ОПТИЧЕСКИЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

ЛЕКЦИЯ №1

Взаимодействие излучения с атомами

Астапенко В.А., д.ф.-м.н.

Атом водорода. Формула Бальмера.

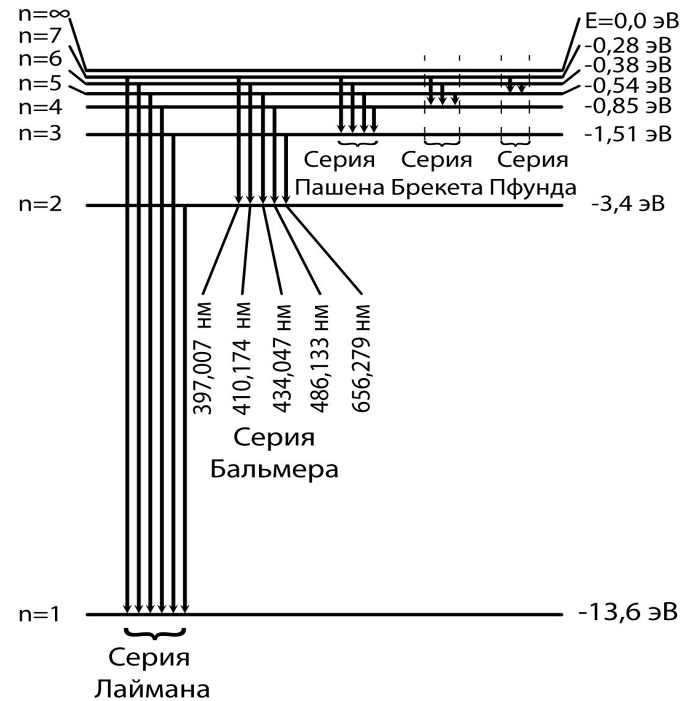
Исследование взаимодействия электромагнитного излучения с атомами началось с регистрации спектров *атома водорода*.

В результате обобщения *экспериментальных данных* в 1885 году было получено простое соотношение, с высокой степенью точности описывающее измеренные к тому времени значения длин волн атома водорода (формула Бальмера):

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right), \quad R \cong 109739 \text{ см}^{-1}$$

где m и n – целые числа ($m > n$)

Формула Бальмера стала важным экспериментальным основанием для построения теории атома водорода и установления основных закономерностей взаимодействия электромагнитного излучения с атомами.



Переходы между уровнями энергии в атоме водорода, формирующие различные серии линейчатого спектра

Полуклассическая теория атома Н. Бора. Постулаты Бора.

1. Электроны в атомах находятся в особых, стационарных состояниях $|n>$, соответствующих круговым орбитам, параметры которых определяются условием квантования момента количества движения:

$$M_n = n\hbar$$

2. В стационарных состояниях атомные электроны не излучают.

3. Излучение и поглощение электромагнитных волн происходит в результате перехода атомного электрона из одного стационарного состояния (с энергией E_n) в другое стационарное состояние (с энергией E_m). Круговая частота излучения (в случае $E_n > E_m$) равна:

$$\omega_{mn} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$$

Следует отметить, что в условие квантования момента количества движения вошла постоянная Планка, использовавшаяся впервые для квантования энергии радиационного осциллятора.

Уравнения Бора и атомные единицы.

$$(1)\;\; m_e r_n v_n = n\hbar; \qquad (2)\;\; m_e \frac{v_n^2}{r_n} = \frac{Z e^2}{r_n^2}$$

$$v_n = \frac{Z e^2}{n\hbar} = \frac{Z}{n} v_a; \quad v_a = \alpha c \cong 2.188\cdot 10^8 \text{ см/с}; \quad \alpha = e^2/\hbar c \cong 1/137$$

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Z m_e e^2} = \frac{n^2}{Z} a_B; \quad a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \cong 0.529\cdot 10^{-8} \text{ см}; \quad \tau_a = \frac{a_B}{v_a} = \frac{\hbar^3}{m_e e^4} \cong 2.42\cdot 10^{-17} \text{ с}$$

$$\varepsilon_a = \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = \alpha^2 m_e c^2 \cong 4.36\cdot 10^{-11} \text{ эрг} = 27.2 \text{ эВ}; \quad 1 \text{ эВ} \cong 1.6\cdot 10^{-12} \text{ эрг}; \quad Ry = \frac{\varepsilon_a}{2} \cong 13.6 \text{ эВ}$$

$$T_n = \frac{m_e v_n^2}{2} = \frac{Z^2}{2n^2}\frac{m_e e^4}{\hbar^2} = \frac{Z^2}{2n^2}\alpha^2 m_e c^2; \quad U_n = -\frac{Z e^2}{r_n} = -\frac{Z^2}{n^2}\frac{m_e e^4}{\hbar^2} = -\frac{Z^2}{n^2}\alpha^2 m_e c^2$$

$$\mathrm{E}_n = T_n + U_n = -\frac{Z^2}{2n^2}\frac{m_e e^4}{\hbar^2} = -\frac{Z^2}{2n^2}\alpha^2 m_e c^2$$

Определение: $e = m_e = \hbar = 1 -$ система единиц Хартри илиатомная система единиц

Например, скорость света в вакууме: $c \cong 137$ ат. ед. скорости

Дискретный спектр энергии водородоподобного атома

$$\mathrm{E}_n = -\frac{Z^2}{n^2} Ry$$

Целое неотрицательное число *n*, фигурирующее в этом равенстве, отвечает главному квантовому числу электронного состояния в последовательной квантовой теории атома водорода.

$$\omega_{mn} = \frac{Z^2\, Ry}{\hbar}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right); \qquad \frac{1}{\lambda_{mn}} = \frac{Z^2\, Ry}{2\pi\hbar c}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

для $Z = 1$: $\frac{1}{\lambda_{mn}} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$, если положить: $R = \frac{Ry}{2\pi\hbar c}$

Таким образом, *теория атома Бора воспроизводит экспериментальную формулу Бальмера для длин волн излучения атома водорода*. Это явилось крупным успехом данной теории и, что особенно важно, подтвердило необходимость введения квантовых представлений (постоянной Планка) в микротеорию вещества.

Принцип соответствия между классической и квантовой механикой

Вышеизложенная теория Бора является не только теорией атома водорода, но и теорией взаимодействия электромагнитного излучения с атомом, т.к. важные черты этого взаимодействия описываются 2 и 3 постулатами Бора.

Дальнейшее развитие теории взаимодействия излучения с атомами может быть осуществлено, не прибегая к последовательному квантово-электродинамическому формализму, а используя так называемый *принцип соответствия* в духе полуклассического подхода Бора. Отправной точкой такого рассмотрения является выражение для мощности дипольного излучения, известное из классической электродинамики. Оно имеет вид:

$$Q(t)=\frac{2}{3c^3}\left|\ddot{\mathbf{d}}(t)\right|^2;\quad \mathbf{d}(t)=e\,\mathbf{r}(t);\qquad Q(\omega_0)=\frac{\omega_0^4}{3c^3}\left|\mathbf{d}(\omega_0)\right|^2$$

$$\mathbf{d}(\omega_0)\to\mathbf{d}_{mn}\equiv\langle m|\mathbf{d}|n\rangle=\int d\mathbf{r}\,\Psi_m^*(\mathbf{r})\,\mathbf{d}\,\Psi_n(\mathbf{r})$$

$$\omega_0\to\omega_{mn}=\frac{\mathrm{E}_n-\mathrm{E}_m}{\hbar}$$

Принцип соответствия между классической и квантовой механикой

Мощность излучения атомного перехода

$$Q_{mn} = \frac{4\omega_{mn}^4}{3c^3}\left|\mathbf{d}_{mn}\right|^2 \rightarrow \frac{Q_{mn}}{\Delta \mathrm{E}_{mn}} = \frac{4\omega_{mn}^3}{3\hbar c^3}\left|\mathbf{d}_{mn}\right|^2 = A_{mn} = \frac{1}{\tau_{mn}}$$

Итак, использование формулы классической электродинамики и замен дипольного момента и собственной частоты позволили получить квантовый результат для мощности излучения спектральных линий и вероятности спонтанного излучения. Это обстоятельство является отражением *принципа соответствия* между классической и квантовой физикой.

Данный принцип может быть сформулирован следующим образом. Квантово-механические выражения получаются из классических, если в последних Фурье-компоненты физических величин заменить на матричные элементы этих величин. Причем частота квантового перехода должна совпадать с частотой Фурье-компоненты.

Спектроскопический принцип соответствия

Принцип соответствия между классической и квантовой физикой, конкретизированный для случая излучательных переходов в атоме, называется *спектроскопическим принципом соответствия*. Его можно сформулировать следующим образом.

Атом при взаимодействии с электромагнитным полем ведет себя как набор классических осцилляторов, обладающих собственными частотами, равными частотам переходов между атомными уровнями энергии.

Это значит, что каждому переходу между атомными состояниями и ставится в соответствие осциллятор с собственной частотой, определяемой по 3 постулату Бора. Назовем эти осцилляторы *осцилляторами переходов*.

Сила осциллятора

Вклад осцилляторов переходов в отклик атома на электромагнитное воздействие пропорционален безразмерной величине, называемой *силой осциллятора*.

Сила осциллятора для перехода между состояниями дискретного спектра определяется формулой

$$f_{nj} = \frac{2 m_e \omega_{nj} \left|\langle n|\mathbf{d}|j\rangle\right|^2}{3 e^2 \hbar g_j}; \quad g_j f_{nj} = -g_n f_{jn}$$

$\langle n|\mathbf{d}|j\rangle \neq 0$ — дипольно-разрешенный переход; $f_{nj} \neq 0$

Сила осциллятора для переходов в атоме с увеличением энергии положительна, для переходов с уменьшением энергии - отрицательна

$$\sum_n f_{n0} + \int_{I_P}^{\infty} \frac{df_0}{d\varepsilon} d\varepsilon = N_e$$ — золотое правило сумм для сил осциллятора

Силы осцилляторов для атома водорода

Начальное состояние	$1s$	$2s$	$2p$		$3s$	$3p$
Конечное состояние	np	np	ns	nd	np	ns
$n = 1$	0	–	-0.139	–	–	0.026
2	0.4162	0	0	–	0.141	0.145
3	0.0791	0.4349	0.014	0.696	0	0
4	0.0290	0.1028	0.0031	0.122	0.484	0.032
5	0.0139	0.0419	0.0012	0.044	0.121	0.007
6	0.0078	0.0216	0.0006	0.022	0.052	0.003
7	0.0048	0.0127	0.0003	0.012	0.027	0.002
8	0.0032	0.0081	0.0002	0.008	0.016	0.001
$\sum_{n=9}^{\infty} f_{n0}$	0.0109	0.0268	0.0007	0.023	0.048	0.002
Асимптотическая формула	$1.6\ n^{-3}$	$3.7\ n^{-3}$	$0.1\ n^{-3}$	$3.3\ n^{-3}$	$6.2\ n^{-3}$	$0.3\ n^{-3}$
Дискретный спектр	0.5650	0.6489	-0.119	0.928	0.707	0.121
Непрерывный спектр	0.4350	0.3511	0.008	0.183	0.293	0.010
Полная сумма	1.000	1.000	-0.111	1.111	1.000	0.111

Взаимодействие электромагнитного поля с осциллятором перехода в атоме

$$\ddot{x}_{jn} + 2\delta_{jn}\dot{x}_{jn} + \omega_{jn}^2 x_{jn} = f_{jn}\frac{e}{m}E(t); \quad \omega_{jn} = \left(\mathrm{E}_j - \mathrm{E}_n\right)\big/\hbar$$

$$x_{jn}(t) = f_{jn}\frac{e}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{E(\omega')\exp(-i\omega' t)}{\omega_{jn}^2 - \omega'^2 - 2i\omega'\delta_{jn}}\frac{d\omega'}{2\pi} \quad \Rightarrow \quad \dot{x}_{jn}(t) = -i f_{jn}\frac{e}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\omega' E(\omega')\exp(-i\omega' t)}{\omega_{jn}^2 - \omega'^2 - 2i\omega'\delta_{jn}}\frac{d\omega'}{2\pi}$$

$$P(t) = e\dot{x}(t)E_x(t) \quad \to \quad P_{jn} \equiv \left\langle P_{jn}\right\rangle = \frac{2\pi e^2}{3m}\int_0^{\infty}\frac{4\omega'^2\delta_{jn}\rho(\omega')\,d\omega'}{\left(\omega_{jn}^2 - \omega'^2\right)^2 + \left(2\omega'\delta_{jn}\right)^2} \approx \frac{2\pi^2 e^2}{3m}\int_0^{\infty} G_{jn}^{(h)}(\omega')\rho(\omega')\,d\omega'$$

$$G_{jn}^{(h)}(\omega') = \frac{\left(\delta_{jn}/\pi\right)}{\left(\omega_{jn} - \omega'\right)^2 + \left(\delta_{jn}\right)^2} \to \left(\delta_{jn} \to 0\right) \to \delta\left(\omega_{jn} - \omega'\right); \quad \left\langle \mathbf{E}(\omega)\mathbf{E}(-\omega')\right\rangle = (2\pi)^3\rho(\omega)\delta(\omega - \omega')$$

$$P_{jn} = f_{jn}\frac{2\pi^2 e^2}{3m}\rho\left(\omega_{jn}\right); \quad P_{jn} = \frac{2\pi^2 e^2}{3m} f_{jn}\int_0^{\infty} G_{jn}^{(h)}(\omega')\rho(\omega')\,d\omega'$$

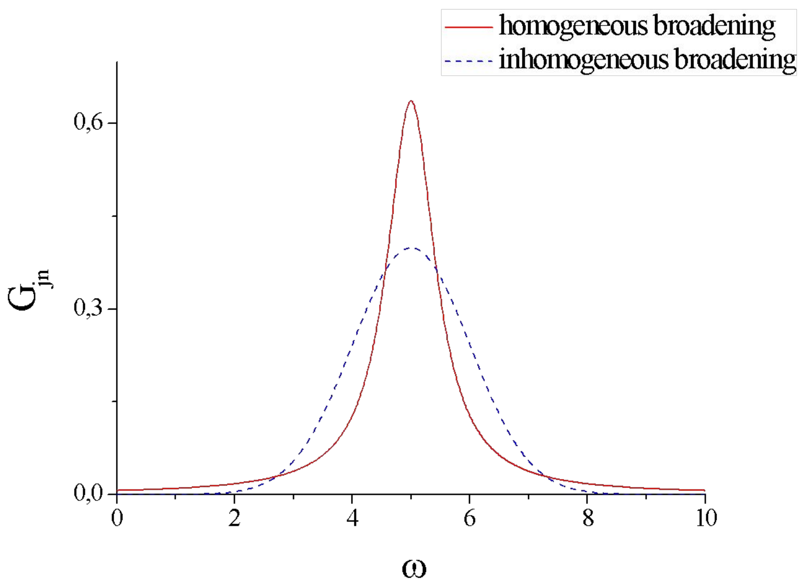
Спектральная форма линии осциллятора перехода

$$G_{jn}^{(h)}(\omega') = \frac{\left(\Delta\omega_{jn}^{(h)}/\pi\right)}{\left(\omega_{jn} - \omega'\right)^2 + \left(\Delta\omega_{jn}^{(h)}\right)^2}$$ – однородное уширение;

$$T_2 = \frac{2}{\Delta\omega_{jn}^{(h)}}$$ – время поперечной (необратимой) релаксации

$$G_{jn}^{(inh)}(\omega') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\Delta\omega_{jn}^{(inh)}} \exp\left\{\frac{\left(\omega' - \omega_{jn}^{(c)}\right)^2}{2\left(\Delta\omega_{jn}^{(inh)}\right)^2}\right\}$$ – неоднородное уширение

$$T_2^* = \frac{2}{\Delta\omega_{jn}^{(inh)}}$$ – время обратимой релаксации



$$G_{jn}^{(h)}(\omega) \propto \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega\tau} \left\langle d(t)\, d(t+\tau) \right\rangle_t d\tau$$

Однородное уширение описывается лоренцевской формой линии (лоренциан).

Неоднородное уширение описывается гауссовской формой линии (гауссиан).

Однородное и неоднородное уширение спектральной линии

Сечение радиационного перехода

$$\sigma_{jn}(\omega) = \frac{w_{jn}}{j(\omega)}$$ – сечение фотопроцесса

w_{jn} – вероятность в единицу времени радиацион ного перехода

$$j(\omega) = \frac{c E_0^2}{8\pi \hbar \omega}$$ – плотность потока фотонов в монохроматич еском излучении

$$w_{nj} = \frac{P_{nj}}{\hbar \omega_{nj}} \quad \to \quad \sigma_{jn}(\omega) = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} f_{jn} G_{jn}^{(h)}(\omega);$$

$g_{n,j}$ – статистические веса атомных состояний

$$\sigma_{jn}(\omega) = \frac{4\pi^2 \omega_{jn}}{3\hbar c g_n} \left|\langle n|\mathbf{d}|j\rangle\right|^2 G_{jn}^{(h)}(\omega)$$

$$A_{nj} = \frac{4\omega_{jn}^3}{3\hbar g_j c^3}\left|\mathbf{d}_{jn}\right|^2$$

$$\sigma_{jn}^{(\max)} = \sigma_{jn}(\omega = \omega_{jn}) = \frac{8\pi}{3\hbar c g_n}\left|\langle n|\mathbf{d}|j\rangle\right|^2 \frac{\omega_{jn}}{\Delta\omega_{jn}} \to \sigma_{jn}^{(\max)} = \frac{g_j}{2\pi g_n}\lambda_{jn}^2,$$ если $\Delta\omega_{jn} = A_{nj}$

Динамическая поляризуемость атома

$$E \ll E_a = m_e^2\, e^5 / \hbar^4 \cong 5.14\cdot 10^9 \text{ В/см}$$

$$d_i(\omega) = \sum_j \beta_{ij}(\omega) E_j(\omega); \quad \beta_{ij}(\omega) = \beta(\omega)\delta_{ij} \rightarrow \quad \mathbf{d}(\omega) = \beta(\omega)\mathbf{E}(\omega);$$

$$\mathbf{d}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \beta(\tau)\mathbf{E}(t-\tau)\,d\tau$$ во временном представлении

$$\ddot{\mathbf{r}}_n + \delta_{0n}\dot{\mathbf{r}}_n + \omega_{0n}^2\,\mathbf{r}_n = \frac{e}{m} f_{0n}\,\mathbf{E}(t)$$

$$\mathbf{d} = \sum_n \mathbf{d}_n = e\sum_n \mathbf{r}_n; \quad \mathbf{d}_\omega = e\sum_n \mathbf{r}_{n\omega}$$

$$\mathbf{r}_{n\omega} = \frac{e}{m}\frac{f_{0n}}{\omega_{0n}^2 - \omega^2 - i\,\omega\,\delta_{0n}}\mathbf{E}_\omega \quad \rightarrow \quad \beta(\omega) = \frac{e^2}{m}\sum_n \frac{f_{0n}}{\omega_{0n}^2 - \omega^2 - i\,\omega\,\delta_{0n}}$$

Предельные случаи атомной поляризуемости

$$\beta_0 \equiv \beta(\omega = 0) = \frac{e^2}{m}\sum_n \frac{f_{0n}}{\omega_{0n}^2}$$ — статическая поляризуемость атома

$$\beta_\infty(\hbar\omega >> I_P) = -\frac{e^2 N_e}{m\omega^2}$$ — высокочастотная поляризуемость атома

$$\beta_{res}\left(|\omega - \omega_{0n}| \le \delta_{0n}\right) = \left(\frac{e^2}{2m\omega_{0n}}\right)\frac{f_{0n}}{\omega_{0n} - \omega - i\,\delta_{0n}/2}$$ — резонасная поляризуемость

$$\beta_{res}(\tau) = \frac{e^2 f_{0n}}{2m\omega_{0n}}(-i)\theta(\tau)\exp\left(-i\,\omega_{0n}\tau - \delta_{0n}\tau/2\right) -$$

– резонансная поляризуемость во временном представлении

Общие соотношения для динамической поляризуемости

$$\mathrm{Re}\left\{\beta(\omega)\right\} = \frac{1}{\pi} V.P.\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{Im}\left\{\beta(\omega')\right\}}{\omega' - \omega} d\omega'; \quad \mathrm{Im}\left\{\beta(\omega)\right\} = \frac{1}{\pi} V.P.\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{Re}\left\{\beta(\omega')\right\}}{\omega - \omega'} d\omega'$$

$$V.P.\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x-a} dx = \lim_{\Delta\to 0}\left\{\int_{-\infty}^{a-\Delta} \frac{f(x)}{x-a} dx + \int_{a+\Delta}^{+\infty} \frac{f(x)}{x-a} dx\right\}$$

Интеграл "с выколотой" точкой

$$\mathrm{Re}\left(\beta(\omega)\right) = \frac{2}{\pi}\int_0^{\infty} \frac{\omega' \,\mathrm{Im}\left(\beta(\omega')\right) - \omega\,\mathrm{Im}\left(\beta(\omega)\right)}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' -$$

Оптическая теорема; $\mathrm{Im}\left(\beta(\omega)\right) = \frac{c}{4\pi\omega}\sigma_{ph}(\omega)$

$\sigma_{ph}(\omega) -$ сечение фотопоглощения

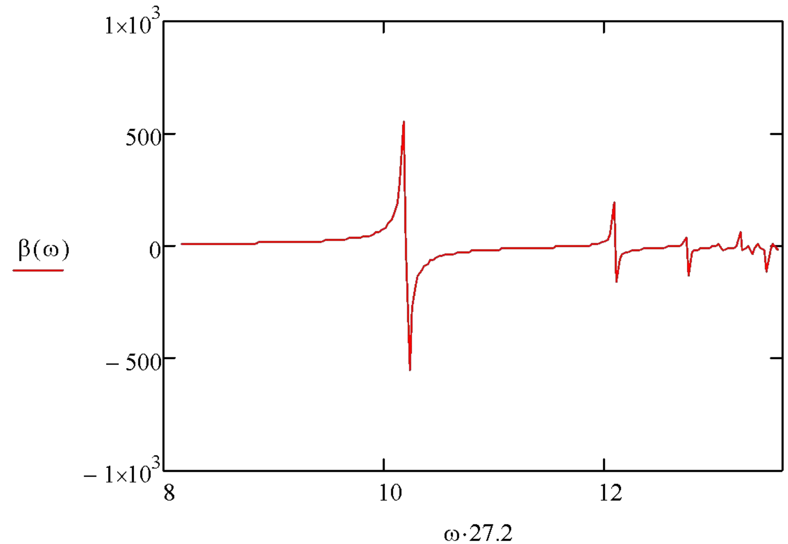
$$\mathrm{Re}\left(\beta(\omega)\right) = \frac{c}{2\pi^2}\int_0^{\infty} \frac{\sigma_{ph}(\omega') - \sigma_{ph}(\omega)}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \to \beta(0) = \frac{c}{2\pi^2}\int_0^{\infty} \frac{\sigma_{ph}(\omega)}{\omega^2} d\omega$$

$\frac{c}{2\pi^2}\int_0^{\infty} \sigma_{ph}(\omega)\, d\omega = N -$ правило сумм для сечения фотопоглощения

Динамическая поляризуемость водородоподобного атома

$$\beta_{1s}(\omega) \approx \frac{e^2}{m} \sum_n \frac{f_n}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\omega\,\Delta\omega_n}; \quad \omega_n = Z^2 \frac{n^2 - 1}{n^2} \frac{Ry}{\hbar}; \quad f_n = n^5 \frac{2^8 (n-1)^{2n-4}}{3(n+1)^{2n+4}}$$

$$\Delta\omega_n = A_n = Z^4 \frac{2^8\, n(n-1)^{2n-2}}{9(137)^3 (n+1)^{2n+2}} \frac{Ry}{\hbar}$$



Реальная часть динамической поляризуемости основного состояния атома водорода как функция частоты. Ось абсцисс отложена в эВ, ось ординат – в атомных единицах.

Фотоионизация атомной оболочки

$$\sigma_{nl}(\omega) = \frac{4\pi^2 N_{nl} \, \mathrm{v}_a}{3e^2 a_B \, \omega \, 137(2l+1)} \left[\left| d_{nl,\varepsilon(l+1)} \right|^2 + \left| d_{nl,\varepsilon(l-1)} \right|^2 \right]$$

$$d^r_{nl,\varepsilon l'} = \frac{e\omega \, \mathrm{v}_a}{a_B} \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^\infty R_{nl}(r) \, r \, R_{\varepsilon l'}(r) \, r^2 \, dr$$

$R_{nl}(r)$, $R_{\varepsilon l'}(r)$ – радиальные волновые функции электрона в связанном и свободном состояниях

$\begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ – 3j-символ, описывает правила отбора для дипольного излучения

$l' = l \pm 1$ – правило отбора по орбитальному квантовому числу

Как правило, в сечение фотоионизации дает основной вклад переход с увеличением квантового числа орбитального момента

Водородоподобное приближение для фотоионизации (формула Зоммерфельда)

$$\sigma_{ph1s}^{H-like}(\omega)=\frac{2^9\pi^2}{3Z^2\,137}\left(\frac{I_{1s}}{\hbar\omega}\right)^4 a_B^2\,\frac{\exp(-4\zeta\, arcctg\zeta)}{1-\exp(-2\pi\zeta)};\quad \zeta=Z\,m\,e^2/p\hbar;\quad p=\sqrt{2m\left(\hbar\omega-I_{1s}\right)}$$

$$\sigma_{1s}(\omega, p\to 0)=\frac{2^9\pi^2 a_B^2}{3e^4 Z^2\,137}\left(1-\frac{8}{3}\frac{(\hbar\omega-I_{1s})}{I_{1s}}\right)\approx\frac{0.23\,a_B^2}{Z^2}\left(1-\frac{8}{3}\frac{(\hbar\omega-I_{1s})}{I_{1s}}\right)-$$

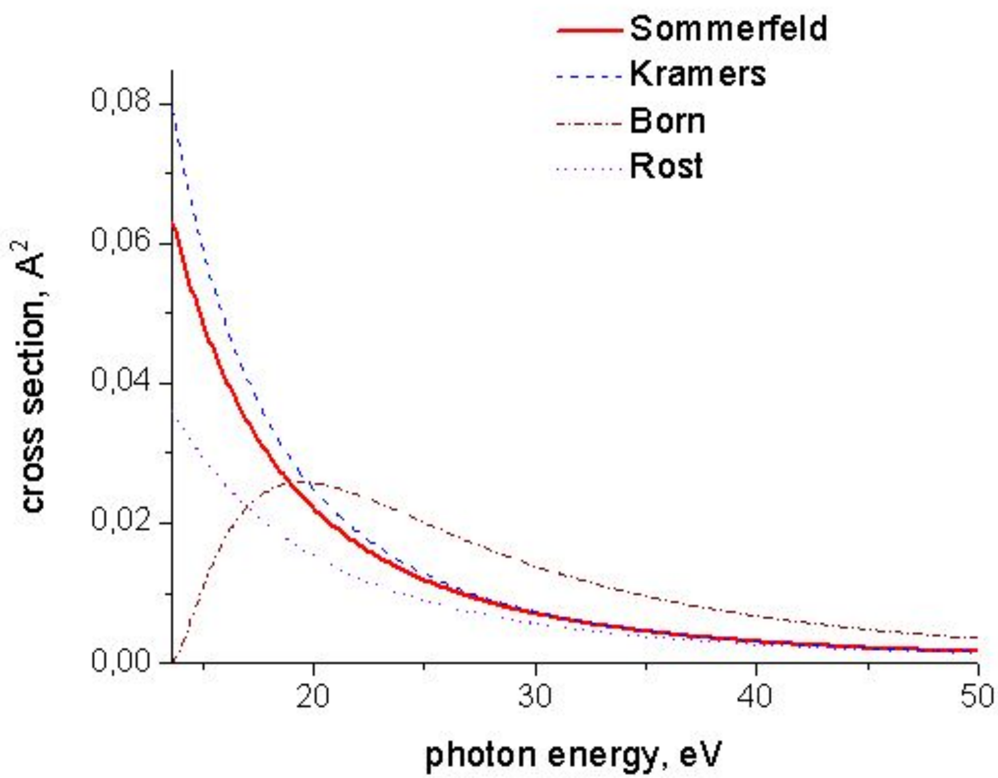
вблизи порога фотоионизации

$\sigma_{ns}^{thres}=\left(I_{1s}/I_{ns}\right)\sigma_{1s}^{thres}$ – пороговое значение сечения фотоионизаци и возрастает с ростом главного квантового числа.

$$\sigma_{1s}(\hbar\omega>>I_{1s})\approx\frac{2^8\pi}{3}\frac{a_B^2}{Z^2\,137}\left(\frac{I_{1s}}{\hbar\omega}\right)^{7/2}\left[1-\pi\sqrt{\frac{I_{1s}}{\hbar\omega}}\right]$$

высокочастотное приближение для сечения фотоионизации; $\sigma_{nl}(\omega)\propto 1/\omega^{l+7/2}$ – для фотоионизации оболочек с $l\neq 0$

Сечение фотоионизации атома водорода, вычисленное в различных приближениях



$$\sigma_{nl}^{(Kr)}(\omega) = \frac{64\pi}{3\sqrt{3}} N_{nl} \frac{a_B^2}{137 Z^2} \sqrt{\frac{Ry}{I_{nl}}} \left(\frac{I_{nl}}{\hbar\omega}\right)^3$$

$$\sigma_{1s}^{(B)}(\omega) = \frac{2^8 \pi}{3 \cdot 137} a_B^2 \frac{Ry}{\hbar\omega} \frac{\left(p(\omega) a_B/\hbar\right)^3}{\left[1 + \left(p(\omega) a_B/\hbar\right)^2\right]^2}$$

$$\sigma_{ph}^{(R)}(\omega) = \frac{8\pi^3 Z^2}{3 \cdot 137} a_B^5 \left(\frac{2Ry}{\hbar\omega}\right)^{7/2} n\left(r = \sqrt{\frac{a_B \mathrm{v}_a}{\omega}}\right)$$

$n(r)$ – радиальная плотность электронов

Зоммерфельдовское, крамерсовское и борновское сечение фотоионизации основного состояния атома водорода, а также сечение в приближении Роста

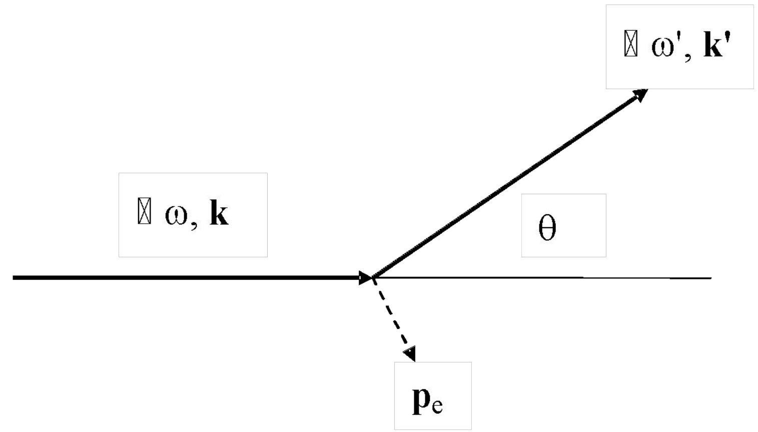
Рассеяние фотона на свободном электроне

$$\frac{1}{\omega'}-\frac{1}{\omega}=\frac{\hbar}{mc^2}\left(1-\cos\theta\right)$$

$\lambda_C = h/mc \cong 2.42\cdot 10^{-10}$ см

комптоновская длина волны

электрона



Рассеяние фотона на покоящемся электроне, $\mathbf{p}_e$ – импульс отдачи электрона

$$d\sigma=\frac{r_e^2}{2}\left(\frac{\omega'}{\omega}\right)^2\left(\frac{\omega}{\omega'}+\frac{\omega'}{\omega}-\sin^2\theta\right)d\Omega' -$$ формула Клейна-Нишины-Тамма

$r_e = e^2/mc^2 \cong 2.82\cdot 10^{-13}$ см – классический радиус электрона

$$d\sigma^{Th}\left(\hbar\omega << mc^2\right)=\frac{1}{2}r_e^2\left(1+\cos^2\theta\right)\left(\frac{\omega'}{\omega}\right)^2 d\Omega' -$$ формула Томсона

Рэлеевское рассеяние излучения на атоме, интегральное по углу рассеяния

$$\sigma_i^{(Rsc)}(\omega) = \frac{8\pi}{3}\left|\frac{\omega^2}{c^2}\beta_i(\omega)\right|^2$$ – рэлеевское рассеяние (без изменения час тоты)

$$\beta_{res}\left(|\omega-\omega_{0n}| \le \delta_{0n}\right) = \left(\frac{e^2}{2m\omega_{0n}}\right)\frac{f_{0n}}{\omega_{0n}-\omega-i\ \delta_{0n}/2}$$ – резонасная поляризуемость

$$\sigma_i^{(res\,sc)}(\omega \approx \omega_{ni}) = \frac{2\pi}{3} f_{ni}^2\, r_e^2\, \frac{\omega_{ni}^2}{(\omega-\omega_{ni})^2 + (\delta_{ni}/2)^2}$$ – резонансное рассеяние

для естественного уширения $(\delta_{ni})_{\text{ест}} = A_{ni}$ имеем: $\sigma_i^{(res\,sc)}(\omega = \omega_{ni}) \approx \lambda_{ni}^2$

$$\sigma_i^{(R\,sc)}(\omega >> \omega_{ni}) = \frac{8\pi}{3} r_e^2\, N_a^2$$ – сечение рассеяния в высокочастотном пре деле

и в дипольном приближении $\lambda >> a_B$; проявляется когерентность вклада

в процесс всех электронов атома: $\sigma_i^{(R\,sc)}(\omega >> \omega_{ni}) \propto N_a^2$

Угловое распределение рассеянного излучения

$$\frac{d\sigma_i^{(Rsc)}\left(\omega >> \omega_{ni}\right)}{d\Omega'} = \frac{1+\cos^2\theta}{2} r_e^2 N_a^2 \quad \text{для} \quad \left|\mathbf{r}_j\right|\left|\Delta\mathbf{k}\right| << 1$$

$$\frac{d\sigma_i^{(Rsc)}\left(\omega >> \omega_{ni}\right)}{d\Omega'} = \frac{1+\cos^2\theta}{2} r_e^2 \left|n_{ii}\left(\mathbf{k}'-\mathbf{k}\right)\right|^2 - \text{в общем случае}$$

$$n_{ii}\left(\Delta\mathbf{k}\right) \equiv F_i\left(\Delta\mathbf{k}\right) = \left\langle i \middle| \sum_j \exp\left(i\Delta\mathbf{k}\,\mathbf{r}_j\right) \middle| i \right\rangle - \text{атомный форм-фактор}$$

$$F_i\left(\Delta\mathbf{k}\right) = \frac{N_a}{1+\Delta\mathbf{k}^2 R_a^2} - \text{в приближении экспоненциальной экраниро вки}$$

$$F_i\left(\left|\Delta\mathbf{k}\right| \to 0\right) \to N_a; \quad F_i\left(\left|\Delta\mathbf{k}\right| R_a >> 1\right) \to 0; \quad R_a - \text{радиус атома}$$