

ЭФФЕКТЫ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ ПРИ ПЕРЕИЗЛУЧЕНИИ УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ МНОГОАТОМНЫМИ СИСТЕМАМИ

Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев*

Северный (Арктический) федеральный университет им. М. В. Ломоносова
163002, Архангельск, Россия

Поступила в редакцию 21 апреля 2013 г.

Развита теория переизлучения ультракоротких импульсов электромагнитного поля произвольными многоатомными системами, составленными из изолированных сложных атомов. Используемая методика позволяет провести точный учет пространственной неоднородности поля ультракороткого импульса и импульсов фотонов в процессах переизлучения. Получены угловые распределения спектров переизлучения для произвольного числа атомов в системе. Показано, что процессы интерференции амплитуд излучения фотона приводят к появлению характерных «дифракционных» максимумов. В качестве примеров рассмотрены одномерные, двумерные и трехмерные прямоугольные решетки, а также плоские и цилиндрические конструкции в качестве моделей плоских наносистем и нанотрубок.

DOI: 10.7868/S0044451013110023

1. ВВЕДЕНИЕ

Обычно явление дифракции рентгеновских лучей на различного рода периодических структурах описывается как рассеяние плоских волн бесконечной длительности по времени [1]. Процессы же рассеяния ультракоротких импульсов электромагнитного поля на такого рода структурах до настоящего времени мало исследованы. При этом подобные процессы могут дополнить рентгеноструктурный анализ возможностями спектроскопии с высоким времененным разрешением, связанный, в том числе, с аттосекундной спектроскопией и аттосекундной метрологией. Обычно в аттосекундной физике [2–4] в качестве мишней используются сравнительно простые объекты и подобное расширение объектов исследования представляется необходимым и лежащим в русле [5, 6] развития физики ультракоротких процессов. Процессам переизлучения ультракоротких импульсов посвящено сравнительно небольшое количество теоретических работ (см., например, [7] и приведенные там ссылки). В работе [8] в рамках классического описания рассмотрено рассеяние ультракороткого импульса на атоме. Сравнительно

недавно в работах [7, 9] в рамках последовательного квантовомеханического подхода, основанного на теории возмущений, развито описание рассеяния ультракороткого электромагнитного импульса на многоэлектронном атоме с учетом возбуждения мишени и недипольности электромагнитного взаимодействия, справедливое в широком спектральном диапазоне. Получены спектры рассеянного излучения для различных длительностей ультракороткого импульса. Такой подход, в принципе, применим и для импульсов аттосекундной и меньшей длительности, однако в случаях такой длительности возможен точный учет поля ультракороткого импульса в рамках теории внезапных возмущений, что позволяет проще описать процессы перерассеяния [10] и распространить теорию на случаи простейших молекул [11, 12]. Недавно в работе [13] на основе теории [10] рассмотрены процессы переизлучения ультракоротких импульсов электромагнитного поля линейными цепочками, составленными из изолированных многоэлектронных атомов. Показано, что процессы интерференции амплитуд излучения фотона приводят к появлению характерных «дифракционных» максимумов, которые становятся бесконечно узкими при стремлении к бесконечности числа атомов в цепочке. Подобное рассмотрение лишь иллюстрирует идею эффекта, однако для возможных

*E-mail: mezon98@mail.ru

практических применений необходимо более общее рассмотрение.

Отметим, что, как и в [13], в настоящей работе речь идет об излучении одного фотона всеми атомами мишени за время действия внезапного возмущения. После действия внезапного возмущения возбужденные атомы цепочки могут релаксировать с излучением фотонов, принадлежащих известным спектрам изолированных атомов. Однако если внезапное возмущение вызывает изменение скоростей атомных электронов, то и во время действия возмущения атомы могут излучать [10]. Классическим аналогом задачи в такой постановке является известный [14] пример о спектре излучения свободного электрона при внезапном изменении его скорости. Примером излучения одного фотона атомными электронами является поляризационное тормозное излучение [15, 16], при котором происходит переизлучение атомом импульса электромагнитного поля, действовавшего на атомные электроны со стороны пролетающей быстрой тяжелой заряженной частицы. В недавней работе [17] рассмотрены процессы поляризационного тормозного излучения при столкновениях быстрых ионов с многоатомными линейными цепочками, составленными из изолированных атомов. Получены интенсивности и угловые распределения спектров излучения для произвольного числа атомов в цепочке. Показано, что процессы интерференции амплитуд излучения фотонов приводят к заметному изменению спектральных угловых распределений поляризационного тормозного излучения по сравнению с распределениями при столкновениях с изолированным атомом.

В настоящей работе на основе подхода, предложенного в кратком сообщении [13], развита теория переизлучения ультракоротких импульсов электромагнитного поля произвольными многоатомными системами, составленными из изолированных сложных атомов. Развитая методика позволяет провести точный учет пространственной неоднородности поля ультракороткого импульса и импульсов фотонов в процессах переизлучения. Получены угловые распределения спектров переизлучения для произвольного числа атомов в мишени. Рассмотрены процессы переизлучения ультракоротких импульсов электромагнитного поля регулярными одномерными, двумерными и трехмерными системами, составленными из одинаковых многоэлектронных атомов. Показано, что процессы интерференции амплитуд излучения фотона приводят к появлению характерных «дифракционных» максимумов. В рассматриваемых нами случаях длительность ультракоротких

импульсов τ и время их взаимодействия с мишенью считаются значительно меньшими, чем характерное атомное время τ_a . При этом поле ультракороткого импульса учитывается точно в рамках приближения внезапных возмущений, а процесс излучения фотонов описывается по теории возмущений. В качестве примеров рассмотрены одномерные, двумерные и трехмерные прямоугольные решетки, а также плоские и цилиндрические конструкции в качестве моделей плоских наносистем и нанотрубок.

2. ОБЩАЯ ЧАСТЬ

Часто потенциалы электромагнитных волн — векторный \mathbf{A} и скалярный φ — выбираются так, чтобы скалярный потенциал был равен нулю. В такой калибровке потенциал взаимодействия электрона с внешним электромагнитным полем имеет вид (здесь и везде ниже используются атомные единицы)

$$V(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c}(\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) + \frac{1}{c^2}\mathbf{A}^2, \quad (1)$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса электрона, $c = 137$ ат. ед. — скорость света. Будем считать, что векторный потенциал поля волны следующим образом зависит от координат \mathbf{r} и времени t : $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\eta)$, где фаза волны $\eta = \omega_0 t - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}$, волновой вектор \mathbf{k}_0 такой, что $|\mathbf{k}_0| = \omega_0/c$, ω_0 — круговая частота. Проведем калибровочное преобразование:

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f, \quad \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t},$$

где $f = \mathbf{A} \cdot \mathbf{r}$. В результате

$$\mathbf{A}' = -\mathbf{k}_0 \left(\mathbf{r} \cdot \frac{d\mathbf{A}}{d\eta} \right), \quad \varphi' = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{r},$$

где

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -|\mathbf{k}_0| \frac{d\mathbf{A}}{d\eta}.$$

В такой калибровке потенциал взаимодействия электрона с электромагнитным полем $V(\mathbf{r}, t)$ примет вид

$$V(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c}(\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A}' + \mathbf{A}'\hat{\mathbf{p}}) + \frac{1}{c^2}(\mathbf{A}')^2 + \mathbf{E} \cdot \mathbf{r}. \quad (2)$$

Будем считать, что для нерелятивистского электрона справедливы оценки (очевидные, например, для электрона в атоме водорода или в атомах с небольшими, порядка единицы, зарядами ядер) $p \sim 1$ и $r \sim 1$, тогда в (2) можно пренебречь первыми двумя слагаемыми по сравнению с третьим, в результате потенциал взаимодействия электрона с электромагнитным полем примет простой вид [10]:

$$V(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{r}. \quad (3)$$

Рассмотрим отдельный атом, взаимодействующий с импульсом электромагнитного поля гауссовой формы:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp \left\{ -\alpha^2 \left(t - \frac{\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{r}}{c} \right)^2 \right\} \times \cos(\omega_0 t - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}), \quad (4)$$

где $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ — напряженность электрического поля, \mathbf{E}_0 — амплитуда, $\mathbf{k}_0 = (\omega_0/c)\mathbf{n}_0$, \mathbf{n}_0 — единичный вектор, направленный вдоль распространения импульса, \mathbf{r} — координаты точки наблюдения, c — скорость света, длительность импульса $\tau \sim 1/\alpha$. Отметим, что

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \mathbf{E}_0 \delta(t - \mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{r}/c)$$

при $\alpha \rightarrow \infty$. Согласно (3) потенциал взаимодействия атомных электронов с импульсом электромагнитного поля запишем в виде

$$V(t) \equiv V(\{\mathbf{r}_e\}, t) = \sum_{e=1}^{N_e} \mathbf{E}(\mathbf{r}_e, t) \cdot \mathbf{r}_e, \quad (5)$$

где $\{\mathbf{r}_e\}$ — совокупность координат атомных электронов ($e = 1, \dots, N_e$), N_e — число атомных электронов. Пусть α в (4) такое, что $V(t)$ эффективно отличается от нуля только в течение времени $\tau \sim \alpha^{-1}$, много меньшего характерных периодов невозмущенного атома, описываемого гамильтонианом H_0 . Тогда естественной основой для решения этой и подобных задач может служить приближение внезапных возмущений [18]. Для иллюстрации приближения внезапных возмущений в этом случае, видимо, проще всего рассмотреть формальное решение уравнения Шредингера

$$i\dot{\varphi} = (H_0 + V(t))\varphi, \quad (6)$$

где внезапное возмущение $V(t)$ действует в течение времени, значительно меньшего характерных периодов времени невозмущенной системы, описываемой гамильтонианом H_0 . Тогда при решении уравнения (6) можно (в течение времени действия возмущения $V(t)$) пренебречь эволюцией волновой функции под действием собственного гамильтониана H_0 и решать уравнение $i\dot{\varphi} = V(t)\varphi$. Из этого уравнения следует, что

$$\varphi(t) = \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t V(t) dt \right\} \varphi(t_0). \quad (7)$$

Поэтому амплитуда перехода атома из начального состояния φ_0 в какое-либо конечное состояние φ_n в результате действия внезапного возмущения $V(t)$ будет иметь вид [18]

$$a_{0n} = \langle \varphi_n | \exp \left(-i \int_{-\infty}^{\infty} V(t) dt \right) | \varphi_0 \rangle, \quad (8)$$

где φ_0 и φ_n принадлежат полной ортонормированной системе собственных функций невозмущенного гамильтониана H_0 . Возмущение (5) записано нами для атома, ядро которого расположено в начале системы координат. Если сместить положение атома на расстояние \mathbf{R} от начала системы координат, то взаимодействие (5) примет вид

$$\begin{aligned} V(t) &= \sum_{e=1}^{N_e} \mathbf{E}(\mathbf{r}_e + \mathbf{R}, t) \cdot (\mathbf{r}_e + \mathbf{R}) = \\ &= \sum_{e=1}^{N_e} \mathbf{E}(\mathbf{r}_e + \mathbf{R}, t) \cdot \mathbf{r}_e + \mathbf{E}(\mathbf{r}_e + \mathbf{R}, t) \cdot \mathbf{R}, \end{aligned} \quad (9)$$

где все \mathbf{r}_e по-прежнему отсчитываются от ядра атома. Нетрудно увидеть, используя явный вид (4) для $\mathbf{E}(\mathbf{r}_e + \mathbf{R}, t)$, что интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} dt$ от второго слагаемого (в правой части формулы (9)) не зависит от координат атомных электронов, поэтому второе слагаемое, согласно (8), не вносит вклад в амплитуду перехода a_{0n} . Таким образом, для атома, расположенного на расстоянии \mathbf{R} от начала системы координат, при использовании приближения внезапных возмущений можно без потери общности представить $V(t)$ в виде

$$V(t) \equiv V(\mathbf{r}_e, t) = \sum_{e=1}^{N_e} \mathbf{E}(\mathbf{r}_e + \mathbf{R}, t) \cdot \mathbf{r}_e. \quad (10)$$

Рассмотрим теперь систему из N невзаимодействующих одинаковых сложных атомов, каждый из которых содержит N_e электронов. Выберем для удобства начало системы координат совпадающим с положением атома с номером 1. Положение произвольного атома с номером a , где $a = 1, 2, \dots, N$, относительно этой системы координат будем описывать вектором \mathbf{R}_a . Обозначим как $\mathbf{r}_{a,e}$ координаты электрона, принадлежащего атому с номером a , координаты $\mathbf{r}_{a,e}$ отсчитываются относительно ядра атома с номером a . Тогда $\mathbf{R}_{a,e} = \mathbf{R}_a + \mathbf{r}_{a,e}$ — координаты электрона атома a относительно начала системы координат. Потенциал взаимодействия электронов системы атомов с ультракоротким импульсом электромагнитного поля равен

$$V(t) = \sum_{a=1}^N \sum_{e=1}^{N_e} \mathbf{E}(\mathbf{R}_a + \mathbf{r}_{a,e}, t) \cdot \mathbf{r}_{a,e}. \quad (11)$$

Потенциал (11) может считаться действующим внезапно при условии внезапности действия на какой-либо атом цепочки, $\tau \sim 1/\alpha \ll \tau_a$, и условии краткости взаимодействия $V(t)$ со всей системой из N атомов (с характерным размером L вдоль распространения импульса) по сравнению с характерным атомным временем τ_a или

$$\begin{aligned} \tau &\sim 1/\alpha \ll \tau_a \sim 1, \\ L/c &\ll \tau_a \sim 1. \end{aligned} \quad (12)$$

До взаимодействия с импульсом электромагнитного поля каждый атом считаем находящимся в основном состоянии $\varphi_0(\{\mathbf{r}_{a,e}\})$, где $\{\mathbf{r}_{a,e}\}$ — совокупность координат электронов, принадлежащих атому с номером a . Тогда волновая функция основного состояния всех NN_e электронов описанной выше системы из N невзаимодействующих одинаковых атомов равна

$$\Phi_0 = \varphi_0(\{\mathbf{r}_{1,e}\})\varphi_0(\{\mathbf{r}_{2,e}\}) \dots \varphi_0(\{\mathbf{r}_{N,e}\}). \quad (13)$$

В приближении внезапных возмущений эволюция начального состояния Φ_0 (13) имеет вид, подобный (7):

$$\Phi_0(t) = \exp \left(-i \int_{-\infty}^t V(t') dt' \right) \Phi_0, \quad (14)$$

причем $\Phi_0(t) \rightarrow \Phi_0$ при $t \rightarrow -\infty$. Волновую функцию произвольного возбужденного состояния отдельного атома (имеющего номер a в системе) будем обозначать $\varphi_{na}(\{\mathbf{r}_{a,e}\})$. Тогда волновая функция произвольных возбужденных состояний всех NN_e электронов описанной выше системы из N невзаимодействующих одинаковых атомов равна

$$\Phi_n = \varphi_{n1}(\{\mathbf{r}_{1,e}\})\varphi_{n2}(\{\mathbf{r}_{2,e}\}) \dots \varphi_{nN}(\{\mathbf{r}_{N,e}\}), \quad (15)$$

где $n = (n1, n2, \dots, nN)$ — совокупность квантовых чисел для электронных состояний всех атомов системы. Введем полную и ортонормированную систему функций

$$\Phi_n(t) = \exp \left(i \int_t^\infty V(t') dt' \right) \Phi_n, \quad (16)$$

причем $\Phi_n(t) \rightarrow \Phi_n$ при $t \rightarrow +\infty$. Очевидно, что амплитуду перехода из состояния Φ_0 в состояние Φ_n в результате действия внезапного возмущения (11) можно записать (ср. (8)) в виде

$$\begin{aligned} a_{0n} &= \langle \Phi_n | \exp \left(i \int_{-\infty}^\infty V(t') dt' \right) | \Phi_0 \rangle = \\ &= \langle \Phi_n(t) | \Phi_0(t) \rangle. \end{aligned} \quad (17)$$

Нас интересует переизлучение ультракороткого импульса в течение времени его взаимодействия с описанной выше системой из N атомов. Поэтому, как и в работах [10, 13], амплитуду излучения фотона будем вычислять в виде поправки к состояниям (14) и (16) в первом порядке теории возмущений по взаимодействию атомных электронов с электромагнитным полем¹⁾:

$$\begin{aligned} U &= - \sum_{a=1}^N \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(\frac{2\pi}{\omega} \right)^{1/2} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \times \\ &\quad \times \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{a,e}) \hat{\mathbf{p}}_{a,e}, \end{aligned} \quad (18)$$

где $a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ — операторы рождения фотона с частотой ω , импульсом \mathbf{k} и поляризацией σ ($\sigma = 1, 2$), $\mathbf{u}_{\mathbf{k}\sigma}$ — единичные векторы поляризации, $\hat{\mathbf{p}}_{a,e} = -i\partial/\partial\mathbf{r}_{a,e}$ — операторы импульса атомных электронов. Тогда амплитуда испускания фотона с одновременным переходом атомов системы из состояния Φ_0 в состояние Φ_n имеет вид

$$\begin{aligned} b_{0n}(\omega) &= i \left(\frac{2\pi}{\omega} \right)^{1/2} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\sigma} \int_{-\infty}^\infty dt \exp(i\omega t) \times \\ &\quad \times \langle \Phi_n(t) | \sum_{a,e} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{a,e}) \hat{\mathbf{p}}_{a,e} | \Phi_0(t) \rangle. \end{aligned} \quad (19)$$

Отсюда после интегрирования по частям по времени и опускания членов, исчезающих при выключении (при $t \rightarrow \pm\infty$) взаимодействия с электромагнитным полем получаем

$$\begin{aligned} b_{0n}(\omega) &= - \left(\frac{2\pi}{\omega} \right)^{1/2} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\sigma} \int_{-\infty}^\infty dt \frac{\exp(i\omega t)}{i\omega} \times \\ &\quad \times \langle \Phi_n | \sum_{a,e} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{a,e}) \frac{\partial V(t)}{\partial \mathbf{r}_{a,e}} \times \\ &\quad \times \exp \left(-i \int_{-\infty}^\infty V(t') dt' \right) | \Phi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

Подчеркнем, что речь идет об излучении одного фотона всеми электронами атомов системы за время действия возмущения $V(t)$. Далее нам необходимо

¹⁾ Внезапное же возмущение $V(t)$ учтено в функциях $\Phi_n(t)$ и $\Psi_0(t)$ без ограничений на величину $V(t)$.

найти спектр излучения фотона в телесный угол $d\Omega_{\mathbf{k}}$, описанный вдоль направления импульса фотона \mathbf{k} . Представив элемент интегрирования по импульсу фотона в виде

$$(2\pi)^{-3}d\mathbf{k} = (2\pi c)^{-3}d\Omega_{\mathbf{k}}\omega^2 d\omega$$

и выполнив суммирование $|b_{0n}(\omega)|^2$ по поляризациям фотона и по всем возможным конечным состояниям электронов атомов системы, получим соответствующий спектр испускания фотона в единицу телесного угла $d\Omega_{\mathbf{k}}$:

$$\frac{d^2W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{c^3\omega} \langle \Phi_0 | \times \\ \times \left| \sum_{a,e} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{a,e}) \left[\frac{\partial \tilde{V}(\omega)}{\partial \mathbf{r}_{a,e}} \times \mathbf{n} \right] \right|^2 | \Phi_0 \rangle. \quad (21)$$

Здесь $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ — единичный вектор в направлении вылета фотона, $\tilde{V}(\omega)$ — фурье-образ функции $V(t)$, представленной формулой (11), поэтому

$$\begin{aligned} \tilde{V}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} V(t) \exp(i\omega t) dt = \\ &= f_0(\omega) \sum_{a,e} (\mathbf{E}_0 \mathbf{r}_{a,e}) \exp\left(i\frac{\omega}{\omega_0} \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}_{a,e}\right), \end{aligned} \quad (22)$$

где

$$f_0(\omega) = \frac{1}{2} \left\{ \exp\left(-\frac{(\omega - \omega_0)^2}{4\alpha^2}\right) + \right. \\ \left. + \exp\left(-\frac{(\omega + \omega_0)^2}{4\alpha^2}\right) \right\}, \quad (23)$$

а векторное произведение равно

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{V}(\omega)}{\partial \mathbf{r}_{a,e}} \times \mathbf{n} &= f_0(\omega) \exp\left(i\frac{\omega}{\omega_0} \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}_{a,e}\right) \times \\ &\times \left\{ \mathbf{E}_0 \times \mathbf{n} + i\frac{\omega}{\omega_0} (\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}_{a,e}) [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}] \right\}. \end{aligned} \quad (24)$$

Теперь нетрудно представить полный спектр излучения фотона в единицу телесного угла $d\Omega_{\mathbf{k}}$ в течение времени действия внезапного возмущения $V(t)$ в виде

$$\begin{aligned} \frac{d^2W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} &= \frac{|f_0(\omega)|^2}{(2\pi)^2 c^3 \omega} \langle \Phi_0 | \times \\ &\times \sum_{a,e} \sum_{b,m} \exp(-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{R}_{a,e} - \mathbf{R}_{b,m})) \left\{ [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}]^2 + \right. \\ &+ i\frac{\omega}{\omega_0} ([\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}] \cdot [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}]) \mathbf{E}_0 \cdot (\mathbf{r}_{a,e} - \mathbf{r}_{b,m}) + \\ &\left. + (\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}_{a,e})(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}_{b,m}) \frac{\omega^2}{\omega_0^2} [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}]^2 \right\} | \Phi_0 \rangle, \end{aligned} \quad (25)$$

где

$$\mathbf{p} = \mathbf{k} - \frac{\omega}{\omega_0} \mathbf{k}_0 = \frac{\omega}{c} (\mathbf{n} - \mathbf{n}_0).$$

Дальнейшие упрощения этой формулы связаны с тем, что входящие в нее средние по основному состоянию Φ_0 имеют вид

$$\langle \Phi_0 | \sum_{e,m} f(\mathbf{r}_{a,e}, \mathbf{r}_{b,m}) | \Phi_0 \rangle$$

и, очевидно, не зависят от номеров атомов a и b .

Как в работе [13], выделим в формуле (25) суммирование с $a = b$, эту часть обозначим $d^2W_1/d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega$, сумму же с $a \neq b$ обозначим как $d^2W_2/d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega$. Соответственно, представим спектр (25) в виде

$$\frac{d^2W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} = \frac{d^2W_1}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} + \frac{d^2W_2}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega}. \quad (26)$$

Спектр $d^2W_1/d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega$ соответствует некогерентным (пропорциональным N) процессам перерассеяния. Интерференционный же спектр $d^2W_2/d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega$ ответственен за появление характерных «дифракционных» максимумов. Нетрудно убедиться, что $d^2W_1/d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega$ выражается через умноженные на число атомов в системе N одноатомные средние и может быть представлен как

$$\begin{aligned} \frac{d^2W_1}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} &= \frac{|f_0(\omega)|^2}{(2\pi)^2 c^3 \omega} \times \\ &\times N \{ N_e G(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) + N_e (N_e - 1) F(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) \}, \end{aligned} \quad (27)$$

где

$$\begin{aligned} G(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) &= \frac{1}{N_e} \langle \varphi_0 | \sum_e \left\{ [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}]^2 + \right. \\ &\left. + (\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}_{a,e})(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}_{a,m}) \frac{\omega^2}{\omega_0^2} [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}]^2 \right\} | \varphi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь $\varphi_0 \equiv \varphi_0(\{\mathbf{r}_{a,e}\})$ — волновая функция основного состояния какого-либо произвольного атома в системе, суммирование \sum_e проводится только по электронам, принадлежащим этому атому, поэтому число слагаемых при суммировании в (28) пропорционально N_e — числу электронов в атоме. В формуле (27) число электронов в атоме N_e выделено в виде множителя перед $G(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0)$, именно поэтому в правой части (28) введен множитель $1/N_e$. Среднее же $F(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0)$ по аналогичной причине содержит множитель $1/N_e(N_e - 1)$ и равно

$$F(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) = \frac{1}{N_e(N_e - 1)} \langle \varphi_0 | \times \\ \times \sum_{e,m(e \neq m)} \exp(-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_{a,e} - \mathbf{r}_{a,m})) \left\{ [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}]^2 + \right. \\ \left. + i\frac{\omega}{\omega_0} ([\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}] \cdot [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}]) \mathbf{E}_0 \cdot (\mathbf{r}_{a,e} - \mathbf{r}_{a,m}) + \right. \\ \left. + (\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}_{a,e})(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}_{a,m}) \frac{\omega^2}{\omega_0^2} [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}]^2 \right\} |\varphi_0\rangle, \quad (29)$$

где суммирование идет по всевозможным парам электронов, входящим в состав одного какого-либо произвольного атома, поэтому число слагаемых пропорционально $N_e(N_e - 1)$ — числу пар электронов в атоме. Аналогично, спектр $d^2W_2/d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega$ выражается через двухатомные средние $Q(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0)$ и равен

$$\frac{d^2W_2}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} = \frac{|f_0(\omega)|^2}{(2\pi)^2 c^3 \omega} N_e^2 Q(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) g_N(\mathbf{p}), \quad (30)$$

где

$$Q(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) = \frac{1}{N_e^2} \langle \varphi_0(\{\mathbf{r}_{a,e}\}) \varphi_0(\{\mathbf{r}_{b,m}\}) | \times \\ \times \sum_e \sum_m \exp(-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_{a,e} - \mathbf{r}_{b,m})) \left\{ [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}]^2 + \right. \\ \left. + i\frac{\omega}{\omega_0} ([\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}] \cdot [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}]) \mathbf{E}_0 \cdot (\mathbf{r}_{a,e} - \mathbf{r}_{b,m}) + \right. \\ \left. + (\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}_{a,e})(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}_{b,m}) \frac{\omega^2}{\omega_0^2} [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}]^2 \right\} \times \\ \times |\varphi_0(\{\mathbf{r}_{a,e}\}) \varphi_0(\{\mathbf{r}_{b,m}\})\rangle, \quad (31)$$

$a \neq b$, т. е. суммирование проводится по всевозможным парам электронов, принадлежащим каким-либо двум произвольным атомам. Пусть, например, мы выбрали пару атомов с номерами a и b , если один из электронов принадлежит атому a , то второй электрон обязательно принадлежит атому b . Для двух одинаковых атомов, расположенных в разных ($a \neq b$) местах мишени, число таких пар электронов равно N_e^2 . Поэтому среднее $Q(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0)$ содержит множитель $1/N_e^2$.

Рассмотрим в качестве примера систему из N невзаимодействующих атомов гелия. Основное состояние одного атома гелия будем описывать волновой функцией $\varphi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, тогда в формуле (25) Φ_0 — волновая функция электронов системы из N атомов гелия — равна

$$\Phi_0 = \varphi_0(\mathbf{r}_{1,1}, \mathbf{r}_{1,2}) \varphi_0(\mathbf{r}_{2,1}, \mathbf{r}_{2,2}) \dots \varphi_0(\mathbf{r}_{N,1}, \mathbf{r}_{N,2}).$$

Если каждую двухэлектронную волновую функцию основного состояния атома гелия φ_0 описывать как произведение двух водородоподобных волновых функций $1s$ -состояний с эффективным зарядом $Z = 2 - 5/16$, то

$$G(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) = [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}]^2 + \frac{\omega^2}{c^2 Z^2} E_0^2 [\mathbf{n}_0 \times \mathbf{n}]^2, \quad (32)$$

$$F(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) = Q(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) = \\ = \left\{ \frac{16[\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}]}{(4 + \mathbf{p}^2/Z^2)^2} - \frac{\omega}{cZ} \frac{64(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{p})[\mathbf{n}_0 \times \mathbf{n}]}{(4 + \mathbf{p}^2/Z^2)^3} \right\}^2. \quad (33)$$

Вернемся к случаю произвольных атомов. Суммируя (27) и (30), получаем полный спектр в виде

$$\frac{d^2W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} = \frac{|f_0(\omega)|^2}{(2\pi)^2 c^3 \omega} \{ NN_e G(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) + \\ + NN_e(N_e - 1) F(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) + \\ + N_e^2 Q(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) g_N(\mathbf{p}) \}, \quad (34)$$

где

$$g_N(\mathbf{p}) = \sum_{a,b(a \neq b)} \exp(i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b)) = \\ = \sum_{a,b} \exp(i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b)) - N = \\ = \left| \sum_a \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}_a) \right|^2 - N. \quad (35)$$

Отметим, что число атомов N в системе произвольно, в частности, при $N = 1$ формула (34) описывает спектр переизлучения одного атома, при $N = 2$ — спектр переизлучения системы из двух атомов и т. д. (ср. [10]). Напомним, что при произвольных N необходимо следить за выполнением условий внезапности (12).

В формуле (34) первые два слагаемых в правой части представляют собой умноженный на число атомов в системе спектр излучения отдельного атома и соответствуют некогерентному (пропорциональному N) процессу переизлучения. Важно, что в формуле (34) лишь множитель $g_N(\mathbf{p})$ зависит от взаимного пространственного расположения атомов системы, а функции G , F и Q зависят лишь от характеристик изолированных атомов независимо от их места расположения.

Рассмотрим поведение спектра (34) в области малых частот. Используя формулы (28), (29), (31) и (35), нетрудно убедиться, что они являются четными функциями частоты ω , причем частота входит в эти функции лишь в виде отношения ω/c и разложения указанных выше функций по малым ω/c содержат лишь четные степени ω/c . Кроме того, можно считать для оценок характерные атомные размеры $r \sim 1$. Таким образом, в области малых частот, когда $\omega^2/c^2 \ll 1$, функция

$$G(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) = F(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) = Q(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) = [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}]^2.$$

При таких ω формула (34) значительно упрощается и принимает вид

$$\frac{d^2W}{d\Omega_{\mathbf{k}} d\omega} = \frac{|f_0(\omega)|^2}{(2\pi)^2 c^3 \omega} N_e^2 [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}]^2 (g_N(\mathbf{p}) + N), \quad (36)$$

причем при $\omega^2/c^2 \rightarrow 0$ вектор

$$\mathbf{p} = \mathbf{k} - \frac{\omega}{\omega_0} \mathbf{k}_0 = \frac{\omega}{c} (\mathbf{n} - \mathbf{n}_0) \rightarrow 0$$

и фактор

$$g_N(\mathbf{p}) \rightarrow N^2 - N,$$

что соответствует наличию когерентного (пропорционального $N^2 N_e^2$) излучения фотона всеми электронами мишени или эффекту интерференции. Вклад интерференционных эффектов удобно характеризовать отношением, имеющим в области малых частот вид

$$\frac{d^2W/d\Omega_{\mathbf{k}} d\omega}{d^2W_1/d\Omega_{\mathbf{k}} d\omega} = \frac{1}{N} (g_N(\mathbf{p}) + N). \quad (37)$$

Вернемся к формуле (34) для полного спектра. Последнее слагаемое в правой части (34) включает в себя когерентную (пропорциональную N^2) часть спектра переизлучения. С ростом ω доля когерентного излучения уменьшается. Действительно, при $\omega^2/c^2 \rightarrow \infty$ (точнее при $\omega^2/c^2 \gg NN_e$) когерентная часть спектра мала по сравнению с некогерентной частью, описываемой первым (пропорциональным NN_e) слагаемым в формуле (34). Вклад эффектов интерференции в процессы перерассеяния становится заметным не только при малых частотах, если в качестве мишени выбирать многоатомные регулярные структуры.

Рассмотрим более подробно угловые распределения, описываемые формулой (34) в зависимости от геометрии мишени. Выше мы считали пространственное распределение атомов в системе произвольным. Нас интересуют процессы переизлучения на одномерных, двумерных и трехмерных регулярных структурах, состоящих из одинаковых атомов. Рассмотрим частные случаи формулы (34). В формуле (34) при переходе от одномерных систем к двумерным и трехмерным меняется лишь функция $g_N(\mathbf{p})$, определенная формулой (35). Наиболее просто [13] находится функция $g_N(\mathbf{p})$ в случае одномерной цепочки из N невзаимодействующих одинаковых атомов, расположенных на одной прямой линии на равном расстоянии между ближайшими соседями. Рассмотрим двумерную, плоскую, прямоугольную решетку (лежащую в плоскости xy), в узлах которой находятся невзаимодействующие одинаковые

атомы. Период решетки по оси x обозначим d_1 , по оси $y - d_2$. Тогда радиус-вектор, задающий положение какого-либо атома в решетке, будет равен

$$\mathbf{R}_a = (a_1 - 1)\mathbf{d}_1 + (a_2 - 1)\mathbf{d}_2,$$

целые числа a_1, a_2 — номера атома в решетке, такие что атом с номерами $a_1 = 1, a_2 = 1$ расположен в начале системы координат, число атомов в такой решетке $N = N_1 N_2$, где N_1 — число атомов, расположенных на оси x , N_2 — число атомов на оси y . Аналогично, для трехмерной прямоугольной решетки, в узлах которой находятся одинаковые атомы с периодом решетки по оси x равным d_1 , по оси $y - d_2$, по оси $z - d_3$, радиус-вектор, задающий положение какого-либо атома в решетке равен

$$\mathbf{R}_a = (a_1 - 1)\mathbf{d}_1 + (a_2 - 1)\mathbf{d}_2 + (a_3 - 1)\mathbf{d}_3,$$

где a_1, a_2, a_3 — номера атома в решетке, а N_1, N_2, N_3 — соответственно числа атомов на осях x, y, z . Число атомов в такой решетке $N = N_1 N_2 N_3$. Подставляя найденные значения \mathbf{R}_a в формулу (35) и выполняя суммирование по номерам атомов, получим для s -мерной решетки ($s = 1$ для одномерной решетки, $s = 2$ для двумерной и $s = 3$ для трехмерной):

$$g_N(\mathbf{p}) = \prod_{i=1}^s \frac{\sin^2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{d}_i N_i / 2)}{\sin^2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{d}_i / 2)} - N. \quad (38)$$

В этой формуле, как и в формуле (34), число атомов N , в принципе, может быть любым. Нули знаменателя в (37) соответствуют максимальным значениям в угловых распределениях. В этих максимумах $g_N(\mathbf{p}) = N^2 - N$. Отметим, что при $N \gg 1$ в малых окрестностях нулей знаменателя, таких что $\mathbf{p} \cdot \mathbf{d}/2 = \pi n + \epsilon$ (n — целое число, ϵ мало), справедливо [14] предельное выражение

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \frac{\sin^2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{d} N / 2)}{\sin^2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{d} / 2)} &= \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \frac{\sin^2(\epsilon N)}{\epsilon^2} = \pi \delta(\epsilon). \end{aligned} \quad (39)$$

В качестве следующего примера, позволяющего в аналитическом виде найти функцию $g_N(\mathbf{p})$ при $N \gg 1$, рассмотрим кольцо, состоящее из N одинаковых атомов, расположенных на окружности радиуса R на одинаковом расстоянии между ближайшими соседями. Введем прямоугольную систему координат так, чтобы начало системы координат находилось в центре кольца, а оси x, y лежали в плоскости кольца.

Тогда радиус-вектор, задающий положение атома с номером a , равен

$$\mathbf{R}_a = R \left(\mathbf{i} \cos \frac{2\pi a}{N} + \mathbf{j} \sin \frac{2\pi a}{N} \right),$$

где R — радиус кольца, \mathbf{i} и \mathbf{j} — единичные орты соответственно по осям x и y . Далее нужно рассчитать по формуле (35) функцию $g_N(\mathbf{p})$, отвечающую за дифракционные эффекты в формуле (34). Можно увидеть, что

$$\mathbf{R}_a \cdot \mathbf{p} = pR \sin \theta \cos(2\pi a/N - \phi),$$

где θ — угол между \mathbf{p} и нормалью к плоскости кольца, ϕ — угол между осью x и проекцией вектора \mathbf{p} на плоскость xy , а номер атома a принимает значения $a = 1, 2, \dots, N$. Далее рассмотрим входящую в (35) сумму, $\sum_a \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}_a)$, эту сумму при $N \gg 1$ можно заменить на интеграл:

$$\begin{aligned} \sum_a \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}_a) &= \\ &= \frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(ipR \sin \theta \cos x) dx = NJ_0(pR \sin \theta), \end{aligned}$$

где $J_0(x)$ — функция Бесселя. В итоге для такого кольца получим

$$g_N(\mathbf{p}) = N^2 J_0^2(pR \sin \theta) - N. \quad (40)$$

Теперь просто можно найти функцию $g_N(\mathbf{p})$ для более сложной конструкции (множественные кольца), когда одинаковые атомы расположены на окружностях (разных радиусов), лежащих в одной плоскости и описанных вокруг общего центра:

$$g_N(\mathbf{p}) = \left(\sum_{n=1}^M N_n J_0(pR_n \sin \theta) \right)^2 - \sum_{n=1}^M N_n, \quad (41)$$

где N_n — число атомов в кольце с номером n (причем все $N_n \gg 1$), R_n — радиус этого кольца, а M — количество колец. В частности, при $M = 1$ мы возвращаемся к результату для одного кольца (40).

Также просто может быть рассмотрено переизлучение трехмерной цилиндрической (коаксиальной) конструкцией, образованной несколькими описанными выше одинаковыми множественными кольцами. Все множественные кольца лежат в параллельных друг другу плоскостях и их центры расположены на одной (перпендикулярной к плоскостям колец) линии (оси коаксиальной конструкции) на одинаковом

расстоянии d между ближайшими соседними плоскостями. Введем систему отсчета таким образом, чтобы начало отсчета было в центре одного из крайних колец, оси x, y лежали в плоскости кольца, а ось z была осью коаксиальной конструкции. Тогда радиус-вектор, задающий положение атома с номером $a_{m,n}$, в плоскости с номером m и кольцом в этой плоскости с номером n будет равен

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{m,n} &= R_n \left(\mathbf{i} \cos \frac{2\pi a_{m,n}}{N_n} + \mathbf{j} \sin \frac{2\pi a_{m,n}}{N_n} \right) + \\ &\quad + \mathbf{k}(m-1)d, \end{aligned}$$

где d — расстояние между центрами ближайших множественных колец вдоль оси z , а $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ — единичные орты соответственно по осям x, y, z . В итоге после суммирования по n и m получим

$$\begin{aligned} g_N(\mathbf{p}) &= \left(\sum_{n=1}^M N_n J_0(pR_n \sin \theta) \right)^2 \times \\ &\quad \times \left(\frac{\sin(Lpd \cos \theta/2)}{\sin(pd \cos \theta/2)} \right)^2 - L \sum_{n=1}^M N_n, \quad (42) \end{aligned}$$

где N_n — число атомов в кольце радиуса R_n , R_n — радиус n -го кольца, L — число плоскостей с кольцами. Общее число атомов в рассматриваемом многослойном цилиндре высотой Ld равно $N = L \sum_{n=1}^M N_n$. Структуру, похожую на такой многослойный цилиндр, можно выделить и для реально встречающихся в природе объектов — это многослойные (многостенные) нанотрубки. В частности, при $M = 1$ мы моделируем обычную (однослойную) нанотрубку.

Таким образом, нами получены полные (просуммированные по всем возможным конечным состояниям электронов атомов мишени) спектры (34) переизлучения ультракоротких импульсов электромагнитного поля в зависимости от углов наблюдения и ориентации мишени. Входящие в (34) функции G, F и Q зависят лишь от характеристик изолированных атомов независимо от их места расположения и в каждом конкретном случае могут быть рассчитаны по формулам (28), (29) и (31). При использовании в качестве мишени регулярных структур с большим количеством атомов доминирующими в спектрах перерассеяния становятся эффекты интерференции. При этом, подбирая пространственную структуру мишени и их различные комбинации, возможно добиться значительного разделения угловых распределений падающего и рассеянного излучений. Конечно же, после прохождения ультракороткого импульса через мишень атомы, входящие

в состав мишени, могут оставаться в возбужденных состояниях и релаксировать путем испускания фотонов, что соответствует так называемому спонтанному излучению. Очевидно, что в этом случае интерференционные эффекты, характерные лишь для спектров переизлучения (34), будут отсутствовать.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. M. Cowley, *Diffraction Physics*, North-Holland, Amsterdam (1975).
2. P. Agostini, Rep. Progr. Phys. **67**, 813 (2004).
3. P. B. Corkit and F. Krausz, Nature Phys. **3**, 381 (2007).
4. F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys. **81**, 163 (2009).
5. A. M. Желтиков, УФН **181**, 33 (2011) [A. M. Zheltikov, Phys. Usp. **54**, 29 (2011)].
6. J. Fink, E. Schierle, E. Weschke, and J. Geck, Rep. Progr. Phys. **76**, 056502 (2013).
7. В. А. Астапенко, ЖЭТФ **139**, 228 (2011) [V. A. Astapenko, JETP **112**, 193 (2011)].
8. P. A. Golovinkii and E. M. Mikhailov, Laser Phys. Lett. **3**, 259 (2006).
9. V. A. Astapenko, Phys. Lett. A **374**, 1585 (2010).
10. В. И. Матвеев, ЖЭТФ **124**, 1023 (2003) [V. I. Matveev, JETP **97**, 915 (2003)].
11. М. К. Ессеев, В. И. Матвеев, В. М. Юлкова, Опт. и спектр. **111**, 360 (2011) [M. K. Eseev, V. I. Matveev, and V. M. Yulkova, Opt. and Spectr. **111**, 330 (2011)].
12. М. К. Ессеев, В. И. Матвеев, В. М. Юлкова, ЖТФ **82**, 130 (2012).
13. В. И. Матвеев, Д. У. Матрасулов, Письма в ЖЭТФ **96**, 700 (2012).
14. Л. Д. Ландау, Е. М. Лишниц, *Теория поля*, Наука, Москва (1988) [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics, Vol. 2, The Classical Theory of Fields*, Nauka, Moscow (1988); Pergamon, Oxford (1975)].
15. М. Я. Амусья, *Тормозное излучение*, Энергоатомиздат, Москва (1990).
16. M. Ya. Amusia, Radiat. Phys. Chem. **75**, 1232 (2006).
17. М. Я. Амусья, В. И. Матвеев, Письма в ЖЭТФ **97**, 443 (2013).
18. А. М. Дыхне, Г. Л. Юдин, УФН **125**, 377 (1978) [A. M. Dykhne and G. L. Yudin, Sov. Phys. — Usp. **21**, 549 (1978)].