М. Я. Амусья, М. Ю. Кучиев, Л. В. Чернышева, *ЖТФ* **56**, 246 (1986).
5. А. В. Король, А. Г. Лялин, А. В. Соловьев, А. С. Шулаков, *ЖЭТФ* **109**, 1174 (1996).
6. А. В. Король, А. Г. Лялин, О. И. Оболенский, А. В. Соловьев, *ЖЭТФ* **114**, 458 (1998).
7. W. Brandt and S. Lundqvist, *Phys. Rev. A* **139**, 612 (1965).
8. В. А. Астапенко, Л. А. Буреева, В. С. Лисица, *ЖЭТФ* **117**, 496 (2000).
9. В. П. Жданов, М. И. Чибисов, *ЖТФ* **47**, 1804 (1977).
10. В. В. Бабилов, *Метод фазовых функций в квантовой механике*, Наука, Москва (1988).
11. F. Salvat, J. D. Martinez et al., *Phys. Rev. A* **36**, 467 (1987).
12. Т. М. Зимкина, А. С. Шулаков, А. П. Брайко, *Изв. АН СССР, сер. физ.* **48**, 1263 (1984).