угол θ: $|\mathbf{p}|\sin(\theta/2) = \hbar\omega/c$. Вероятность этого процесса можно получить из сечения томсоновского рассеяния (59,15)

$$d\sigma = r_e^2\,|\mathbf{e}'^*\mathbf{e}|^2\,do' = r_e^2\,do'$$

путем умножения на плотность потока фотонов с импульсом $\mathbf{k}$ и число фотонов с импульсом $-\mathbf{k}$.

Плотность потока фотонов с частотами в интервале $d\omega$ равна

$$cU_\omega\,d\omega/2\hbar\omega,$$

где $U_\omega\,d\omega$ — плотность энергии в стоячей волне в спектральном интервале $d\omega$ (множитель $1/2$ учитывает, что энергия волны разделена поровну между фотонами противоположных направлений). Импульсы $\mathbf{k}$ всех фотонов, образующих стоячую волну, параллельны определенному направлению $\mathbf{n}$ («направление» стоячей волны). Другими словами, плотность энергии как функция частоты и направления фотонов $\mathbf{n}'$: $U_{\omega\mathbf{n}'} = U_\omega\delta^{(2)}(\mathbf{n}'-\mathbf{n})$. Соответственно этому число фотонов с импульсом $-\mathbf{k}$ равно (ср. (44,8)):

$$\int N_{-\mathbf{k}}\,do' = \frac{8\pi^3c^3}{\hbar\omega^3}\frac{U_\omega}{2}.$$

В результате получаем для вероятности рассеяния электрона (в 1 с)

$$w = \frac{2\pi^3e^4}{m^2\hbar^2\omega^4}\int U_\omega^2\,d\omega.$$

Множитель ω^{-4} вынесен за знак интеграла, поскольку степень немонохроматичности $\Delta\omega$ предполагается малой. Значение интеграла обратно пропорционально $\Delta\omega$ (при заданной полной интенсивности).

§ 60. Рассеяние свободно ориентирующимися системами

Если уровень энергии атома не вырожден, то поляризуемость и интенсивность когерентного рассеяния определяются одним и тем же тензором $\alpha_{ik} \equiv (c_{ik})_{11}$. Если же уровень вырожден, то наблюдаемые значения указанных величин получаются усреднением по всем состояниям, относящимся к данному уровню. Поляризуемость должна быть определена как среднее значение

$$\alpha_{ik} = \overline{(c_{ik})_{11}}.$$

Наблюдаемая же интенсивность рассеяния определяется средними значениями произведений

$$\overline{(c_{ik})_{11}\,(c_{lm})_{11}}.$$

Поэтому связь между поляризуемостью и рассеянием становится менее прямой.

Отметим, что хотя каждая из величин $(c_{ik})_{11}$ может быть комплексной, их средние значения вещественны (предполагается, что поглощение отсутствует и α_{ik} — эрмитов тензор). Действительно, при усреднении можно произвольным образом выбрать совокупность независимых волновых функций (отвечающих данному вырожденному уровню), а при этом можно всегда добиться того, чтобы все функции были вещественными.

Для свободных (не находящихся во внешнем поле) атомов или молекул вырождение уровней связано обычно со свободно ориентирующимся в пространстве моментом. Пусть начальное состояние при рассеянии имеет момент J_1, а конечное J_2. Как обычно, сечение рассеяния должно быть усреднено по всем значениям проекции M_1 и просуммировано по значениям M_2. После первого усреднения сечение перестает зависеть от M_2, так что дальнейшее суммирование сводится к умножению на $(2J_2+1)$. Таким образом, усредненное сечение рассеяния

$$d\bar{\sigma} = \omega\omega'^3 c^{(21)}_{iklm} e'^*_i e_k e'_l e^*_m do', \tag{60,1}$$

где

$$c^{(21)}_{iklm} = \frac{1}{2J_1+1} \sum_{M_1 M_2} (c_{ik})_{21} (c_{lm})^*_{21} = (2J_2+1)\,\overline{(c_{ik})_{21} (c_{lm})^*_{21}}^{\,1}, \tag{60,2}$$

а черта с индексом 1 означает усреднение по M_1.

Для несмещенного рассеяния состояния 1 и 2 относятся к одному и тому же уровню энергии ($\omega_{12}=0$). Если речь идет лишь о когерентном рассеянии, то состояния 1 и 2 должны совпадать полностью, т. е. должно быть: $M_1 = M_2$. Суммирование по M_2, а с ним и множитель $2J_2+1$ в (60,2) при этом отпадают:

$$c^{(\text{ког})}_{iklm} = \overline{(c_{ik})_{11} (c_{lm})^*_{11}}^{\,1}. \tag{60,3}$$

Результат усреднения можно написать без особых вычислений, если учесть, что усреднение по M_1 эквивалентно усреднению по всем ориентациям системы, после чего среднее значение может выражаться только через единичный тензор δ_{ik}. При этом могут оказаться отличными от нуля только средние значения произведений компонент скалярной, симметричной и антисимметричной частей тензора рассеяния в отдельности; ясно, что с помощью единичного тензора нельзя составить выражения, которые по своим свойствам симметрии могли бы соответствовать перекрестным произведениям. Таким образом,

$$c^{(21)}_{iklm} = G^0_{21}\delta_{ik}\delta_{lm} + c^{(21)}_{iklm}{}^s + c^{(21)}_{iklm}{}^a, \tag{60,4}$$

где

$$\begin{aligned} G^0_{21} &= (2J_2+1)\,\overline{|(c^0)_{21}|^2}^{\,1}, \\ c^{(21)}_{iklm}{}^s &= (2J_2+1)\,\overline{(c^s_{ik})_{21} (c^s_{lm})^*_{21}}^{\,1}, \\ c^{(21)}_{iklm}{}^a &= (2J_2+1)\,\overline{(c^a_{ik})_{21} (c^a_{lm})^*_{21}}^{\,1}. \end{aligned} \tag{60,5}$$

Другими словами, сечение (а с ним интенсивность) рассеяния свободно ориентирующейся системой распадается на сумму трех независимых частей, о которых мы будем говорить как о *скалярном*, *симметричном* и *антисимметричном рассеянии*.

Каждый из трех членов в (60,4) выражается всего через одну независимую величину. Скалярное рассеяние — через величину G^0_{21}, а для симметричного и антисимметричного рассеяния имеем

$$\begin{aligned} c^{(21)\,s}_{iklm} &= \frac{1}{10} G^s_{21} \left(\delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl} - \frac{2}{3}\delta_{ik}\delta_{lm}\right), \\ G^s_{21} &= (2J_2+1)\,\overline{(c^s_{ik})_{21}\,(c^s_{ik})_{21}}^{\,1}; \\ c^{(21)\,a}_{iklm} &= \frac{1}{6} G^a_{21} \left(\delta_{il}\delta_{km} - \delta_{im}\delta_{kl}\right), \\ G^a_{21} &= (2J_2+1)\,\overline{(c^a_{ik})_{21}\,(c^a_{ik})_{21}}^{\,1} \end{aligned} \qquad (60,6)$$

(комбинация единичных тензоров составляется по свойствам симметрии, после чего общий коэффициент находится свертыванием по парам индексов il и km).

Подстановка формул (60,4—6) в (60,1) приводит к следующему выражению для сечения рассеяния:

$$d\bar{\sigma} = \omega\omega'^3 \left\{ G^0_{21} \,|\mathbf{e}'^*\mathbf{e}|^2 + \frac{1}{10} G^s_{21}\left(1 + |\mathbf{e}'\mathbf{e}|^2 - \frac{2}{3}|\mathbf{e}'^*\mathbf{e}|^2\right) + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{6} G^a_{21}\left(1 - |\mathbf{e}'\mathbf{e}|^2\right)\right\} do'. \qquad (60,7)$$

Эта формула определяет в явном виде угловые зависимости и поляризационные свойства рассеяния.

Полное сечение рассеяния по всем направлениям, просуммированное по поляризациям конечного фотона и усредненное по поляризациям и направлениям падения начального фотона, легко получить прямо из (60,1). Для этого замечаем, что

$$\overline{e_i^* e_k} = \delta_{ik}/3,$$

если усреднение производится как по поляризациям, так и по направлениям распространения фотона (суммирование же по ним соответственно даст результат в $2\cdot 4\pi$ раз больший). В результате получим

$$\bar{\sigma} = \frac{8\pi}{9}\,\omega\omega'^3 c^{(21)}_{ikik} = \frac{8\pi}{9}\,\omega\omega'^3 \left(3G^0_{21} + G^s_{21} + G^a_{21}\right). \qquad (60,8)$$

Выше уже было указано, что правила отбора для рассеяния совпадают с правилами отбора для матричных элементов произвольного тензора второго ранга. В связи с разложением интенсивности рассеяния на три независимые части целесообразно сформулировать эти правила для каждой из частей в отдельности.

Правила отбора для симметричного рассеяния совпадают с правилами отбора для электрически-квадрупольного излучения, поскольку последнее тоже определяется неприводимым симметричным тензором (тензором квадрупольных моментов). Для антисимметричного рассеяния правила отбора совпадают с таковыми для магнитно-дипольного излучения, поскольку оба определяются аксиальным вектором (напомним, что антисимметричный тензор эквивалентен (дуален) аксиальному вектору)[1]). При этом, однако, имеется отличие в том, что диагональные матричные элементы, которые в излучательном случае дают средние значения электрических или магнитных моментов (и не соответствуют излучательным переходам), в случае рассеяния существенны — они относятся к когерентному рассеянию.

Для скалярного рассеяния правила отбора совпадают с таковыми для матричных элементов скалярной величины. Это значит, что возможны переходы лишь между состояниями одинаковой симметрии. В частности, должны быть одинаковыми значения полного момента J и его проекции M (причем диагональные по M матричные элементы от числа M не зависят — см. III (29,3)). Для несмещенного рассеяния, тем самым, состояния 1 и 2 должны совпадать полностью (не только по энергии, но и по M), так что несмещенное скалярное рассеяние полностью когерентно. Обратно, поскольку в скалярном рассеянии все состояния во всяком случае комбинируют сами с собой, то в когерентном рассеянии всегда имеется скалярная часть.

Аналогично произведенному выше усреднению сечения рассеяния, для свободно ориентирующейся в пространстве системы должен быть усреднен по направлениям момента J_1 также и тензор поляризуемости. Усреднение производится совсем просто: очевидно, что

$$\alpha_{ik} \equiv \overline{(c_{ik})_{11}}^1 = \overline{(c^0)_{11}}^1 \delta_{ik}.$$

Симметричная и антисимметричная части тензора рассеяния при усреднении выпадают: δ_{ik} есть единственный изотропный тензор второго ранга.

Выше было отмечено, что диагональные матричные элементы скаляра не зависят от числа M_1. Поэтому знак усреднения над $(c^0)_{11}$ можно вообще опустить (и вычислять $(c^0)_{11}$ при любом значении M_1), так что поляризуемость

$$\alpha_{ik} \equiv (c^0)_{11}\,\delta_{ik}. \tag{60,9}$$

[1]) Речь идет, конечно, о тех правилах отбора, которые связаны с симметрией, а не с конкретным видом аксиального вектора в случае излучения: вектор магнитного момента содержит спиновую часть, между тем как при рассеянии рассматриваются матричные элементы от величин орбитальной (координатной) природы.

По той же причине знак усреднения можно опустить и в величине G_{11}^0, определяющей скалярную часть когерентного рассеяния:

$$G_{11}^0 = \overline{|(c^0)_{11}|^2} = (c^0)_{11}^2 \qquad (60,10)$$

(множитель $2J_2+1$ опущен в соответствии с (60,3)). Таким образом, имеется простая связь между средней поляризуемостью и скалярной частью когерентного рассеяния. То и другое определяется величиной

$$(c^0)_{11} = \frac{2}{3}\sum_n \frac{\omega_{n1}}{\omega_{n1}^2 - \omega^2} |\mathbf{d}_{n1}|^2. \qquad (60,11)$$

Задачи

1. Найти угловое распределение и степень деполяризации при рассеянии линейно поляризованного света.

Решение. Пусть θ — угол между направлением рассеяния $\mathbf{n}'$ и направлением поляризации падающего света $\mathbf{e}$. Рассеянный свет содержит две независимые компоненты, поляризованные в плоскости $\mathbf{n}'$, $\mathbf{e}$ (интенсивность I_1) и перпендикулярно ей (интенсивность I_2); степень деполяризации дается отношением I_2/I_1. Интенсивности I_1 и I_2 определяются по формуле (60,7) с соответствующим образом направленными $\mathbf{e}'$.

При скалярном рассеянии свет остается полностью поляризованным в той же плоскости ($I_2 = 0$), а угловое распределение интенсивности

$$I = \frac{3}{2}\sin^2\theta.$$

(Здесь и ниже выражения для $I = I_1 + I_2$ нормированы так, чтобы давать 1 при усреднении по направлениям.) При симметричном рассеянии

$$I = \frac{3}{20}(6 + \sin^2\theta), \qquad \frac{I_2}{I_1} = \frac{3}{3+\sin^2\theta}.$$

При антисимметричном рассеянии

$$I = \frac{3}{4}(1 + \cos^2\theta), \qquad \frac{I_2}{I_1} = \frac{1}{\cos^2\theta}.$$

2. То же для рассеяния естественного света.

Решение. Переход в формуле (60,7) к естественному (неполяризованному) падающему свету осуществляется заменой

$$e_i e_k^* \to \frac{1}{2}(\delta_{ik} - n_i n_k),$$

отвечающей усреднению по направлениям поляризации $\mathbf{e}$ при заданном направлении падения $\mathbf{n}$. Рассеянный свет будет частично поляризован, и из соображений симметрии очевидно, что его две независимые компоненты будут линейно поляризованы в плоскости рассеяния $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}'$ (интенсивность $I_\parallel$) и перпендикулярно ей (интенсивность $I_\perp$). Угол рассеяния (угол между $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$) обозначим ϑ.

Для скалярного рассеяния

$$I = I_\perp + I_\parallel = \frac{3}{4}(1 + \cos^2\vartheta), \qquad \frac{I_\parallel}{I_\perp} = \cos^2\vartheta.$$

Для симметричного рассеяния

$$I = \frac{3}{40}(13 + \cos^2\vartheta), \qquad \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}} = \frac{6 + \cos^2\vartheta}{7}.$$

Для антисимметричного рассеяния

$$I = \frac{3}{8}(2 + \sin^2\vartheta), \qquad \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}} = 1 + \sin^2\vartheta.$$

3. Для рассеяния циркулярно поляризованного света определить коэффициент обращения (отношение интенсивности компоненты, поляризованной по кругу в «обращенном» направлении, к интенсивности компоненты, поляризованной в «правильном» направлении).

Решение. При циркулярно поляризованном падающем свете угловое распределение и степень деполяризации (отношение $I_{\parallel}/I_{\perp}$) — такие же, как при рассеянии естественного света.

Пусть вектор $\mathbf{e}$ падающего света имеет компоненты $\mathbf{e} = (1, i, 0)/\sqrt{2}$ (в системе координат с плоскостью xz, совпадающей с плоскостью рассеяния, и осью z вдоль направления $\mathbf{n}$). Тогда для «обращенной» и «правильной» циркулярно поляризованных компонент рассеянного света векторы поляризации

$$\mathbf{e}' = \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos\vartheta, -i, -\sin\vartheta) \quad \text{и} \quad \mathbf{e}' = \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos\vartheta, i, -\sin\vartheta).$$

Вычисляя интенсивность с помощью (60,7), находим коэффициенты обращения P для всех трех типов рассеяния

$$P^0 = \operatorname{tg}^4\frac{\vartheta}{2}, \qquad P^s = \frac{13 + \cos^2\vartheta + 10\cos\vartheta}{13 + \cos^2\vartheta - 10\cos\vartheta}, \qquad P^a = \frac{1 - \cos^4(\vartheta/2)}{1 - \sin^4(\vartheta/2)}$$

(ϑ — угол рассеяния).

4. Вычислить сечение рассеяния фотона малой частоты на атоме водорода в основном состоянии.

Решение. Фотон малой частоты может рассеиваться только упруго. Поскольку в основном состоянии атома водорода орбитальный момент $L = 0$, согласно правилам отбора в пренебрежении спин-орбитальной связью имеется только скалярное рассеяние. Статическая поляризуемость атома (в обычных единицах)

$$\alpha = \frac{9}{2}\left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^3$$

(см. III, задачу 4 к § 76). Подставив в (60,8), получим искомое сечение:

$$\sigma_t = 54\pi\left(\frac{\omega}{c}\right)^4\left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^6.$$

5. Вычислить сечение упругого рассеяния γ-излучения дейтроном (*H. A. Bethe*, *R. Peierls*, 1935).

Решение. Волновые функции основного состояния дейтрона и его состояний непрерывного спектра (диссоциированный дейтрон)

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{\varkappa}{2\pi}}\frac{e^{-\varkappa r}}{r}, \qquad \psi_{\mathbf{p}} = e^{i\mathbf{pr}}, \qquad \varkappa = \sqrt{MI}$$

(см. (58,2 — 3)). Матричный элемент дипольного момента $\mathbf{d}_{\mathbf{p}0} = -ie\mathbf{p}_{\mathbf{p}0}/M\omega_{\mathbf{p}0}$ вычислен в § 58:

$$\mathbf{d}_{\mathbf{p}0} = -\frac{4\pi i e}{M\omega_{\mathbf{p}0}}\sqrt{\frac{\varkappa}{2\pi}}\frac{\mathbf{p}}{\varkappa^2+\mathbf{p}^2},$$

причем частоты $\omega_{\mathbf{p}0} = (\mathbf{p}^2+\varkappa^2)/M$. Тензор поляризуемости

$$\alpha_{ik} = \left\{\frac{2}{3}\int\frac{\omega_{\mathbf{p}0}}{\omega_{\mathbf{p}0}^2-\omega^2}|\mathbf{d}_{0\mathbf{p}}|^2\frac{d^3p}{(2\pi)^3} - \frac{e^2}{2M\omega^2}\right\}\delta_{ik}.$$

Первый член связан с виртуальным возбуждением внутренних степеней свободы дейтрона; он написан в виде (60,11). Второй член связан с воздействием поля волны на поступательное движение дейтрона в целом. Поскольку это движение квазиклассично, соответствующая часть тензора рассеяния дается формулой (59,14) (с массой дейтрона $2M$ в качестве m).

Вычисление α_{ik} сводится к взятию интеграла

$$J = \frac{1}{2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{z^4\,dz}{(z^2+1)^3[(z^2+1)^2-\gamma^2]}, \qquad z = \frac{p}{\varkappa}, \qquad \gamma = \frac{M\omega}{\varkappa^2} = \frac{\omega}{I}.$$

Имеем:

$$J = \frac{1}{8}\frac{d}{d\lambda}\left(\frac{1}{\lambda}\frac{dJ_0}{d\lambda}\right)\Big|_{\lambda=1}, \qquad J_0 = \frac{1}{2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{z^4\,dz}{(z^2+\lambda^2)[(z^2+1)^2-\gamma^2]}.$$

При $\gamma < 1$ подынтегральное выражение имеет в верхней полуплоскости комплексной переменной z полюсы в точках $i\lambda$, $i\sqrt{1+\gamma}$, $i\sqrt{1-\gamma}$; интеграл J_0 вычисляется по вычетам в этих полюсах. В результате получим

$$J = \frac{\pi}{2}\left\{\frac{(1+\gamma)^{3/2}}{2\gamma^4} + \frac{(1-\gamma)^{3/2}}{2\gamma^4} - \left(\frac{3}{8\gamma^2}+\frac{1}{\gamma^4}\right)\right\}.$$

Полное сечение рассеяния выражается через α_{ik} согласно (60,8), (60,10) и равно (в обычных единицах)

$$\sigma = \frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{Mc^2}\right)^2\Big|-1-\frac{4}{3\gamma^2} + \frac{2}{3\gamma^2}\left[(1+\gamma)^{3/2}+(1-\gamma)^{3/2}\right]\Big|^2 \quad \text{при} \quad \gamma = \frac{\hbar\omega}{I} < 1.$$

Амплитуда рассеяния при $\gamma > 1$ (выше порога диссоциации дейтрона) получается из амплитуды при $\gamma < 1$ аналитическим продолжением, причем у нее появляется мнимая часть, которая должна быть положительна (в соответствии с правилом обхода в (59,17)):

$$\sigma = \frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{Mc^2}\right)^2\Big|-1-\frac{4}{3\gamma^2} + \frac{2}{3\gamma^2}(\gamma+1)^{3/2} + i\frac{2}{3\gamma^2}(\gamma-1)^{3/2}\Big|^2 \quad \text{при} \quad \gamma > 1.$$

При $\gamma \gg 1$ получается $\sigma = (8\pi/3)(e^2/Mc^2)^2$, что соответствует, как и следовало ожидать, нерелятивистскому рассеянию на свободном протоне.

Угловое распределение излучения

$$d\sigma = \sigma \frac{3}{4}(1 + \cos^2\vartheta)\frac{do}{4\pi},$$

где ϑ — угол рассеяния. Определив амплитуду рассеяния согласно (59,24), будем иметь

$$\operatorname{Im} f(0) = \frac{2e^2}{3Mc^2}\frac{(\gamma - 1)^{3/2}}{\gamma^2}, \quad \gamma > 1.$$

Согласно оптической теореме (59,26) эта величина совпадает с $\omega\sigma_t/4\pi$, где σ_t — полное сечение фотодиссоциации (58,4). Напомним, что сечение упругого рассеяния — более высокого порядка ($\sim e^4$), чем сечение диссоциации ($\sim e^2$, см. (58,4)), так что σ_t совпадает с сечением диссоциации. По той же причине в рассмотренном приближении амплитуда рассеяния при $\gamma < 1$ (ниже порога диссоциации) оказалась вещественной.

§ 61. Рассеяние на молекулах

Специфика молекулярного рассеяния связана с теми же свойствами молекул, которые лежат вообще в основе теории их спектров, — с возможностью раздельного рассмотрения электронного состояния при неподвижных ядрах и движения ядер в заданном эффективном поле электронов.

Пусть частота падающего света ω меньше энергии ω_e первого электронного возбуждения. Тогда при рассеянии электронные термы не могут возбудиться. Рассеяние будет либо несмещенным, либо смещенным за счет возбуждения вращательных или колебательных уровней.

Предположим далее, что основной электронный терм молекулы не вырожден (и не имеет тонкой структуры). Другими словами, предполагается, что равны нулю полный спин электронов и проекция их полного орбитального момента на ось молекулы (для молекул типа симметричного волчка). Так, для двухатомных молекул это значит, что основной электронный терм должен быть $^1\Sigma$. Как известно, эти условия выполняются для основных состояний большинства молекул [1]).

Наконец, будем предполагать частоту ω большой по сравнению с интервалами ядерной (вращательной и колебательной) структуры основного терма, а разность $\omega_e - \omega$ находящейся в таком же отношении к ядерной структуре возбужденного электронного терма. Другими словами, частота падающего света дол-

[1]) Излагаемые ниже результаты могут, однако, быть справедливы (с определенной точностью) также и в случаях, когда вырождение основного электронного терма связано с отличным от нуля спином, а спин-орбитальное взаимодействие мало (так что вызываемой им тонкой структурой можно пренебречь). В этом приближении состояния с различными направлениями спина не комбинируют и в этом смысле ведут себя как невырожденные. Таков, например, случай молекулы O_2 с основным термом $^3\Sigma$.