

ОПТИЧЕСКИЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

ЛЕКЦИЯ №1

Взаимодействие излучения с атомами

Астапенко В.А., д.ф.-м.н.

Атом водорода. Формула Бальмера.

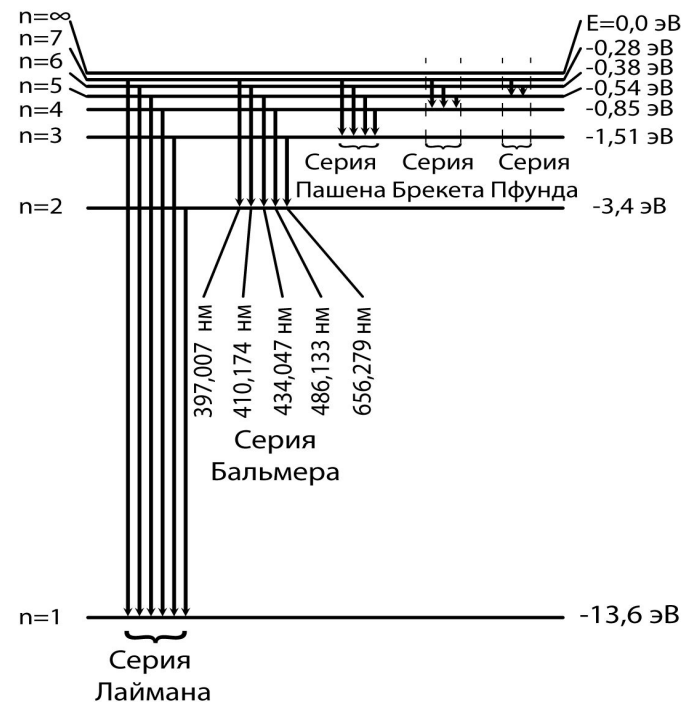
Исследование взаимодействия электромагнитного излучения с атомами началось с регистрации спектров *атома водорода*.

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):

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

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 $|n\rangle$, 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.

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

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

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Z m_e e^2} = \frac{n^2}{Z} a_B; \quad a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \cong 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ м} \quad \tau_a = \frac{a_B}{v_a} = \frac{\hbar^3}{m_e e^4} \cong 1.52 \cdot 10^{-17} \text{ с}$$

$$Ry = \frac{m_e e^4}{2 \hbar^2} \cong 13.6 \text{ эВ} \quad Ry = \frac{\epsilon_a}{2}$$

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

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

Определение: $e = m_e = \hbar = 1$ – система единиц Хартри или атомная система единиц

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

Дискретный спектр энергии водородоподобного атома

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} Ry$$

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

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

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

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:

$$Q(t) = \frac{2}{3c^3} |\dot{\mathbf{d}}(t)|^2 \quad \& \quad \mathbf{d}(t) = e\mathbf{r}(t); \quad \gg a \quad \omega Q(\omega_0) = \frac{4}{3c^3} \omega_0^4 |\mathbf{d}(\omega_0)|^2$$

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

$$\omega_0 \rightarrow \omega_{mn} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$$

Принцип соответствия между классической и квантовой механикой

Мощность излучения атомного перехода

$$Q_{mn} = \frac{4\pi}{3} \frac{\omega_{mn}^4}{c^3} |\mathbf{d}_{mn}|^2 \rightarrow \frac{Q_{mn}}{\Delta E_{mn}} = \frac{4\pi}{3} \frac{\omega_{mn}^3}{c^3} |\mathbf{d}_{mn}|^2 = A_{mn} = \frac{1}{\tau_{mn}}$$

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

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

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

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

$$\sum_n f_{n0} + \int_{I_p}^{\infty} \frac{df_0}{d\varepsilon} d\varepsilon = 1 \text{ — суммарное правило сумм для сил осциллято ра}$$

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

$$\ddot{x}_{jn} + 2\delta_{jn}\dot{x}_{jn} + \omega_{jn}^2 x_{jn} = f_{jn} \frac{e}{m} E(t); \quad \omega_{jn} = (E_j - E_n)/\hbar$$

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

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

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

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

Спектральная форма линии осциллятора перехода

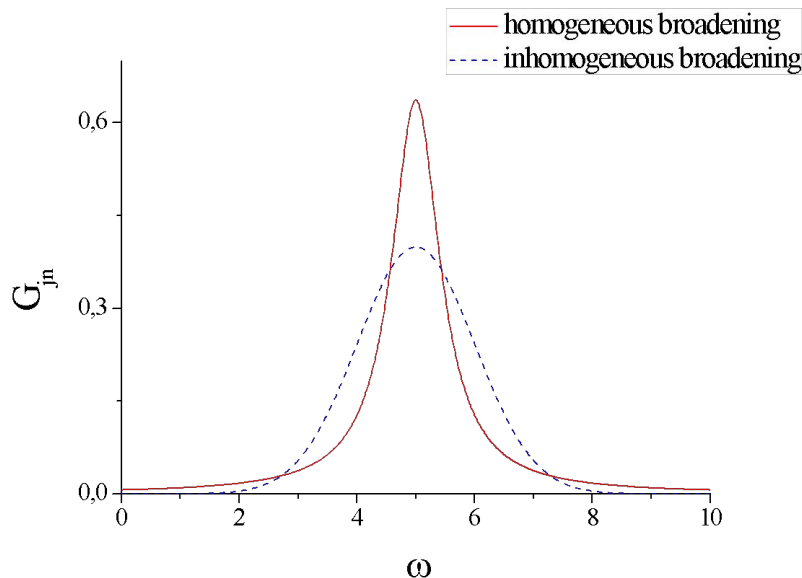
$$G_{jn}^{(h)}(\omega') = \frac{(\Delta\omega_{jn}^{(h)}/\pi)}{(\omega_{jn} - \omega')^2 + (\Delta\omega_{jn}^{(h)})^2} - \text{однородное уширение};$$

$$T_2 = \frac{2}{\Delta\omega_{jn}^{(h)}} - \text{время поперечной}$$

(необратимой) релаксации

$$G_{jn}^{(inh)}(\omega') = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta\omega_{jn}^{(inh)}} \exp\left[-\frac{(\omega' - \omega_{jn}^{(e)})^2}{2(\Delta\omega_{jn}^{(inh)})^2}\right] - \text{неоднородное уширение}$$

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



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

Однородное уширение описывается лоренцевской формой линии (лоренциан).

Неоднородное уширение описывается гауссовской формой линии (гауссиан).

Однородное и неоднородное уширение спектральной линии

Сечение радиационного перехода

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

w_{jn} – вероятность в единицу времени радиационного перехода

$$j(\omega) = \frac{c E_0^2}{8\pi \hbar \omega} - \text{плотность потока фотонов в монохроматическом излучении}$$

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

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

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

$$A_{nj} = \frac{\Phi_{jn}^3}{3 \hbar g_j c^3} |\mathbf{d}_{jn}|^2$$

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

Динамическая поляризуемость атома

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

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

$$\mathbf{d}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \beta(\omega) \mathbf{E}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$

(интегральное представление)

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

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

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

Предельные случаи атомной поляризуемости

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

$$\beta_\infty (\omega \gg I_p) = -\frac{e^2 N_e}{m \omega^2} \text{ — высокочастотная поляризуемость атома}$$

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

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

— резонансная поляризуемость во временном представлении

Общие соотношения для динамической поляризуемости

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

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

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

$\operatorname{Im}(\beta(\omega)) = \frac{c}{4\pi\omega} \sigma_{ph}(\omega)$ — сечение фотопогл $\sigma_{ph}(\omega)$ —

ощения

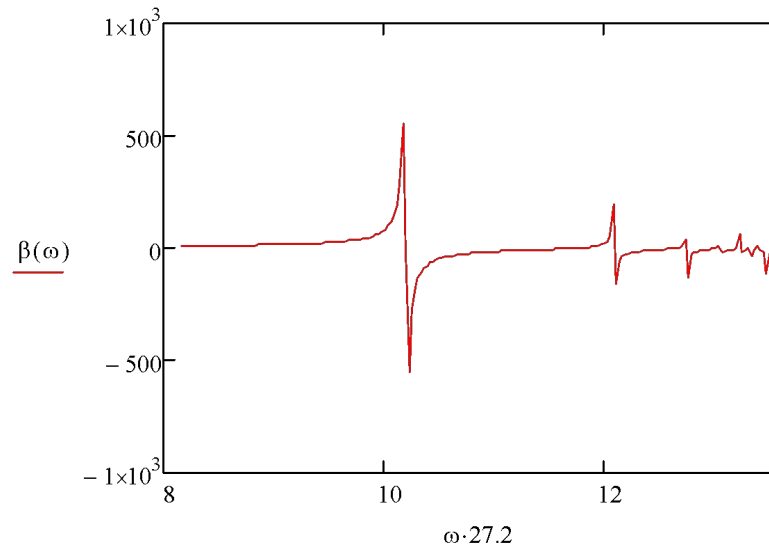
$$\operatorname{Re}(\beta(\omega)) = \frac{c}{2\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{\sigma_{ph}(\omega') - \sigma_{ph}(\omega)}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \rightarrow \beta(0) = \frac{c}{2\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{\sigma_{ph}(\omega)}{\omega^2} d\omega$$

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

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

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

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

$R_{nl}(r)$ радиальные волновые функции электрона

в связанном и свободном состояниях

$\begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ – 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)

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

$\sigma_{1s}(\omega \text{ вблизи порога фотоионизации}) \approx \frac{2^9 \pi^2 a_B^2}{3 e^4 Z^2 137} \left(\frac{8(\hbar \omega - I_{1s})}{3 I_{1s}} \right) \approx \frac{0.23 a_B^2}{Z^2} \left(1 - \frac{8(\hbar \omega - I_{1s})}{3 I_{1s}} \right)$

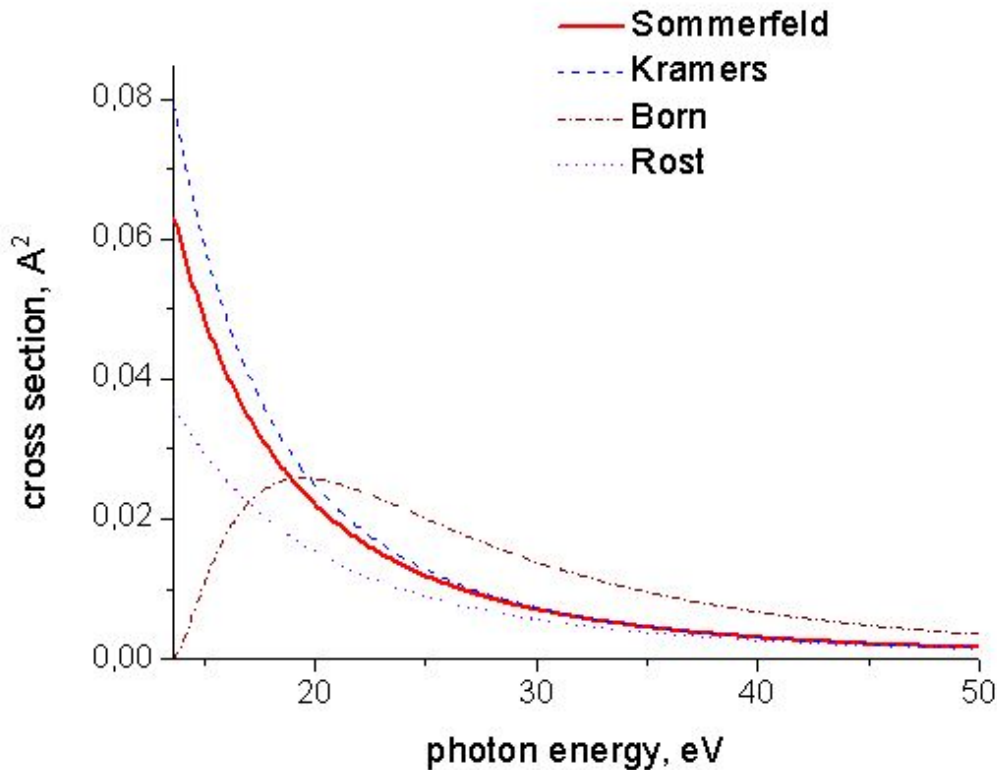
$\sigma_{ns}^{thres} = (I_{1s} / I_{ns}) \sigma_{1s}^{thres}$ – пороговое значение сечения фотоионизации и возрастает с ростом главного квантового числа.

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

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



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

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

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

$n(r)$ – радиальная плотность электронов

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

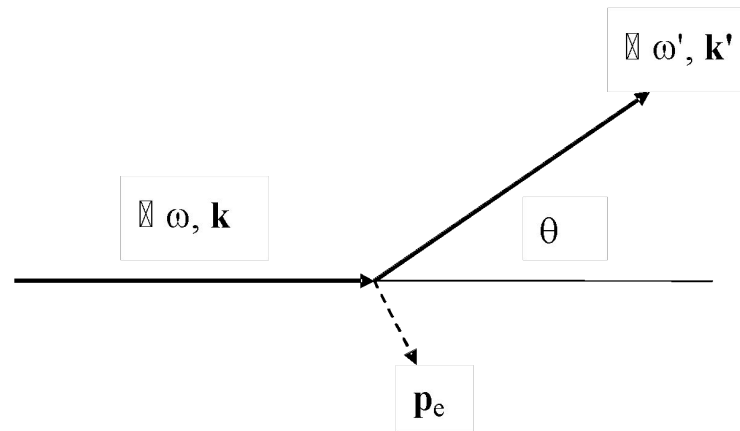
Рассеяние фотона на свободном электроне

$$\frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega} = \frac{h}{m c^2} (1 - \cos \theta)$$

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

КОМПТОНОВСКАЯ ДЛИНА ВОЛНЫ

ЭЛЕКТРОНА



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

$$d\sigma = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^2 \left(\frac{\omega}{\omega'} + \frac{\omega'}{\omega} - \sin^2 \theta \right) \quad \text{Формула Кляйна-Нишины-Тамма}$$

$$r_e = e^2/mc^2 \cong 2.82 \cdot 10^{-13} \text{ м} \quad \text{Классический радиус электрона}$$

$$d\sigma^{Th} (\omega \ll mc^2) = \frac{1}{2} r_e^2 (\text{Формула Томсона}) \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^2 \Omega'$$

Рэлеевское рассеяние излучения на атоме, интегральное по углу рассеяния

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

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

$$\sigma_i^{(res.sc)}(\omega) = \frac{8\pi}{3} r_e^2 \frac{\omega_{ni}^2}{(\omega - \omega_{ni})^2 + (\delta_{ni}/2)^2} - \text{резонансное рассеяние}$$

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

$$\sigma_i^{(Rsc)}(\omega \gg \omega_{ni}) = \frac{8\pi}{3} r_e^2 N_a^2 - \text{сечение рассеяния в высокочастотном пределе}$$

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

в процесс всех электронов атома: $\sigma_i^{(Rsc)}(\omega \gg \omega_{ni}) \propto N_a^2$

Угловое распределение рассеянного излучения

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

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

$$n_{ii}(\Delta \mathbf{k}) \equiv F_i(\Delta \mathbf{k}) = \langle i | \sum_j \exp(i \Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j) | i \rangle \quad \text{— Форм-фактор}$$

$$F_i(\Delta \mathbf{k}) = \frac{N_a}{1 + \Delta \mathbf{k}^2 R_a^2} \quad \text{— в приближении экспоненциальной экранировки}$$

$$F_i(|\Delta \mathbf{k}| \rightarrow 0) \rightarrow N_a \quad \text{и} \quad F_i(|\Delta \mathbf{k}| R_a \gg 1) \rightarrow 0; \quad R_a \text{ —}$$