Министерство
общего и профессионального образования России

Воронежский государственный университет

На правах рукописи

А.В. Меремьянин

Инвариантные представления матриц конечных вращений и их приложения к теории фотопроцессов

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.02 (теоретическая физика)

Научный руководитель —
доктор физико-математических наук,
профессор Н.Л. Манаков

Воронеж 1998

Оглавление

Введение

Изучение угловых распределений в процессах с участием поляризованных частиц дает возможность получать информацию, недоступную при наблюдении свободно ориентирующихся систем. Особенно актуальны задачи исследования угловых распределений в реакциях с поляризованными фотонами.

Поскольку экспериментальный анализ поляризационных явлений в реакциях с жесткими фотонами чрезвычайно затруднен, выражения для вероятностей, как правило, усредняются по поляризациям фотонов, что приводит к значительному упрощению угловых зависимостей, и вместе с тем, к потере ценной информации о динамике процесса. Эксперименты по взаимодействию интенсивного лазерного излучения с веществом тоже, как правило, проводились с линейно или циркулярно поляризованными фотонами из одного лазерного пучка. В этом случае также общие выражения для поляризационных зависимостей упрощаются, хотя известно, что эксперименты с эллиптически поляризованными фотонами позволяют получать информацию, недоступную в принципе в случае линейно- или циркулярно-поляризованных фотонов [34].

С развитием экспериментальной техники стало возможным эффективное исследование поляризационно-угловой зависимости сечений процессов с участием поляризованных жестких фотонов, а также многофотонных процессов с эллиптически поляризованными фотонами.

Одним из наиболее эффективных средств исследования угловых распределений в задачах квантовой физики является теория углового момента, которая изучает общие свойства неприводимых тензоров — совокупности величин, преобразующихся при пространственных вращениях по тому же закону, что и хорошо известные сферические функции $Y_{jm}(\mathbf{a})$.

Очевидно, что учет эффектов поляризации сильно усложняет анализ угловых распределений, поскольку вносит в задачу дополнительные векторы, которые могут входить в выражения для сечений только в виде скалярных произведений друг с другом. Применение стандартных методов теории углового момента, — мультипольных разложений и теоремы Вигнера-Эккарта, – приводит к появлению в выражениях для сечений и вероятностей процессов трудно анализируемых тензорных произведений сферических функций — мультиполярных гармоник.

До сих пор, анализ поляризационных эффектов проводился либо исходя из прямого определения мультиполярных гармоник, как суммы произведений компонент сферических функций, входящих в определение гармоники, с соответствующими коэффициентами Клебша-Гордана [20], либо путем вычисления тензорных произведений в подходящей системе координат [5,45]. Оба этих метода обладают одним принципиальным недостатком – они не позволяют получать «инвариантные» равенства, т.е. равенства, явно не зависящие от конкретного выбора системы координат. Следствием этого, в частности, является необходимость отдельного рассмотрения случаев линейной и циркулярной поляризации фотонов [1, 5, 20].

Основной целью представленной диссертации является развитие метода теории углового момента, позволяющего выделять поляризационную зависимость сечений в инвариантном виде, содержащем только скалярные произведения векторов задачи, например, векторов поляризации, направлений импульсов и т.д..

Техника выделения поляризационных зависимостей, предложенная в диссертации, состоит в использовании инвариантных представлений матриц конечных вращений, определяющих преобразование неприводимых тензоров при вращениях.

Стандартные представления матриц конечных вращений определяются конкретной параметризацией поворота системы координат, например, тремя углами Эйлера [4, 26]. В главе 1 получены новые представления матриц конечных вращений в инвариантной тензорной форме, содержащей векторы, связанные с фиксированной в пространстве системой координат K. Представлены три явных выражения для матриц конечных вращений: а) в терминах тензорных произведений векторов циклического и декартова базисов; б) в дифференциальном виде, содержащим тензорные произведение операторов градиента; в) в виде суперпозиции «минимальных» биполярных гармоник (1.40), зависящих от любой пары неколлинеарных векторов $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}'$ связанных с системой K. На основе этих результатов для матриц конечных вращений, получено правило преобразования неприводимых тензоров при пространственных вращениях в терминах биполярных гармоник. Данные результаты в особенности полезны при анализе угловых распределений в атомных процессах, включающем точный учет всех эффектов поляризации фотона и мишени.

Полученные инвариантные представления МКВ дают возможность явно выделять тензорную структуру различных объектов и представляют собой, по сути, обобщение координатного метода векторной алгебры на случай неприводимых тензоров.

С помощью инвариантных представлений МКВ получены следующие результаты: во-первых, найдено инвариантное представление тензора фотонной поляризации, содержащее степени линейной и циркулярной поляризации фотонов и единичные векторы, направленные вдоль импульса фотона и большой полуоси эллипса поляризации; во-вторых, получено инвариантное разложение триполярных гармоник второго ранга в виде комбинаций тензорных произведений двух векторов. Третье, предложена удобная параметризация для поляризационных мультиполей состояния поляризованной атомной мишени.

Хотя результаты главы 1 являются общими и справедливы для произвольных тензоров, в ряде конкретных случаев приходится иметь дело с мультиполярными гармониками специального вида, включающими две сферические функции произвольных рангов l, l' и небольшое количество дополнительных векторов. Например, тензорные произведения двух сферических функций, – биполярные гармоники, – являются базисными функциями теории гамма-гамма корреляций [40], кроме того, через биполярные гармоники выражаются неприводимые компоненты матрицы плотности состояний, возбужденных в результате поглощения лазерных фотонов [15].

В таких случаях возможно получать более простые, чем при прямом применении инвариантных представлений матриц конечных вращений, результаты. В главе 2 работы (разделы 2.1, 2.2) развит метод, позволяющий существенно упростить анализ угловых распределений, включающих мультиполярные гармоники конечного ранга L с произвольными рангами внутренних тензоров. Он базируется на разложении биполярных гармоник с произвольными l, l' в суперпозицию «минимальных» биполярных гармоник с тем же самым рангом L, но с минимально возможными рангами внутренних тензоров, сумма которых равна L. Минимальные гармоники являются простейшими гармониками ранга L и удобны для анализа. Процедуру разложения мультиполярных гармоник по минимальным гармоникам мы будем называть «приведением». В приложении В приведены биполярные гармоники рангов $L = 1, 2, 3$ в простейшей, удобной для приложений форме. Приложения А, Б содержат некоторые результаты техники векторного дифференцирования и операторного представления мультиполярных гармоник.

В представленном подходе выражения для поляризационных зависимостей процессов включают только скалярные и смешанные произведения векторов задачи и полиномы, зависящие от углов между этими же векторами. Таким образом, выделение геометрических и динамических факторов возможно в общем виде без использования приближенных волновых функций. Полное число динамических факторов (т.е. инвариантных «радиальных» параметров, не зависящих от углов и поляризационных состояний) определяется величинами угловых моментов и других квантовых чисел начального и конечного состояний системы.

Результаты, полученные в разделе 2.1, 2.2 могут быть использованы в различных приложениях.

В главах 3,4,5 с использованием техники приведения мультиполярных гармоник рассмотрены угловые распределения в процессах с участием одного, двух и трех фотонов, соответственно.

Прогресс в экспериментальных исследованиях фотопроцессов с участием поляризованных атомов и молекул предоставляет широкие возможности для исследования специфических вопросов теории многоэлектронных атомов, например «эффектов внутренних оболочек». При учете поляризационных эффектов фотонов, электронов и/или остаточных ионов возможно появление новых интересных эффектов. Циркулярный дихроизм (т.е. разность сечений, соответствующих различным знакам степени циркулярной поляризации фотонного пучка) – один из них. В настоящее время циркулярный дихроизм (ЦД) детально изучен (экспериментально и теоретически) главным образом в процессах однократной фотоионизации. В этом случае ЦД отличен от нуля только при ненулевой поляризации атома и/или фотоэлектрона. Последние результаты исследования ЦД для случая прямой фотоионизации и для резонансной ионизации с фотовозбуждением автоионизационного резонансного состояния изложены в работах [20,31]. Изучение ЦД в фотопроцессах с неполяризованными атомами и электронами было начато в последние несколько лет. Так, ЦД в двойной ионизации впервые обсуждался в работе [23] (см. также [24, 47, 54]). В работах [36, 54, 58] обсуждался ЦД в случае упругого и неупругого рассеяния электрона на атоме в лазерном поле и в тормозном излучении. ЦД в рассеянии света неполяризованными атомами детально исследован в работе [8].

Кроме того, циркулярный дихроизм возможен и в излучении фотонов поляризованными (ориентированными) атомами. Наблюдение ЦД в этом случае дает возможность определить среднее значение полного момента атома (см. раздел 3.1). Инвариантная форма поляризационных моментов позволяет записать выражение для вероятности в наиболее компактном виде, содержащем скалярные произведения векторов, характеризующих процесс приготовления атома-мишени и векторов поляризации фотона.

Уже в простейшем фотопроцессе – однократной фотоионизации в электрическом дипольном приближении, аккуратный учет всех поляризационных эффектов является сложной проблемой, поскольку дифференциальное сечение $d\sigma$ содержит различные векторы. Общее выражение для $d\sigma$ было получено в [49, 64] и включает скалярное произведение поляризационного тензора фотона и триполярной гармоники (2.2). Это выражение столь сложно, что до сих пор детально проанализированы лишь случаи атомного момента $J_0 \leq 3/2$ [20, 31]. Уже в случае $J_0 = 3/2$ не учтен вклад атомных мультиполей состояния ранга 3. Далее, в указанных работах не учитывалась поляризация электрона, и случаи линейной и циркулярной поляризации фотона рассматривались отдельно.

В разделе 3.2, из соображений симметрии и вращательной инвариантности, получена общая структура сечения однократной фотоионизации. Для получения инвариантных атомных параметров в явном виде используются результаты раздела 2.1, с помощью которых параметры углового распределения электронов записаны в терминах приведенных матричных элементов оператора дипольного момента $\mathbf{D}$. Все результаты справедливы для произвольной поляризации фотона.

В разделе 3.3 проанализировано угловое распределение фотоэлектронов и ЦД в однофотонной двухэлектронной фотоионизации неполяризованного атома (без учета спинов фотоэлектронов). Как и в разделе 3.2, сначала на основе соображений симметрии записана общая структура дифференциального сечения, и затем окончательные результаты получены с использованием формул приведения биполярных гармоник. Эти результаты аккуратно описывают общую структуру углового распределения в двойной ионизации любого атома с угловым моментом J_0, и упрощают результаты работ [24, 47]. Для волновой функции пары электронов в непрерывном спектре используется мультипольное разложение.

Хотя в работе [53] показано, что экспериментальные результаты для двухэлектронной ионизации гелия и неона хорошо параметризуются при учете всего 4 членов парциального разложения амплитуды, проведение практических расчетов с использованием мультипольных разложений волновых функций непрерывного спектра затруднено в связи с отсутствием на сегодняшний день сколько-нибудь приемлемых аналитических выражений для коэффициентов мультипольных разложений.

В разделе 3.3 обсуждается также угловое распределение в тормозном излучении электрона на атоме, представлены соответствующие атомные параметры. В разделе 3.4 в наиболее простом и компактном виде приведена структура поляризационно-угловой зависимости сечения релятивистского фотоэффекта с учетом эффектов запаздывания и поляризации спина фотоэлектрона. Эксперименты обычно проводятся с линейно поляризованными фотонами синхротронного излучения, которые поляризованы частично и, в общем случае, имеют ненулевую (хотя и малую) степень эллиптичности [46]. Полученная параметризация сечения релятивистского фотоэффекта (3.1) может облегчить обработку экспериментальных данных в случае произвольно поляризованных фотонов.

Современные достижения в технике источников гамма- и рентгеновского (в особенности, синхротронного) излучения делают возможным экспериментальное наблюдение эффектов фотонной поляризации в рассеянии жестких фотонов атомными мишенями. Корректный теоретический анализ этих задач требует привлечения аппарата квантовой электродинамики с учетом запаздывания и релятивистских эффектов. Анализ как теоретических, так и экспериментальных результатов в области упругого рассеяния квантов гамма- и рентгеновского излучения атомами с заполненными электронными оболочками изложен в обзорной статье [48]. Более детальные исследования вклада релятивистских и мультипольных эффектов изложены в [33, 41], где главным образом изучались угловые распределения рассеянных фотонов для конкретных атомов, однако поляризационная зависимость сечений не была проанализирована, исключая простейший случай атомов с нулевым полным моментом (с заполненными электронными оболочками). Эффекты фотонной поляризации были полностью проанализированы только в случае рассеяния на релятивистском свободном электроне (см., например [3, 62]). Наряду с рассеянием фотонов, аккуратный анализ поляризационной зависимости интересен и для других двухфотонных релятивистских задач, экспериментальное изучение которых началось в последние годы. Среди них – измерение спектральных и угловых распределений фотонов при двухфотонном распаде метастабильных состояний в водороде и гелии и соответствующих многозарядных ионах (некоторые ссылки см. в [19, 35]). Другой пример – многофотонные эффекты в сильном электрическом поле VUV-лазеров, включая двухфотонное возбуждение и ионизацию внутренних атомных оболочек (см. [70]). Важность релятивистских эффектов в такого рода задачах продемонстрирована в вычислениях [68] двухфотонного возбуждения водородоподобных ионов линейно-поляризованным фотонным пучком.

В главе 4 развита квантовоэлектродинамическая теория эффектов фотонной поляризации в двухфотонных связанно-связанных переходах в атомах с аккуратным учетом эффектов запаздывания и релятивистских эффектов. Обнаружено, что в общем случае произвольного полного углового момента J_i, J_f, начального и конечного состояний свободно ориентированной мишени и произвольного поляризационного состояния фотонов, дифференциальное сечение содержит 8 инвариантных (относительно поляризаций) атомных параметров, $a_i(\cos\theta)$, зависящих от угла θ между волновыми векторами фотонов. Получен явный вид a_i в виде рядов полиномов Лежандра от $\cos\theta$ и матричных элементов второго порядка сферических функций Бесселя. Поляризационные параметры сечений записаны как в виде скалярных произведений векторов задачи, так и через параметры Стокса. Показано, что два параметра a_i описывают специфический дипольно-запрещенный эффект – циркулярный дихроизм, обусловленный интерференцией действительной и мнимой частей парциальных амплитуд рассеяния. Этот эффект, в частности, приводит к возникновению эллиптичности рассеянных фотонов при полностью линейно поляризованном падающем пучке. На основании соображений симметрии получены необходимые условия появления ЦД в двухфотонных переходах между связанными состояниями. В деталях рассмотрены случаи атомных переходов с $J_i = J_f = 0$ и $J_i = J_f = 1/2$. Численные оценки параметров $a_i(\cos\theta)$ для водородоподобных ионов, а также для рэлеевского рассеяния на атомах с заполненными оболочками демонстрируют, что описывающие ЦД члены в сечениях имеют величину, достаточную для экспериментального наблюдения эффектов циркулярного дихроизма.

В ранних экспериментах по взаимодействию лазерного излучения с атомами и молекулами использовалось, как правило, линейно-поляризованное излучение и поляризационная зависимость сечений не исследовалась. Между тем известно, что состояние поляризации фотонного пучка существенным образом влияет на характер протекания многофотонных процессов. В частности, достаточно подробно изучена зависимость сечений типичных многофотонных переходов от абсолютной величины степени эллиптичности светового поля (см., например, ([34, 37]). Однако, наиболее интересен случай циркулярного дихроизма, когда сечения различаются при одновременном изменении знаков циркулярной поляризации всех фотонов, участвующих в процессе (как падающих, так и испущеных в результате взаимодействия). В процессах с хаотически ориентированными атомными частицами ЦД определяется интерференцией действительных и мнимых частей парциальных амплитуд процесса и содержит важную информацию о характере взаимодействия атомных частиц с излучением, которая не может быть получена из экспериментов с линейно-поляризованными фотонами.

В фотоионизации атомов и молекул ЦД отличен от нуля только при ионизации первоначально ориентированных (поляризованных) атомов или при фиксированной ориентации спина фотоэлектрона. Этот факт очевиден из общих соображений симметрии: поскольку степень циркулярной поляризации фотона ξ является псевдоскалярной величиной, слагаемые в сечении фотоэффекта, ответственные за ЦД, могут содержать ξ лишь в произведениях типа $\xi\,\mathbf{J}$, где $\mathbf{J}$ — полный момент атома или спин фотоэлектрона, которые являются псевдовекторами. Последние результаты в этой области содержатся, например, в работах [10, 20] и показывают, что различие сечений для право и левополяризованных фотонов может достигать весьма значительной величины и позволяет получить важную информацию, в частности, о величине парциальных дипольных матричных элементов перехода и фазах рассеяния электрона на остаточном ионе.

Более специфическим эффектом является ЦД в процессах взаимодействия фотонов с неполяризованными атомными частицами. Исследование этого эффекта начато лишь в последние годы. Так, в работах [24,47] (см. также [57]) обсуждается ЦД в двойном фотоэффекте (выбивание двух электронов одним фотоном) и фотоиндуцированном Оже-распаде. В работах [10, 58] установлены условия возникновения дихроизма в процессах тормозного излучения и поглощения и рассеяния электронов на атомах в присутствии световой волны. В работе [8] детально исследован ЦД в процессах рэлеевского и рамановского рассеяния света газами, а особенности ЦД при резонансном двухфотонном возбуждении атомов обсуждаются в [59]. Как показано в [8], в двухфотонных связанно-связанных переходах ЦД возникает лишь при учёте недипольных поправок во взаимодействии атома с фотонами и наиболее существен в области частот, резонансных дипольно-запрещённому переходу в атоме, когда малость недипольных эффектов в сечении компенсируется малостью резонансного знаменателя.

В главе 5 анализируются поляризационные эффекты в трехфотонных переходах между дискретными атомными уровнями (трехфотонное возбуждение, гиперкомбинационное рассеяние, смешение частот и т.д.) [12]. В отличие от известной теории Плачека двухфотонного рассеяния [3], которое полностью описывается тремя инвариантными атомными параметрами, разделение кинематических (зависящих от поляризаций и направлений волновых векторов фотонов) и динамических (атомных) факторов в сечениях трехфотонного рассеяния более сложно. Феноменологическая теория нерезонансного трехфотонного рассеяния в газах развита в работе [14], однако, в таком подходе не выясняется связь параметров рассеяния с микроскопическими атомными константами, а приближение прозрачной среды исключает эффекты

ЦД. Структура сечений трехфотонных процессов в атомах исследовалась в работе [11], однако, полученные общие результаты оказались весьма громоздкими, поскольку угловая часть выражена через трудно анализируемые тензорные произведения шести векторов, а атомные факторы - через сложные комбинации приведённых матричных элементов, включающие $3nj$ – символы Вигнера.

Используя специальную технику вычисления тензорных произведений векторов (раздел 2.2.1) и удобную параметризацию векторов поляризации фотонов для общего случая произвольной, в т.ч. и частичной поляризации, в разделе 5.1.2 проведено выделение геометрических и динамических факторов для сечения произвольного трехфотонного перехода между связанными состояниями $|i\rangle$ и $|f\rangle$ противоположной четности, разрешённого правилами отбора для электрического дипольного излучения. В общем случае сечение содержит 15 различных слагаемых, четыре из которых описывают ЦД, возникающий для трехфотонных процессов уже в электрическом дипольном приближении. Как и в двухфотонных процессах [8], ЦД отличен от нуля лишь при наличии антиэрмитовой части у парциальных амплитуд перехода («диссипативно-индуцированный дихроизм») и достигает значений порядка единицы в области одно- или двухфотонных резонансов с промежуточными атомными уровнями.

В разделе 5.2 анализируется наиболее интересная для эксперимента ситуация, когда два из трех фотонов идентичны (из одного лазерного пучка накачки). В этом случае при произвольной эллиптической поляризации накачки «полный опыт» позволяет определить 6 независимых атомных параметров, один из которых описывает дихроизм, в то время как при линейной поляризации сечение описывается лишь двумя различными параметрами. Далее, в случае идентичных фотонов «дихроичное» слагаемое в сечении содержит произведение степеней линейной и циркулярной поляризации накачки и, таким образом, ЦД в экспериментах с двумя идентичными фотонами отличен от нуля лишь при эллиптической поляризации накачки («эллиптический дихроизм» – ЭД).

Выше предполагалось, что атомы мишени свободно ориентированы в пространстве, так что сечения усредняются и суммируются по проекциям моментов атома в начальном и конечном состояниях, соответственно. Наряду с ЦД, учет диссипативных эффектов, обусловленных антиэрмитовой частью амплитуды трехфотонных переходов, приводит также к специфическим эффектам ориентации атомов при взаимодействии с неполяризованными или линейно-поляризованными фотонами. В разделе 5.3 эти эффекты обсуждаются на простейшем примере резонансного трехфотонного возбуждения атомного уровня с полным моментом $J = 1/2$.

Глава 1

Инвариантные представления матриц конечных вращений и некоторые приложения

В данной главе получены инвариантные представления матриц конечных вращений в виде тензорных произведений векторов. Рассмотрены некоторые простые примеры использования таких представлений для определения тензорной структуры различных объектов: тензора фотонной поляризации, триполярных гармоник второго ранга, поляризационных моментов рангов 1,2.

1.1 Общие замечания

Квантовая теория углового момента является мощным средством исследования в задачах атомной, молекулярной и оптической физики. Среди наиболее важных объектов этой теории находятся так называемые матрицы конечных вращений (МКВ) $R^j_{m'm}(\Omega)$, которые описывают преобразование неприводимых тензоров при пространственных вращениях в соответствии с соотношением [4]:

$$T'_{jm} = \sum_{m'=-j}^{j} T_{jm'} R^j_{m'm}(\Omega), \tag{1.1}$$

где T_{jm} и T'_{jm} – компоненты тензора T_j, указанные в «старой» (фиксированной или начальной) системе K и в «новой» (повернутой или лабораторной или конечной) системе K', соответственно. Символ Ω обозначает параметры вращения. Ур. (1.1) содержит МКВ в абстрактной форме. Явные представления МКВ зависят от конкретного выбора параметров, определяющих вращение.

В настоящее время наиболее широко используются два различных представления МКВ.

Это так называемые D- и U-функции [4]. Функции Вигнера $D^j_{m'm}(\alpha\beta\gamma)$ зависят от трех углов Эйлера α, β, γ, использование которых приводят к наиболее компактным алгебраическим выражениям для МКВ. Функции $U^j_{m'm}(\mathbf{n},\omega)$ зависят от направления оси вращения $\mathbf{n}$ и от угла поворота ω. В этом случае параметры вращения $\Omega = \mathbf{n},\omega$. Таким образом, один из параметров есть единичный вектор с угловыми координатами Θ, Φ, которые одинаковы и в системе K и в системе K'. (Очевидно, что угловые координаты векторов, не коллинеарных вектору $\mathbf{n}$, различны в системах K и K'). Поэтому явный вид $U^j_{m'm}$ зависит от алгебраического параметра ω и от Θ и Φ [4].

Несмотря на то обстоятельство, что матрица конечных вращений есть набор $(2j+1)$ неприводимых тензоров пронумерованных либо индексом m', либо индексом m (т.е. МКВ есть тензор ранга j с проекциями m в системе K', а в системе K – с проекциями m'); явные выражения для МКВ не обладают структурой явно инвариантной относительно выбора конкретной системы координат.

Даже в простейшем случае, когда ранг j МКВ равен единице, функции $D^j_{m'm}$ или $U^j_{m'm}$ не могут быть представлены в виде инвариантных комбинаций некоторых векторов. Только для D^j_{0m} j такое инвариантное представление широко известно. Оно указано, например, в [4]

$$D^j_{0m}(0,\beta,\gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}}Y_{jm}(\mathbf{a}), \tag{1.2}$$

где $Y_{jm}(\mathbf{a})$ есть сферическая гармоника зависящая от вектора $\mathbf{a}$, направленного вдоль оси Z фиксированной системы координат K; два угла Эйлера $\beta, \pi-\gamma$, есть полярные углы $\mathbf{a}$ в системе K'. Вследствие ур. (1.2), D-функции Вигнера называют также «обобщенными сферическими гармониками». Отметим, что для функций $U^j_{m'm}(\mathbf{n},\omega)$ существует разложение по сферичским гармоникам $Y_{l\mu}(\mathbf{n})$ с $0 \le l \le 2j$, но коэффициентами этого разложения являются коэффициенты Клебша-Гордана $C^{l\mu}_{jm\,jm'}$, зависящие от m, m'. [4, 13]. Мы используем термин «инвариантный» для соотношений, аналогичных соотношению (1.2) поскольку сферическая гармоника в правой части этого равенства является тензорным произведением векторов $\mathbf{a}$ (см. раздел 1.2).

Наряду с техникой Рака, МКВ в виде функций Вигнера наиболее удобны для вычислений атомной, ядерной и молекулярной структур. Однако для изучения угловых распределений (в особенности в реакциях в поляризованными частицами, когда в задачу входит большое количество векторов), использование инвариантных выражений для МКВ в форме комбинаций тензорных произведений векторов, входящих в задачу, зачастую может оказаться предпочтительнее. Действительно, угловые распределения инвариантны относительно вращений системы координат, поэтому их описание в терминах инвариантных комбинаций векторов, характеризующих задачу, очень полезно. Другой важной особенностью инвариантных представлений МКВ является возможность представления произвольного тензора в инвариантной форме, содержащей линейные комбинации элементов МКВ, пронумерованных индексом m' (см. (1.1)) с коэффициентами, являющимися компонентами того же тензора, вычисленными в подходящей системе координат.

Для получения инвариантных представлений МКВ мы будем описывать вращение в терминах угловых координат некоторых векторов, не включающих каких-либо алгебраических параметров вроде углов Эйлера, либо угла поворота ω, не присущих векторным объектам, как таковым. Именно, мы фиксируем некоторый набор векторов в «старой» или исходной системе координат K, который может включать векторы сферического или декартового базисов или, в общем случае, произвольную пару неколлинеарных векторов $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ с фиксированным углом θ между ними (таким образом, $0 < \theta < \pi$ является свободным параметром). Угловые координаты этих векторов в «новой» или повернутой системе K' связаны с координатами в K посредством вращения, явное выражение для которого не нуждается в конкретизации. Хотя для полного описания вращения достаточно трех независимых действительных параметров (углов Эйлера, например) и для каждого набора векторов, фиксированных в K, связь между старыми и новыми координатами может быть определена в терминах трех действительных параметров (см. (1.51) ниже), такая конкретизация вращения не нужна, и инвариантной формы МКВ вполне достаточно. По этой причине мы не указываем в формулах связь аргумента Ω с независимыми алгебраическими параметрами.

Как указано выше, в общем случае МКВ может быть представлена как суперпозиция неприводимых тензоров $\hat{\mathcal{M}}^s_{jm}(\Omega)$ ранга j, пронумерованных индексом s и составленных из некоторых векторов, фиксированных в «старой» системе K,

$$R^j_{m'm}(\Omega) = \sum_s c_s(j, m')\hat{\mathcal{M}}^s_{jm}(\Omega). \tag{1.3}$$

Таким образом, вся зависимость $R^j_{m'm}$ от индекса m находится в тензорной проекции $\hat{\mathcal{M}}^s_{jm}(\Omega)$, в то время как коэффициент c_s в (1.3) не зависит от m. Этот важнейший факт демонстрирует инвариантность (1.3) относительно конкретного выбора «новой» системы координат K'. Далее, (1.3) приводит к инвариантной параметризации («модифицированному» правилу преобразования) произвольного неприводимого тензора,

$$T'_{jm} = \sum_s t_s(j)\hat{\mathcal{M}}^s_{jm}(\Omega), \tag{1.4}$$

где коэффициент $t_s(j)$, равный

$$t_s(j) = \sum_{m'} c_s(j, m')T_{jm'}, \tag{1.5}$$

является линейной комбинацией компонент $T_{jm'}$ в подходящей «старой» системе K. Таким образом, тензоры $\hat{\mathcal{M}}^s_{jm}$ образуют базис в пространстве неприводимых тензоров ранга j, аналогично случаю сферических тензоров ранга 1 (векторов).

Раздел 1.2 начинается с рассмотрения простейшего случая МКВ единичного ранга $j = 1$, затем изложены некоторые замечания относительно метода построения МКВ в инвариантном виде. Именно, при произвольных j получено разложение МКВ в терминах тензорных произведений векторов сферического базиса системы K. В этом случае сумма по s в (1.3) содержит только один оператор $\hat{\mathcal{M}}_{jm}$, составленный из векторов сферического базиса (см. (1.17)).

В разделе 1.3 получено дифференциальное представление МКВ в виде результата действия тензорного произведения $\nabla_{\mathbf{r}}$-операторов на сферическую гармонику, зависящую от углов произвольного вектора $\mathbf{r}$. Дифференциальная форма МКВ очень компактна и полезна для иллюстрации некоторых общих свойств матриц конечных вращений. В частности, соотношения (1.24) и (1.25) демонстрируют симметрию $R^j_{m'm}$ относительно m и m', несмотря на различный смысл этих индексов: первый обозначает тензорную проекцию в системе K, а второй – в K'. С помощью дифференциальной формы МКВ в разделе 1.4 получены представление $R^j_{m'm}$ в виде тензорного произведения векторов декартового базиса (см. (1.36)), а также два представления в виде дифференциальных форм, содержащих $\nabla_{\mathbf{r}}$-операторы и скалярные произведения декартовых (см. (1.33)) или сферических (см. (1.39)) базисных векторов с произвольным вспомогательным вектором $\mathbf{r}$.

Выражения для МКВ, представленные в разделах 1.2 и 1.4 содержат довольно сложные комбинации базисных векторов, поэтому в разделе 1.5 результаты переписаны в более компактном виде с использованием выражений для $\hat{\mathcal{M}}^s_{jm}$ из (1.3) как тензорных произведений двух сферических гармоник («минимальных» биполярных гармоник $\mathcal{Y}^s_{jm}(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ с $s = 0, \ldots, j$ [57]), зависящих от пары векторов $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, связанных с системой K. Рассмотрен как случай, когда $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ являются векторами декартового базиса (см. (1.41), (1.42)), так и более общий случай произвольной пары векторов $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ с углом θ между ними (см. (1.47) и (1.48)). Отметим, что в последнем случае коэффициенты c_s в (1.3) зависят от θ. Для $m' = 0$ суперпозиция «минимальных» биполярных гармоник в (1.3) непосредственно сводится к выражению (1.2). Поэтому термин «обобщенная биполярная гармоника» для МКВ является более адекватным, чем термин «обобщенная сферическая функция».

В разделе 1.6 рассмотрены применения инвариантных форм МКВ к некоторым физическим задачам. В качестве простейшего применения, основанного на использовании дифференциальной формы МКВ, получена инвариантная форма (см. (1.54)) тензора фотонной поляризации второго ранга в терминах волнового вектора фотона $\mathbf{k}$ и единичного вектора $\boldsymbol{\epsilon}$, направленного вдоль главной оси эллипса поляризации фотона. Важным для приложений является «модифицированное правило» преобразования неприводимых тензоров (см. (1.55)), которое следует из (1.1) после подстановки разложения (1.3) $R^j_{m'm}$ по $\mathcal{Y}^s_{jm}$. Уравнение (1.55) обосновывает утверждение о полноте набора «минимальных» гармоник $\mathcal{Y}^s_{jm}(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ с фиксированным j и переменным s в пространстве неприводимых тензоров ранга j.

Также рассмотрены следующие приложения: в разделе 1.6.1 получены формулы, упрощающие вычисление триполярных гармоник, зависящих от трех векторов $\mathbf{n}_i$, $i = 1, 2, 3$. Такие объекты возникают при кинематическом анализе реакций с 3 или более частицами (например, $(e, 2e)$ (γ, ne) процессы). В качестве примера, в (1.59) представлено выражение для триполярной гармоники второго ранга в виде комбинации тензорных произведений двух векторов, выбранных из 3 векторов $\mathbf{n}_i$. В разделе 1.6.2 получена удобная параметризация мультиполей состояния поляризованной мишени P_{rm} в виде комбинаций тензорных произведений векторов декартового базиса системы K, связанной с процессом приготовления поляризованной мишени. Эти результаты использованы в разделе 3.1 для анализа электрического дипольного излучения произвольно поляризованного атома с детектированием поляризации фотона. Эти 3 примера, приведенные в разделе 1.6 демонстрируют эффективность использования инвариантных представлений МКВ для анализа комплекса физических проблем.

1.2 Инвариантное представление МКВ в терминах векторов сферического базиса

Для начала рассмотрим в качестве примера простейший случай МКВ $R^j_{mm'}(\Omega)$ с $j = 1$, которые описывают преобразование векторных операторов при пространственных вращениях. Известно, что произвольный вектор $\mathbf{x}$ может быть разложен по векторам сферического базиса следующим образом:

$$\mathbf{x} = \sum_{\mu=0,\pm1} (-1)^\mu x_{-\mu} \mathbf{e}_\mu, \tag{1.6}$$

где $x_\mu = (\mathbf{x} \cdot \mathbf{e}_\mu)$ есть сферические компоненты $\mathbf{x}$ и в качестве векторов сферического базиса мы можем выбрать любые три вектора $\mathbf{e}_\mu$, удовлетворяющие условиям ортогональности $(\mathbf{e}_\mu \cdot \mathbf{e}_\nu) = (-1)^\mu \, \delta_{\mu,-\nu}$, где μ, $\nu = 0, \pm 1$, и $\delta_{\mu,-\nu}$ есть дельта-символ Кронекера. Соотношение (1.6) обладает явно инвариантной формой, поскольку оно справедливо в произвольной системе координат. Предположим, что $\mathbf{e}_\mu$ являются векторами сферического базиса системы K, умножим теперь (1.6) скалярно на базисные векторы $\mathbf{e}'_\nu$ системы K', в итоге получаем:

$$x'_\nu = \sum_{\mu,\nu=0,\pm1} (-1)^\mu x_{-\mu} (\mathbf{e}_\mu)_\nu, \tag{1.7}$$

где x'_ν и x_μ есть компоненты вектора $\mathbf{x}$ в системах K' и K, соответственно, и $(\mathbf{e}_\mu)_\nu$ – компоненты базисных векторов $\mathbf{e}_\mu$ системы K, указанные в системе K'. Сравнивая (1.7) с (1.1), получаем:

$$R^1_{\mu\nu}(\Omega) = (-1)^\mu (\mathbf{e}_{-\mu})_\nu = (\mathbf{e}^*_\mu)_\nu$$

Здесь индекс μ нумерует базисные векторы $\mathbf{e}$, а индекс ν – сферические компоненты вектора. Это соотношение может быть переписано также в виде:

$$
\begin{aligned}
R^1_{-1\nu}(\Omega) - R^1_{1\nu}(\Omega) &= \sqrt{2}\,(\mathbf{e}_x)_\nu, \\
R^1_{-1\nu}(\Omega) + R^1_{1\nu}(\Omega) &= i\,\sqrt{2}\,(\mathbf{e}_y)_\nu, \\
R^1_{0\nu}(\Omega) &= (\mathbf{e}_z)_\nu,
\end{aligned}
\tag{1.8}
$$

где $\mathbf{e}_{x,y,z}$ – единичные векторы декартового базиса системы K. Таким образом, приведенные выше соотношения для $R^1_{\mu\nu}(\Omega)$ имеют инвариантную векторную структуру, полностью аналогичную структуре хорошо известной декартовой матрице a_{ik}, описывающей преобразование K в K' в терминах направляющих косинусов.

Для построения инвариантного выражения для МКВ при произвольном целом ранге j замечаем, что любой тензор, составленный из векторов, фиксированных в системе K и равный $R^j_{m'm}(\Omega)$ в некоторой системе координат $\bar{K}$ совпадает с $R^j_{m'm}(\Omega)$ и в любой другой системе. В частности, если некоторый тензор $\bar{R}^j_{m'm}(0)$ равен $R^j_{m'm}(0)$ при $\bar{K} = K$, то равенство

$$
\bar{R}^j_{m'm}(\Omega) = R^j_{m'm}(\Omega)
$$

справедливо при произвольной ориентации лабораторной системы координат. Это утверждение следует из общих соображений. Допустим, тензор $\bar{R}^j_{m'm}(\Omega)$ совпадает с $R^j_{m'm}(0)$ при $\bar{K} = K$, тогда

$$
\sum_{m'} T_{jm'} R^j_{m'm}(0) = \sum_{m'} T_{jm'} \bar{R}^j_{m'm}(0). \tag{1.9}
$$

Действуя на обе части этого равенства оператором конечных вращений $\hat{\mathcal{R}}(\Omega)$ и принимая во внимание, что $\hat{\mathcal{R}}(\Omega)$ не действует на $T_{jm'}$, поскольку это компоненты тензора, указанные в фиксированной системе K, получаем

$$
\sum_{m'} T_{jm'} \hat{\mathcal{R}}(\Omega) R^j_{m'm}(0) = \sum_{m'} T_{jm'} \hat{\mathcal{R}}(\Omega) \bar{R}^j_{m'm}(0), \tag{1.10}
$$

и, следовательно $\bar{R}^j_{m'm}(\Omega) = R^j_{m'm}(\Omega)$. Таким образом, задача сводится к отысканию инвариантного определения тензора, равного $R^j_{m'm}(0)$ при $\bar{K} = K$.

Сначала отметим, что в соответствии с выражением (1.1), МКВ в случае нулевого вращения (т.е., когда $K' = K$) имеют вид:

$$
R^j_{m'm}(0) = \delta_{m',m}. \tag{1.11}
$$

Для построения тензора, удовлетворяющего соотношению (1.11), мы будем использовать специальное обозначение (см. Приложение А) для тензорного произведения j штук одинаковых векторов $\mathbf{a}$

$$
\{\mathbf{a}\}_{jm} = \{\cdots\{\cdots\{\mathbf{a} \otimes \mathbf{a}\}_2 \otimes \cdots \mathbf{a}\}_{j-1} \otimes \mathbf{a}\}_{jm}. \tag{1.12}
$$

Всюду в тексте используются стандартные обозначения теории углового момента [4]. Известно, см. [57], что тензор $\{\mathbf{a}\}_{jm}$ не зависит от схемы связи векторов в правой части (1.12). Отметим, что сферическая гармоника $Y_{jm}(\mathbf{r}/r)$ может быть представлена в виде произведения j действительных векторов $\mathbf{r}/r$ [4]:

$$Y_{jm}(\mathbf{r}/r) = \sqrt{\frac{(2j+1)!!}{4\pi j!}}\frac{1}{r^j}\{\mathbf{r}\}_{jm}. \tag{1.13}$$

В системе координат с осью Z, направленной вдоль вектора $\mathbf{r}$, это соотношение сводится к равенству

$$Y_{jm}(0,0) = \delta_{m,0}\sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}}. \tag{1.14}$$

Теперь мы отметим, что в системе K тензорное произведение (1.12), составленное из векторов сферического базиса, имеет вид

$$\{\mathbf{e}_{\pm 1}\}_{kq} = (-1)^k \delta_{k,\mp q}, \tag{1.15}$$

где $\mathbf{e}_{\pm 1} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{b} \pm i\mathbf{c})$ есть векторы сферического базиса; $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ – векторы декартового базиса, направленные вдоль осей Z, X, Y системы K, соответственно. Соотношение (1.15) может быть получено прямым вычислением, принимая во внимание что $C^{a+b\,a+b}_{aa\,bb} = 1$ и

$$(\mathbf{e}_0)_\mu = \delta_{\mu,0}, \quad (\mathbf{e}_\nu)_\mu = -\delta_{\mu,-\nu}, \qquad \nu = \pm 1, \;\; \mu = 0, \pm 1, \tag{1.16}$$

для сферических компонент векторов $\mathbf{e}_{\pm 1}$ и $\mathbf{e}_0 \equiv \mathbf{a}$.

Прямыми вычислениями можно проверить, что тензор $R^j_{km}(\Omega)$, определенный равенством

$$R^j_{\pm km}(\Omega) = A_{jk}\{\{\mathbf{e}_{\mp 1}\}_k \otimes \{\mathbf{e}_0\}_{j-k}\}_{jm}, \qquad k \geq 0 \tag{1.17}$$

совпадает с МКВ после надлежащего выбора нормировочного множителя A_{jk}. Действительно, из (1.13), (1.14), (1.15) ясно видно, что в системе K $R^j_{\pm k\,m}(\Omega = 0)$ имеет вид:

$$R^j_{\pm k\,m}(0) = (-1)^k C^{jk}_{kk\;j-k\,0}\sqrt{\frac{(j-k)!}{(2j-2k-1)!!}}A_{jk}\,\delta_{m,\pm k}. \tag{1.18}$$

Следовательно, $R^j_{\pm km}(\Omega)$ удовлетворяет условию (1.11) и поэтому совпадает с МКВ, в соответствии с вышеизложенными соображениями. Подставляя явное выражение для коэффициента Клебша-Гордана $C^{jk}_{kk\;j-k\,0}$ в (1.18), находим для A_{jk} следующее выражение:

$$A_{jk} = (-1)^k\sqrt{\frac{2^{k-j}(2j)!}{(j+k)!(j-k)!}}. \tag{1.19}$$

Равенство (1.17) есть простейшая форма представления МКВ в инвариантном виде, поскольку коэффициент A_{jk} не зависит от индекса тензорной проекции m, в отличие от представления МКВ в виде $U(\mathbf{n},\omega)$-функций [13]. Отметим также, что индекс k в (1.17) не является тензорным индексом по отношению к лабораторной системе координат K'. В этой системе k только нумерует базисные тензоры $R^j_{\pm km}$, аналогично индексу ν в случае сферических базисных векторов $\mathbf{e}_\nu$ системы K .

1.3 Дифференциальная форма МКВ

В этом разделе представлена инвариантная форма МКВ в виде результата действия специального дифференциального оператора на стандартную сферическую гармонику. Наше рассмотрение базируется на использовании инвариантных операторов понижения ранга сферических функций [57]. Для этих операторов справедливо следующее важное соотношение:

$$\{\hat{\mathcal{O}}_k^{l-}(r,\nabla)\otimes Y_l(\mathbf{r}/r)\}_{qm}=\delta_{q,l-k}Y_{l-k,m}(\mathbf{r}/r),\qquad k\le l \tag{1.20}$$

Явное выражение для $\hat{\mathcal{O}}_{k\mu}^{l-}(r,\nabla)$ приведены в приложении A, формула (A.6). Использование этого соотношения при $l=k\equiv j$ $(q=0)$ приводит в важному формальному равенству (пояснения см. ниже),

$$T'_{jm}=(-1)^j\sqrt{4\pi(2j+1)}\hat{\mathcal{O}}_{jm}^{j-}(r,\nabla)(T'_j\cdot Y_j(\mathbf{r}/r)), \tag{1.21}$$

где T'_j – произвольный тензор целого ранга j и $\mathbf{r}$ – произвольный вектор; мы рассматриваем это равенство в повернутой системе K'. Может показаться, что T'_{jm} в правой части (1.21) зависит от $\mathbf{r}$ из-за сферической гармоники $Y_{jk}(\mathbf{r}/r)$, однако эта зависимость уничтожается в результате действия операторов градиента, составляющих $\hat{\mathcal{O}}_{jm}^{l-}(r,\nabla)$ с $j=l$ следующим образом [57]:

$$\hat{\mathcal{O}}_{jm}^{j-}(r,\nabla)=\frac{(-1)^j}{\sqrt{(2j+1)j!\,(2j+1)!!}}\{\nabla\}_{jm}\,r^j. \tag{1.22}$$

Равенство (1.21) может быть проверено непосредственными вычислениями:

$$\hat{\mathcal{O}}_{jm}^{j-}(r,\nabla)(T'_j\cdot Y_j(\mathbf{r}/r))=\sum_{k=-j}^{j}(-1)^k\hat{\mathcal{O}}_{jm}^{j-}(r,\nabla)\,T'_{j-k}\,Y_{jk}(\mathbf{r}/r)$$

$$=\sum_{k,s,m_s}(-1)^kT'_{j\,-k}\,C_{jm\,jk}^{sm_s}\,\{\hat{\mathcal{O}}_j^{j-}(r,\nabla)\otimes Y_j(\mathbf{r}/r)\}_{sm_s}=(-1)^j\frac{1}{\sqrt{4\pi(2j+1)}}T'_{jm}.$$

Здесь первое равенство в цепочке следует непосредственно из определения скалярного произведения двух тензоров, T'_j и Y_j, второе – из свойств ортогональности коэффициентов Клебша-Гордана, и третье – из ур. (1.20).

Поскольку скалярное произведение не зависит от ориентации в пространстве системы координат, мы можем рассматривать скалярное произведение в правой части (1.21) как определенное в фиксированной системе координат K (вместо лабораторной системы K'), и, следовательно, мы можем произвести замену $T'_j\to T_j$ в правой части ур. (1.21). Разумеется, при этом сферическая гармоника $Y_j(\mathbf{r}/r)$ должна также вычисляться в системе K. Таким образом, мы приходим к соотношению:

$$T'_{jm}=\sum_{k=-j}^{j}T_{jk}(-1)^{j+k}\sqrt{4\pi(2j+1)}\hat{\mathcal{O}}_{jm}^{j-}(r,\nabla)Y_{j\,-k}(\mathbf{r}/r). \tag{1.23}$$

Сравнивая этот результат с ур. (1.1) и используя ур. (1.20), мы получаем «дифференциальное» представление для $R^j_{km}(\Omega)$:

$$R^j_{km}(\Omega) = \sqrt{\frac{4\pi}{j!(2j+1)!!}}\{\nabla\}_{jm}\, r^j\, Y^*_{j\,k}(\mathbf{r}/r). \tag{1.24}$$

Как видно из этого равенства, МКВ $R^j_{km}(\Omega)$ есть тензор в системе координат K' по отношению к индексу m, и комплексно сопряженный тензор в системе K по отношению к индексу k. Далее, принимая во внимание равенство [42],

$$\{\nabla\}_{jm}\, r^j\, Y^*_{j\,k}(\mathbf{r}/r) = \{\nabla\}^*_{jk}\, r^j\, Y_{j\,m}(\mathbf{r}/r),$$

мы получаем еще одно соотношение, аналогичное соотношению (1.24):

$$R^j_{km}(\Omega) = \sqrt{\frac{4\pi}{j!(2j+1)!!}}\{\nabla\}^*_{jk}\, r^j\, Y_{j\,m}(\mathbf{r}/r). \tag{1.25}$$

Здесь сферическая гармоника определена в лабораторной системе K', а тензорное произведение операторов градиента – в фиксированной системе K. Как видно из уравнений (1.24), (1.25), хотя индексы k и m имеют различный смысл, тем не менее существует явная симметрия между ними.

Эти соотношения также наглядно демонстрируют фундаментальные свойства МКВ, такие как унитарность, групповые свойства и т.п.. В качестве примера получим выражение для $R^j_{m'm}(\Omega)$, где $\Omega = \Omega' \cdot \Omega''$ есть произведение поворотов $K \to K' \to K''$, описываемых параметрами Ω', Ω''. Замена сферической функции $Y^*_{jm'}(\mathbf{r}/r)$ в (1.24), которая определена в системе K, выражением $\sum_{m''} R^j_{m'm''}(\Omega')Y^*_{jm''}(\mathbf{r}/r)$, где $Y_{jm''}$ определена в системе K', приводит к равенству

$$R^j_{m'm}(\Omega) = (-1)^j\sqrt{4\pi(2j+1)}\sum_{m''} R^j_{m'm''}(\Omega')\hat{\mathcal{O}}^{j-}_{jm}(r,\nabla)Y^*_{jm''}(\mathbf{r}/r).$$

Принимая во внимание ур. (1.24), явно проверяем хорошо известное групповое тождество,

$$R^j_{m'm}(\Omega) = \sum_{m''} R^j_{m'm''}(\Omega')R^j_{m''m}(\Omega'').$$

1.4 Представление МКВ в терминах векторов декартового базиса

В этом разделе показано, что результат действия операторов градиента на сферическую гармонику $Y^*_{j\,k}(\mathbf{r}/r)$ в (1.24) может быть представлен в терминах тензорных конструкций, зависящих от единичных векторов $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, направленных вдоль осей Z, X системы K, соответственно. Таким образом, мы получим явное выражение для МКВ в терминах векторов декартового базиса фиксированной системы K. Ниже используются два известных факта теории сферических функций:

(а) Сферическая гармоника $Y_{j\,-k}(\mathbf{r}/r) = (-1)^k Y^*_{jk}(\mathbf{r}/r)$ может быть записана в стандартном виде [4]

$$Y_{j\,-k}(\mathbf{r}/r) = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}\frac{(j-k)!}{(j+k)!}}\,(\sin\theta\exp(-i\phi))^k\,P_j^{(k)}(\cos\theta), \quad k>0, \tag{1.26}$$

где θ есть угол между векторами $\mathbf{r}$ и $\mathbf{a}$, $\cos\theta = (\mathbf{r}\cdot\mathbf{a})/r$, и ϕ есть угол между осью X и проекцией вектора $\mathbf{r}$ на XY-плоскость системы K,

$$\cos\phi = \frac{(\mathbf{r}\cdot\mathbf{b})}{r\sin\theta}, \;\; \sin\phi = \frac{(\mathbf{r}\cdot\mathbf{c})}{r\sin\theta}.$$

Многочлен $P_j^{(k)}(x) = d^k P_j(x)/dx^k$ есть k-я производная многочлена Лежандра $P_j(x)$.

(б) Следующее полезное равенство,

$$\cos k\phi = \frac{k}{2}\sum_{s=0}^{[k/2]}(-1)^s\,\frac{(k-s-1)!}{s!(k-2s)!}\,(2\cos\phi)^{k-2s}, \tag{1.27}$$

следует непосредственно из факта, что $\cos k\phi = T_k(\cos\phi)$ есть многочлен Чебышева первого рода. Соотношение, аналогичное (1.27) для $\sin k\phi$ может быть получено дифференцированием (1.27) по ϕ.

Принимая по внимание равенства (1.26) и (1.27), можно переписать $r^j\,Y_{jk}(\mathbf{r}/r)$ через скалярные произведения:

$$\begin{aligned} r^j\,Y_{j\,-k}(\mathbf{r}/r) = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}\frac{(j-k)!}{(j+k)!}}\,r^{j-k}\,P_j^{(k)}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}/r)\sum_{s=0}^{[k/2]}(-1)^s\,\frac{(k-s-1)!}{s!(k-2s)!} \\ \times\,[2(\mathbf{b}\cdot\mathbf{r})]^{k-2s-1}\big(r^2-(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})^2\big)^s\big(k(\mathbf{b}\cdot\mathbf{r}) - i(k-2s)(\mathbf{c}\cdot\mathbf{r})\big), \end{aligned} \tag{1.28}$$

здесь $k>0$. Отметим, что операторы градиента в (1.24) не действуют на члены в (1.28), содержащие скалярные произведения $\mathbf{r}$ на себя, вследствие соотношения:

$$\{\nabla\}_{lm}\,(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r})^k = 0, \quad k<l. \tag{1.29}$$

Таким образом, необходимо оставлять в (1.28) только такие члены в разложении $r^{j-k}\,P_j^{(k)}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}/r)$ по степеням $(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})$, которые не содержат ненулевых степеней $(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r})$. Это, в частности, относится к члену $\big((\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}) - (\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})^2\big)^s$. Поэтому следующие замены могут быть произведены в (1.28):

$$\big(r^2-(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})^2\big)^s \to (-1)^s(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})^{2s}, \tag{1.30}$$

$$r^{j-k}\,P_j^{(k)}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}/r) \to \frac{(2j-1)!!}{(j-k)!}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})^{j-k}. \tag{1.31}$$

Как будет отмечено ниже, более удобно рассматривать две симметричные комбинации $R^j_{km}(\Omega)$:

$$\begin{aligned} R^{j+}_{km}(\Omega) &= R^j_{-km}(\Omega) + (-1)^k R^j_{km}(\Omega) \\ R^{j-}_{km}(\Omega) &= -i\big(R^j_{-km}(\Omega) - (-1)^k R^j_{km}(\Omega)\big), \quad k>0. \end{aligned} \tag{1.32}$$

Интересно, что симметризованные матрицы конечных вращений естественным образом возникают в задаче об отделении коллективных угловых координат двух электронов в центральном поле [25, 28].

Подстановка соотношений (1.28), (1.30), (1.31) в ур. (1.24) дает для $R^{j+}_{km}(\Omega)$,

$$
\begin{aligned}
R^{j+}_{km}(\Omega) &= \sqrt{\frac{(2j-1)!!}{j!(j-k)!(j+k)!}} \sum_{s=0}^{[k/2]} \frac{k(k-s-1)!}{s!(k-2s)!} \\
&\times \{\nabla\}_{jm} (\mathbf{r}\cdot\mathbf{a})^{j-k+2s} [2(\mathbf{r}\cdot\mathbf{b})]^{k-2s}. \qquad (1.33)
\end{aligned}
$$

Правая часть этого равенства может быть вычислена в явном виде с использованием соотношения

$$
\{\nabla\}_{jm} (\mathbf{r}\cdot\mathbf{a})^{j-k+2s} (\mathbf{r}\cdot\mathbf{b})^{k-2s} = j!\, \{\{\mathbf{a}\}_{j-k+2s} \otimes \{\mathbf{b}\}_{k-2s}\}_{jm}, \qquad (1.34)
$$

которое непосредственно следует из правила Лейбница дифференцирования произведений и из простых равенств

$$
\begin{aligned}
\nabla (\mathbf{r}\cdot\mathbf{a})^n &= n\, \mathbf{a} (\mathbf{r}\cdot\mathbf{a})^{n-1}, \quad n > 0 \\
\{\nabla \otimes \mathbf{r}\}_{2m} &= 0. \qquad (1.35)
\end{aligned}
$$

Теперь $R^{j+}_{km}(\Omega)$ может быть окончательно представлено в виде

$$
R^{j+}_{km} = \sqrt{\frac{j!(2j-1)!!}{(j-k)!(j+k)!}} \sum_{s=0}^{[k/2]} 2^{k-2s} \frac{k(k-s-1)!}{s!(k-2s)!} \{\{\mathbf{a}\}_{j-k+2s} \otimes \{\mathbf{b}\}_{k-2s}\}_{jm}. \qquad (1.36)
$$

Выражение для $R^{j-}_{km}(\Omega)$ получается аналогично:

$$
\begin{aligned}
R^{j-}_{km} = \sqrt{\frac{j!(2j-1)!!}{(j-k)!(j+k)!}} \sum_{s=0}^{[(k-1)/2]} 2^{k-2s} \frac{(k-s-1)!}{s!(k-2s-1)!} \\
\times \{\mathbf{c} \otimes \{\{\mathbf{a}\}_{j-k+2s} \otimes \{\mathbf{b}\}_{k-2s-1}\}_{j-1}\}_{jm}. \qquad (1.37)
\end{aligned}
$$

Получим теперь, для полноты, соотношение (1.17) раздела 1.2 с помощью дифференциального метода. Для начала отметим, что член $\sin\theta\, \exp(-i\phi)$ в правой части (1.26) может быть записан как

$$
\sin\theta(\cos\theta - i\sin\theta) = \sqrt{2}\, \frac{(\mathbf{e}_{-1}\cdot\mathbf{r})}{r}, \qquad (1.38)
$$

где $\mathbf{e}_{-1}$ есть сферический единичный вектор системы K. Далее, заменяя $P^{(k)}_j(\cos\theta)$ в (1.26) в соответствии с (1.31), мы получаем еще одно дифференциальное представление МКВ в терминах сферических базисных векторов

$$
R^{j}_{km}(\Omega) = (-1)^k \sqrt{\frac{2^k(2j-1)!!}{j!(j+k)!(j-k)!}}\, \{\nabla\}_{jm} (\mathbf{e}_0\cdot\mathbf{r})^{j-k} (\mathbf{e}_-\cdot\mathbf{r})^k, \quad k > 0. \qquad (1.39)
$$

Это равенство явно демонстрирует независимость окончательных результатов от вспомогательного вектора $\mathbf{r}$ ввиду наличия вектора $\mathbf{r}$ в jой степени. Вычисляя далее действие операторов градиента с помощью соотношений (1.34) и (1.35), непосредственно приходим к равенству (1.17) раздела 1.2.

1.5 Разложение МКВ по базису биполярных гармоник

Предварительно необходимо сделать несколько замечаний, касающихся биполярных гармоник (БГ). Эти объекты определяются следующим равенством [4]:

$$Y_{jm}^{ll'}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = \{\mathrm{Y}_l(\mathbf{n}) \otimes \mathrm{Y}_{l'}(\mathbf{n}')\}_{jm}.$$

Как будет показано в разделе 2.1, в случае $l + l' > j$, БГ могут быть представлены в виде суперпозиции «минимальных» БГ $\mathcal{Y}_{jm}^{k}(\mathbf{n},\mathbf{n}')$, которые определяются соотношением:

$$\mathcal{Y}_{jm}^{k}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = \{\mathrm{Y}_{j-k}(\mathbf{n}) \otimes \mathrm{Y}_{k}(\mathbf{n}')\}_{jm}, \tag{1.40}$$

где $k = 0, \ldots, j$. Гармоники $\mathcal{Y}_{jm}^{k}$ обладают рядом важных свойств. Именно, коэффициент Клебша-Гордана, входящий в определение тензорного произведения в (1.40) может быть записан в замкнутом виде как произведение факториалов без всяких суммирований. Далее, в разделе 2.1 (формула (2.7) [57]) показано, что минимальные БГ образуют «линейно независимый» набор в пространстве тензоров фиксированного ранга j, т.е. не существует линейных соотношений вида

$$\sum_k C_{jk}(\cos\theta)\, \mathcal{Y}_{jm}^{k}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = 0,$$

где $C_{jk}(\cos\theta)$ есть некоторые скалярные коэффициенты, зависящие от скалярных произведений $(\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}') = \cos\theta$. Это означает, что «минимальные» БГ $\mathcal{Y}_{jm}^{k}(\mathbf{n},\mathbf{n}')$ являются простейшими неприводимыми тензорами ранга j, составленными из векторов $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}'$. Количество линейно независимых минимальных БГ ранга j очевидно равно $(j+1)$. Важно отметить, что минимальные БГ являются полярными тензорами для всех k, поскольку при пространственной инверсии (т.е. когда $\mathbf{n},\mathbf{n}' \to -\mathbf{n},-\mathbf{n}'$) они приобретают дополнительный фазовый множитель $(-1)^j$, который не зависит от k.

Теперь разложение МКВ по базису минимальных БГ может быть получено подстановкой ур. (1.13) для сферической гармоники в уравнения (1.36) и (1.37):

$$R_{km}^{j+}(\Omega) = \sum_{s=0}^{[k/2]} A_{ks}^{(0)}\, \mathcal{Y}_{jm}^{k-2s}(\mathbf{a},\mathbf{b}) \tag{1.41}$$

$$R_{km}^{j-}(\Omega) = \sum_{s=0}^{[(k-1)/2]} A_{ks}^{(1)}\, \{\mathbf{c} \otimes \mathcal{Y}_{j-1}^{k-2s-1}(\mathbf{a},\mathbf{b})\}_{jm}, \tag{1.42}$$

где коэффициенты $A_{ks}^{(\lambda)}$ имеют вид:

$$A_{ks}^{(\lambda)} = 4\pi \frac{(k(1-\lambda)+\lambda)\,(k-s-1)!}{2^{3s}\, s!} \times \sqrt{\frac{2^{3k-\lambda}\, j!(2j-1)!!(j-k+2s)!}{(j-k)!(j+k)!(2k-4s-2\lambda+1)!(2j-2k+4s+1)!!}}, \quad (1.43)$$

здесь $k > 0$.

Равенства (1.41) и (1.42) являются разложениями МКВ по базису минимальных биполярных гармоник, зависящих от ортогональных векторов $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$. Важно отметить, что число $2j+1$ различных БГ, входящих в разложение МКВ совпадает с полным числом функций $R^j_{m'm}(\Omega)$ с различными индексами m' при фиксированном m. Поскольку любой тензор T'_{jm} в лабораторной системе может быть представлен в виде суперпозиции элементов МКВ (см. (1.1)), то понятно, что T'_{jm} также может быть записан в виде комбинации минимальных БГ (см. (1.55) ниже). Отметим, что функции $R^{j+}_{km}(\Omega)$, $R^{j-}_{km}(\Omega)$, определенные равенствами (1.41) и (1.42) являются полярными тензорами. Важно, что существует принципиальная разница между двумя комбинациями $R^{j+}_{km}(\Omega)$ и $R^{j-}_{km}(\Omega)$. Именно, $R^{j+}_{km}(\Omega)$ является инвариантном относительно отражения оси Y фиксированной системы K, в то время как $R^{j-}_{km}(\Omega)$ изменяет знак.

Вообще говоря, возможно получить разложение МКВ по БГ, зависящим от любой пары векторов, фиксированных в системе K. Этот результат следует из простого соотношения для тензорного произведения, содержащего два различных вектора

$$\{c_1\,\mathbf{a}_1 + c_2\,\mathbf{a}_2\}_{jm} = \sum_{n=0}^{j} \binom{j}{n} c_1^{j-n}\, c_2^{n}\, \{\{\mathbf{a}_1\}_{j-n} \otimes \{\mathbf{a}_2\}_n\}_{jm}, \quad (1.44)$$

где $\binom{j}{n}$ – биномиальный коэффициент и $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ – произвольные векторы. Соотношение (1.44) может быть проверено с использованием (1.12) и того факта, что тензорное произведение есть линейная функция обоих сомножителей. Принимая во внимание (1.13), (1.44) может быть переписано в виде

$$|c_1\,\mathbf{a}_1 + c_2\,\mathbf{a}_2|^j\, Y_{jm}(\mathbf{v}) = \sum_{n=0}^{j} \sqrt{\frac{4\pi(2j+1)!}{(2n+1)!(2j-2n+1)!}} \times c_1^{j-n}\, c_2^{n}\, \mathcal{Y}^n_{jm}(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2), \quad (1.45)$$

где $\mathbf{v}$ – единичный вектор, направленный вдоль вектора $c_1\,\mathbf{a}_1 + c_2\,\mathbf{a}_2$. Таким образом мы попутно получили наиболее простым способом так называемую теорему сложения телесных гармоник [4, 29].

Ниже представлено наиболее простое и удобное инвариантное представление МКВ в виде суперпозиции БГ, зависящих от пары неколлинеарных единичных векторов $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}'$. Пусть вектор $\mathbf{n}$ направлен вдоль оси Z фиксированной системы K, и вектор $\mathbf{n}'$ лежит в той же плоскости, что и вектор **b**. Другими словами,

$$\mathbf{a} = \mathbf{n}, \quad \mathbf{b} = \frac{\mathbf{n}' - \mathbf{n}\cos\theta}{\sin\theta}, \quad \mathbf{c} = \frac{[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']}{\sin\theta}, \tag{1.46}$$

где θ – угол между векторами $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$. Разумеется, угол θ должен быть ненулевым, иначе базис (1.46) не существует.

Подставляем (1.44) в (1.41) и (1.42), имея в виду, что в нашем случае $c_1 = 1/\sin\theta$ и $c_2 = -\operatorname{ctg}\theta$. Производя далее суммирование по свободному индексу [2], получаем следующие равенства:

$$R^{j+}_{km}(\Omega) = \sum_{s=0}^{k} B^{(0)}_{ks}(\theta)\,\mathcal{Y}^{s}_{jm}(\mathbf{n},\mathbf{n}') \tag{1.47}$$

$$R^{j-}_{km}(\Omega) = \sum_{s=0}^{k-1} B^{(1)}_{ks}(\theta)\,\{[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']\otimes\mathcal{Y}^{s}_{j-1}(\mathbf{n},\mathbf{n}')\}_{jm}, \tag{1.48}$$

где коэффициенты $B^{(\lambda)}_{ks}(\theta)$ определены соотношениями

$$\begin{aligned} B^{(\lambda)}_{ks}(\theta) &= \frac{4\pi}{(\sin\theta)^k} C^{\frac{1}{2}-k}_{k-s-\lambda}(\cos\theta)\frac{2(k(1-\lambda)+\lambda)(k+s+\lambda-1)!}{(2k-1)!!} \\ &\times\sqrt{\frac{2^s(j-s-\lambda)!\,j!(2j-1)!!}{(2s+1)!(2j-2s-2\lambda+1)!!(j+k)!(j-k)!}}. \end{aligned} \tag{1.49}$$

Важно отметить, что многочлены Гегенбауэра $C^{\frac{1}{2}-k}_{k-s-\lambda}(\theta)$ в правой части (1.49) не зависят от ранга j МКВ. Отметим также, что половина коэффициентов B при $\theta = \pi/2$ совпадает с коэффициентами A (ср. (1.43)):

$$B^{(\lambda)}_{k\,k-2s-\lambda}(\pi/2) = A^{(\lambda)}_{ks},$$

а другие равны нулю:

$$B^{(\lambda)}_{k\,k-2s-\lambda+1}(\pi/2) = 0.$$

Таким образом, представления (1.41) и (1.42) являются частными случаями более общих выражений (1.47) и (1.48).

Из уравнений (1.47) и (1.48) следует, что функция $R^{j+}_{km}(\Omega)$ есть полярный тензор, в то время как функция $R^{j-}_{km}(\Omega)$ является аксиальным тензором (поскольку тензорное произведение в (1.48) содержит аксиальный вектор $[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']$). Этот последний результат контрастирует с ур. (1.42) для $R^{j-}_{km}(\Omega)$. Однако, здесь нет противоречия с правилом преобразования тензоров (1.1). Именно, тензорные компоненты в системе K одного и того же тензора T_j в правой части (1.1) могут быть как скалярами, так и псевдоскалярами, в зависимости от того, является ли единичный вектор **c** системы K полярным или аксиальным вектором.

В заключение отметим, что если мы определим «обобщенные» сферические гармоники $\tilde{\mathrm{Y}}_{jm}(\mathbf{e})$ комплексного единичного вектора $\mathbf{e}$ тензорным произведением в (1.13) с $\mathbf{r}/r \quad \to \quad \mathbf{e}$, то (1.17) может быть переписано (с использованием (1.19) и (1.40) в виде:

$$R^j_{\pm km}(\Omega) = c(k,j)\{\tilde{\mathrm{Y}}_k(\mathbf{e}_{\mp 1}) \otimes \mathrm{Y}_{j-k}(\mathbf{e}_0)\}_{jm} = c(k,j)\tilde{\mathcal{Y}}^{j-k}_{jm}(\mathbf{e}_{\mp 1}, \mathbf{e}_0), \tag{1.50}$$

где числовые коэффициенты $c(k,j)$ равны

$$c(k,j) = (-1)^k 4\pi \sqrt{\frac{(2j)!k!2^{k-j}}{(j+k)!(2k+1)!!(2j-2k+1)!!}}.$$

При $k = 0$ это равенство непосредственно сводится к (1.2). Таким образом, МКВ можно рассматривать как «обобщенные» минимальные БГ сферических базисных векторов «старой» системы K. Отметим, что выражения, аналогичные (1.50) приведены также в книге [26], в которой, однако, не было обращено внимания на инвариантную тензорную структуру этих равенств.

Необходимо сделать также некоторые замечания о выборе параметров поворота, соответствующих инвариантным представлениям МКВ. В отличие от случая обычных D- или U-функций, для которых поворот описывается тремя действительными параметрами (например, углами Эйлера или полярными углами оси поворота $\mathbf{n}$ и углом поворота ω), мы описываем поворот направлениями двух единичных векторов $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}'$. Биполярные гармоники в (1.47) и (1.48) зависят от сферических углов векторов $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}'$, указанных в лабораторной системе K'. В фиксированной системе координат K эти векторы имеют координаты $\mathbf{n} = (0,0)$, $\mathbf{n}' = (\theta, 0)$, где θ — угол между $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}'$. (используется обозначение $\mathbf{a} = (\theta_{\mathbf{a}}, \phi_{\mathbf{a}})$ для угловых координат единичного вектора $\mathbf{a}$, где $\theta_{\mathbf{a}}$ — угол между $\mathbf{a}$ и осью Z, и $\phi_{\mathbf{a}}$ — угол между проекцией $\mathbf{a}$ на плоскость XY и осью X системы координат). Полярные углы векторов $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}'$ в системе K' могут быть связаны со стандартными углами Эйлера α, β, γ следующими соотношениями

$$\begin{aligned}
\theta_{\mathbf{n}} &= \beta, \\
\phi_{\mathbf{n}} &= \pi - \gamma, \\
\cos\theta_{\mathbf{n}'} &= \cos\theta\,\cos\beta + \sin\theta\,\sin\beta\,\cos\alpha, \\
\cot(\phi_{\mathbf{n}'} + \gamma) &= -\cot\alpha\,\cos\beta + \frac{\operatorname{ctg}\theta\,\sin\beta}{\sin\alpha}.
\end{aligned} \tag{1.51}$$

Как видно из этих равенств, только три параметра из пяти (4 сферических угла + 1 один «свободный параметр» θ) независимы.

1.6 Некоторые применения

В зависимости от конкретной ситуации, могут использоваться различные инвариантные представления МКВ (ср. (1.17), (1.24), (1.25), (1.33), (1.36), (1.37), (1.39), (1.47), и (1.48)). Поэтому, хотя уравнения (1.47) и (1.48) являются наиболее общими, в некоторых ситуациях использование дифференциальных представлений (1.24) и (1.25) МКВ может оказаться проще. Например, если известно явное выражение для скалярного произведения тензора T_{jm} и сферической гармоники в терминах скалярных произведений векторов, то соотношения (1.23) и (1.24) позволяют восстановить явный вид T_{jm} в терминах тензорных произведений векторов. Прежде чем описать общую процедуру использования инвариантных представлений МКВ для решения конкретных задач, приведем пример использования более простых соотношений (1.23) и (1.24).

Рассмотрим тензор поляризации фотона $T_{pm} = \{\mathbf{e} \otimes \mathbf{e}^*\}_{pm}$, где $\mathbf{e}$ – единичный (комплексный) вектор поляризации фотона (см, например, [27]). Инвариантный вид T_{pm} известен только для $p = 0, 1$ и определяется равенствами

$$T_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}},\ T_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\xi\,\mathbf{k},$$

где ξ – степень циркулярной поляризации фотона,

$$\xi = i\,\mathbf{k} \cdot [\mathbf{e} \times \mathbf{e}^*],$$

и $\mathbf{k}$ — единичный вектор, направленный вдоль импульса фотона. Следующие явные выражения для T_{2m} широко используются в конкретных задачах:

$$T_{20} = -\frac{1}{\sqrt{6}}, \quad T_{2\pm 1} = 0, \quad T_{2\pm 2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_3 \pm \xi_1),$$

где $\xi_{1,3}$ – стандартные параметры Стокса [3]. Эти соотношения справедливы, конечно, только в системе координат с осью Z, направленной вдоль вектора $\mathbf{k}$.

Для вывода инвариантной формы для T_{2m} замечаем, что в соответствии с (1.13), (1.22), и (1.23), тензор T_{2m} может быть записан в следующем виде:

$$T_{2m} = \frac{1}{2}\{\nabla\}_{2m}\left(\{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}\}_2 \cdot \{\mathbf{e} \otimes \mathbf{e}^*\}_2\right) = \frac{1}{2}\{\nabla\}_{2m}|\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}|^2. \tag{1.52}$$

Здесь член $|\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}|^2$ может быть вычислен в явном виде с использованием вспомогательного соотношения (см. (3.11) ниже)

$$2\,\mathrm{Re}(\mathbf{e} \cdot \mathbf{r})(\mathbf{e}^* \cdot \mathbf{r}') = 2l(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon})(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{r}') + (l-1)([\mathbf{r} \times \mathbf{k}] \cdot [\mathbf{k} \times \mathbf{r}']), \tag{1.53}$$

где $\boldsymbol{\epsilon}$ – единичный вектор, направленный вдоль главной оси эллипса фотонной поляризации, и l – степень линейной поляризации, $l = \mathbf{e} \cdot \mathbf{e}$. Используя это тождество и вычисляя действие операторов градиента в (1.52), получаем инвариантное представление для T_{2m}:

$$T_{2m} = l\{\boldsymbol{\epsilon} \otimes \boldsymbol{\epsilon}\}_{2m} + \frac{l-1}{2}\{\mathbf{k} \otimes \mathbf{k}\}_{2m}, \tag{1.54}$$

которое справедливо в произвольной системе координат. Ур. (1.54) справедливо также и для частично поляризованного фотонного пучка со степенью частичной поляризации $\mathcal{P} = 1 - l^2 - \xi^2$.

Таким образом, полученные результаты эквивалентны описанию поляризации фотона с помощью матрицы плотности, однако, они обладают явно инвариантной структурой и поэтому могут быть более удобны для анализа эффектов поляризации фотонов в угловых распределениях.

Регулярный метод применения инвариантных представлений МКВ к конкретным проблемам состоит в следующем: подставляя (1.47) и (1.48) в (1.1), получаем «модифицированное» правило преобразования для неприводимых тензоров:

$$T'_{jm} = \sum_{s=0}^{j} T^{(0)}_{j,s} \mathcal{Y}^s_{jm}(\mathbf{n},\mathbf{n}') + \sum_{s=0}^{j-1} T^{(1)}_{j,s} \{[\mathbf{n}\times\mathbf{n}'] \otimes \mathcal{Y}^s_{j-1}(\mathbf{n},\mathbf{n}')\}_{jm}, \tag{1.55}$$

здесь скалярные коэффициенты $T^{(\lambda)}_{j,s}$, $\lambda = 0, 1$ определены равенствами:

$$\begin{aligned} T^{(0)}_{j,s} &= \sum_{k=s}^{j} B^{(0)}_{k,s}(\theta)(T_{j-k} + (-1)^k T_{jk})/2, \\ T^{(1)}_{j,s} &= i \sum_{k=s+1}^{j} B^{(1)}_{k,s}(\theta)(T_{j-k} - (-1)^k T_{jk})/2, \end{aligned} \tag{1.56}$$

здесь $B^{(0)}_{0\,0}(\theta) = 4\pi/\sqrt{2j+1}$, остальные $B^{(\lambda)}_{m,n}$-коэффициенты определены соотношениями (1.49), и $T_{j\,k}$ — компоненты тензора T_j в подходящей системе координат K, наиболее удобной для конкретной задачи. Все применения инвариантных представлений МКВ базируются на использовании (1.55), что иллюстрируется несколькими примерами ниже.

1.6.1 Упрощение триполярных и мультиполярных гармоник

В этом разделе соотношения (1.55), (1.56) для вычисления триполярных гармоник, возникающих, например при анализе угловых распределений в $(e, 2e)$ процессах с излучением или поглощением фотона, в Комптон-эффекте на связанном электроне и т.п.. Триполярные гармоники являются тензорным произведением трех сферических гармоник [4].

$$Y^{l_1,(l_2 l_3)l}_{jm}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3) = \{\mathrm{Y}_{l_1}(\mathbf{n}_1) \otimes \{\mathrm{Y}_{l_2}(\mathbf{n}_2) \otimes \mathrm{Y}_{l_3}(\mathbf{n}_3)\}_l\}_{jm}. \tag{1.57}$$

В системе координат с осью Z, направленной вдоль $\mathbf{n}_1$ и осью Y, направленной вдоль $[\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2]$, имеем

$$Y^{l_1,(l_2 l_3)l}_{jm}(00, \theta_2 0,\, \theta_3\phi_3) = \sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}}\, C^{jm}_{l_1 0\, lm} \times \sum_{m_2\, m_3} C^{lm}_{l_2 m_2\, l_3 m_3} Y_{l_2 m_2}(\theta_2\, 0)\, Y_{l_3 m_3}(\theta_3\, \phi_3), \tag{1.58}$$

где $\theta_{2,3}$ – углы между вектором $\mathbf{n}_1$ и векторами $\mathbf{n}_{2,3}$, соответственно, и ϕ_3 – угол между плоскостями, определенными векторами $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$ и $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_3$.

Использование равенств (1.55), (1.56) приводит к представлению триполярной гармоники в (1.57) в виде комбинаций более простых конструкций из (1.58) и тензоров ранга j, составленных из минимального количества векторов $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_2$, $\mathbf{n}_3$. Для простоты, ниже представлены результаты для наиболее важного для практических применений случая триполярных гармоник ранга 2:

$$\begin{aligned} Y_{2m}^{l_1,(l_2l_3)l}(\mathbf{n}_1,\mathbf{n}_2,\mathbf{n}_3) = a_1\left\{\mathbf{n_1}\otimes\mathbf{n_1}\right\}_{2m} + a_2\left\{\mathbf{n_2}\otimes\mathbf{n_2}\right\}_{2m} + a_3\left\{\mathbf{n_1}\otimes\mathbf{n_2}\right\}_{2m} \\ + b_1\left\{[\mathbf{n_1}\times\mathbf{n_2}]\otimes\mathbf{n}_1\right\}_{2m} + b_2\left\{[\mathbf{n_1}\times\mathbf{n_2}]\otimes\mathbf{n}_2\right\}_{2m} \end{aligned} \qquad (1.59)$$

где коэффициенты a_i, b_i определяются равенствами

$$\begin{aligned} a_1 &= \sqrt{\frac{3}{2}}Y_{20} + \frac{\cos\theta_2}{\sin\theta_2}(Y_{21} + (-1)^{\lambda_p}Y_{21}^*) + \frac{\cos^2\theta_2+1}{2\sin^2\theta_2}(Y_{22} + (-1)^{\lambda_p}Y_{22}^*) \\ a_2 &= \frac{1}{\sin^2\theta_2}(Y_{22} + (-1)^{\lambda_p}Y_{22}^*) \\ a_3 &= -\frac{1}{\sin\theta_2}(Y_{21} + (-1)^{\lambda_p}Y_{21}^*) - \frac{2\cos\theta_2}{\sin^2\theta_2}(Y_{22} + (-1)^{\lambda_p}Y_{22}^*) \\ b_1 &= i\Big(\frac{1}{\sin\theta_2}(Y_{21} - (-1)^{\lambda_p}Y_{21}^*) + \frac{\cos\theta_2}{\sin^2\theta_2}(Y_{22} - (-1)^{\lambda_p}Y_{22}^*)\Big) \\ b_2 &= -i\frac{1}{\sin^2\theta_2}(Y_{22} - (-1)^{\lambda_p}Y_{22}^*). \end{aligned} \qquad (1.60)$$

В (1.60) использовано обозначение $Y_{2m} = Y_{2m}^{l_1,(l_2l_3)l}(00,\, \theta_{12}\, 0,\, \theta_{13}\, \phi_3)$. Индекс $\lambda_p = l_1 + l_2 + l_3$ определяет четность триполярной гармоники: при четных λ_p гармоника есть полярный тензор, а при нечетных λ_p — аксиальный тензор (псевдотензор). Из (1.60) следует, что при четных λ_p коэффициенты a_i (b_i) являются скалярами (псевдоскалярами), а при нечетных λ_p — наоборот. Коэффициенты a, b удовлетворяют важному соотношению симметрии:

$$a_1, b_1 \rightleftharpoons a_2, b_2 \quad \text{для} \quad \mathbf{n}_1 \rightleftharpoons \mathbf{n}_2,$$

что подразумевают замену в (1.60): $Y_{2m} \to Y_{2m}^{l_1,(l_2l_3)l}(\theta_2 0, 00, \theta_{23}\phi_3')$, где ϕ_3' — угол между плоскостями $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_2$ и $\mathbf{n}_2$, $\mathbf{n}_3$; θ_{23} – угол между векторами $\mathbf{n}_2$ и $\mathbf{n}_3$.

В заключение отметим, что результаты (1.59), (1.60) могут быть легко обобщены на случай произвольной N-полярной гармоники ранга 2, зависящей от N векторов $\mathbf{n}_i$. При этом параметр λ_p должен быть заменен на $\lambda_p = \sum_n l_n$, где l_n — ранги сферических гармоник, входящих в мультиполярную гармонику, и вместо Y_{2k} надо подставлять компоненты мультиполярной гармоники в фиксированной системе координат. В случае $N > 3$ любые два вектора из набора $\mathbf{n}_i$ с $i = 1, \ldots, N$ могут быть взяты в качестве векторов $\mathbf{n}_{1,2}$ в (1.59); коэффициенты a_i и b_j в (1.59) при этом будут зависеть от относительных углов всех векторов задачи. Таким образом, тензорная структура, приведенная в (1.59) не зависит от количества векторов.

1.6.2 Инвариантная форма поляризационных моментов

Соотношения (1.41), (1.42) для МКВ и правило преобразования (1.55) могут быть полезны даже в случае, когда неизвестны явные выражения для компоненты тензора. В этом разделе, в качестве примера, рассмотрены неприводимые компоненты P_{rm}, матрицы плотности смешанного поляризационного состояния квантовой системы [27, 38] матричные элементы которой определяются равенством:

$$\langle JM\,|\rho|\,JM'\rangle = \sum_{rm}(-1)^{J-M}C^{rm}_{JM'\,J-M}P_{rm}, \tag{1.61}$$

где ρ — оператор матрицы плотности. Мы предполагаем, для простоты, что состояния с моментами $J' \neq J$ не дают вклада в статистическую смесь. В этом случае мы имеем

$$P^{*}_{rm} = (-1)^{m}P_{r-m},$$

и выполняется следующее важное соотношение:

$$P_{rm} = 2^{r}\sqrt{\frac{(2r+1)!!(2J-r)!}{r!(2J+r+1)!}}\langle\{\mathbf{J}\}_{rm}\rangle, \tag{1.62}$$

где $\langle\{\mathbf{J}\}_{rm}\rangle$ обозначает среднее значение тензорного произведения операторов углового момента $\mathbf{J}$ [27]. Удобство тензоров P_{rm} состоит в возможности с их помощью явного учета свойств симметрии квантовой системы (например, для сферически симметричной системы только P_{00} отличны от нуля, и т.п.). Тензоры P_{rm}, называемые также «поляризационными моментами» [3], связаны со стандартными мультиполями поляризационного состояния ρ_{rm} соотношением $P_{rm} = \rho^{*}_{rm}$.

Поскольку поляризационные моменты являются тензорами, для них применимо правило преобразования (1.55). Ниже представлены явные выражения для поляризационных моментов рангов $r = 0, 1, 2$. Применение равенств (1.41), (1.42) в (1.55) для P_{rm} дает:

$$P_0 = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \tag{1.63}$$

$$\mathbf{P}_1 = \mathcal{P}_{10}\mathbf{a} + \mathcal{P}_{11}\mathbf{b} + \mathcal{P}'_{11}\mathbf{c} \tag{1.64}$$

$$\begin{aligned} P_2 = {} & \mathcal{P}_{20}\{\mathbf{a}\otimes\mathbf{a}\}_2 + \mathcal{P}_{22}\{\mathbf{b}\otimes\mathbf{b}\}_2 + \mathcal{P}_{21}\{\mathbf{a}\otimes\mathbf{b}\}_2 \\ & + \mathcal{P}'_{21}\{\mathbf{a}\otimes\mathbf{c}\}_2 + \mathcal{P}'_{22}\{\mathbf{b}\otimes\mathbf{c}\}_2, \end{aligned} \tag{1.65}$$

где $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ — единичные векторы декартового базиса, направленные вдоль осей Z, X, Y системы K, которая может быть связана со свойствами симметрии процесса возбуждения, использованного для приготовления мишени. Параметры $\mathcal{P}_{rm}$ являются комбинацией компонент тензора $\bar{P}_{rm}$ в системе K. Для краткости, опущены индексы компонент m в тензорной записи P_{rm}.

$(2r+1)$ различных угловых комбинаций в (1.64) и (1.65) равно числу независимых параметров $\mathcal{P}_{rm}$. Эти параметры имеют вид:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{P}_{10} &= \bar{P}_{10}, \quad \mathcal{P}_{11} = -\sqrt{2}\,\mathrm{Re}\,\bar{P}_{11}, \quad \mathcal{P}'_{11} = -\sqrt{2}\,\mathrm{Im}\,\bar{P}_{11} \\
\mathcal{P}_{20} &= \sqrt{\frac{3}{2}}\bar{P}_{20} + \mathrm{Re}\,\bar{P}_{22}, \quad \mathcal{P}_{21} = -2\,\mathrm{Re}\,\bar{P}_{21}, \quad \mathcal{P}_{22} = 2\,\mathrm{Re}\,\bar{P}_{22} \\
\mathcal{P}'_{21} &= -2\,\mathrm{Im}\,\bar{P}_{21}, \quad \mathcal{P}'_{22} = 2\,\mathrm{Im}\,\bar{P}_{22}.
\end{aligned} \tag{1.66}
$$

В соответствии с (1.62), соотношение (1.66) можно переписать в виде

$$
\begin{aligned}
\mathcal{P}_{10} &= c_1\langle \mathbf{J_a}\rangle, \;\; \mathcal{P}_{11} = c_1\langle \mathbf{J_b}\rangle, \;\; \mathcal{P}'_{11} = c_1\langle \mathbf{J_c}\rangle, \\
\mathcal{P}_{20} &= c_2(\langle \mathbf{J_a^2}\rangle - \langle \mathbf{J_c^2}\rangle), \;\; \mathcal{P}_{22} = c_2(\langle \mathbf{J_b^2}\rangle - \langle \mathbf{J_c^2}\rangle), \\
\mathcal{P}_{21} &= \frac{1}{2}c_2(\langle \mathbf{J_a J_b}\rangle + \langle \mathbf{J_b J_a}\rangle), \;\; \mathcal{P}'_{21} = \frac{1}{2}c_2(\langle \mathbf{J_a J_c}\rangle + \langle \mathbf{J_c J_a}\rangle), \\
\mathcal{P}'_{22} &= \frac{1}{2}c_2(\langle \mathbf{J_b J_c}\rangle + \langle \mathbf{J_c J_b}\rangle),
\end{aligned} \tag{1.67}
$$

где коэффициенты $c_{1,2}$ равны

$$
c_1 = \sqrt{\frac{3}{J(J+1)(2J+1)}}, \quad c_2 = \sqrt{\frac{30}{J(J+1)(2J-1)(2J+1)(2J+3)}}.
$$

Из этих равенств следует, что параметры $\mathcal{P}_{10}$, $\mathcal{P}_{11}$, $\mathcal{P}'_{11}$ пропорциональны проекциям «среднего углового момента» $\langle \mathbf{J}\rangle$ на векторы декартового базиса системы K. Далее, существует явная связь между параметрами $\mathcal{P}_{rm}$ и свойствами симметрии поляризационного состояния. Например, если поляризационное состояние обладает аксиальной симметрией, то направляя вектор $\mathbf{a}$ (или $\mathbf{b}$) вдоль оси симметрии, мы получаем, что только тензоры, содержащие коэффициенты $\mathcal{P}_{r0}$ (или $\mathcal{P}_{rr}$) дают вклад в P_{rm}. В случае право-левой (зеркальной) симметрии поляризационного состояния (т.е. по отношению к отражению $\mathbf{c} \rightleftharpoons -\mathbf{c}$), выпадают все тензоры с коэффициентами $\mathcal{P}'$.

Глава 2

Тензорная структура мультиполярных гармоник

В этой главе развит метод, позволяющий получать разложения мультиполярных гармоник по «минимальным» гармоникам, ранг которых совпадает с количеством векторов, образующих «минимальную» гармонику. В максимально простом виде приведены коэффициенты таких разложений для биполярных гармоник. Изложен алгоритм, позволяющий переписывать скалярные произведения тензоров через скалярные произведения векторов.

2.1 Формулы приведения биполярных гармоник

Наиболее общим методом анализа угловых распределений в атомных и ядерных процессах является квантовая теория углового момента и формализм неприводимых тензорных операторов. В этом подходе зависимость кинематических и динамических факторов от единичных векторов $\mathbf{n}_i$,определяющих направления моментов, спинов и т.п., в каждом случае включена в тензорные произведения сферических функций $Y_{lm}(\mathbf{n}_i)$ от угловых координат $\mathbf{n}_i$.

Простейший пример такого произведения есть так называемые биполярные гармоники [4]

$$Y_{LM}^{ll'}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = \Big\{Y_l(\mathbf{n}) \otimes Y_{l'}(\mathbf{n}')\Big\}_{LM} = \sum_{m,m'} C_{lml'm'}^{LM} Y_{lm}(\mathbf{n}) Y_{l'm'}(\mathbf{n}'), \tag{2.1}$$

где $C_{lm\,l'm'}^{LM}$ коэффициент Клебша - Гордана, повсюду в тексте использованы стандартные обозначения техники углового момента [4].

В задачах с тремя различными векторами возникают триполярные гармоники и т.п.. Так, наиболее общее выражение для дифференциального сечения фотоионизации [49] включает триполярные гармоники ранга $L \leq 2$, зависящие от направления момента электрона $\mathbf{p}$ и от направлений поляризации $\mathbf{s}$ и $\mathbf{a}$ фотоэлектрона и атома - мишени

$$Y_{LM}^{(ll')j',\,j}(\mathbf{s},\mathbf{p},\mathbf{a}) = \Big\{\{Y_l(\mathbf{s})\otimes Y_{l'}(\mathbf{p})\}_{j'}\otimes Y_j(\mathbf{a})\Big\}_{LM}$$
$$= \sum_{m,m',\mu,\mu'} C_{lml'm'}^{j'\mu'} C_{j'\mu'j\mu}^{LM} Y_{lm}(\mathbf{s}) Y_{l'm'}(\mathbf{p}) Y_{j\mu}(\mathbf{a}). \quad (2.2)$$

Мультиполярные гармоники являются также базисными функциями теории угловых корреляций в ядерных процессах с участием γ-лучей [40].

Очень часто в окончательные результаты входят мультиполярные гармоники с малым L , хотя ранги l, l', j, j'... внутренних тензоров могут пробегать большое (или бесконечное) число значений. Например, в угловом распределении фотоэлектронов в двойной фотоионизации ранг L в (2.1) принимает значения 0, 1, 2 , но l, l' пробегают от 0 до ∞ (в нашем примере $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$ - направления моментов фотоэлектронов). Как правило, в конкретных вычислениях используются явные выражения для $Y_{LM}^{ll'}$ с фиксированным M (см. например [20, 49]), которые получаются из определения (2.1), как функции угловых координат векторов $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}'$ в фиксированной системе координат. Ясно, что вычисления должны повторяться для каждой пары величин l, l', и для больших значений моментов l, l' выражение для $Y_{LM}^{ll'}$ очень сложно даже для малых L.

Хотя разложение биполярных гармоник произвольного вида по минимальным биполярным гармоникам может быть легко получено с помощью инвариантных представлений МКВ (см. формулы (1.47), (1.48)), можно получить разложения более простого вида.

Рассмотрим биполярную гармонику с рангами $l = l'$, $L = 1$. Очевидно БГ (2.1) с $L = 1$ есть псевдотензор ранга 1 (аксиальный вектор) и, поэтому, мы имеем $Y_1^{ll}(\mathbf{n},\mathbf{n}') \sim i[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']$, так как векторное произведение – единственный аксиальный вектор, который может быть построен из векторов $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}'$. Для краткости мы иногда будем опускать индекс компоненты m в тензорной записи T_{km}, если это не будет вызывать недоразумений.

В нашем простейшем случае БГ $Y_1^{ll}(\mathbf{n},\mathbf{n}')$ можно вычислить в явном виде, используя следующие равенства для полиномов Лежандра P_l от $\cos\theta = \mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'$, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, $\mathbf{n}' = \mathbf{r}'/r'$

$$\begin{aligned} P_l(\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}') &= \frac{4\pi}{2l+1}\sum_m Y_{lm}(\mathbf{n})Y_{lm}^*(\mathbf{n}') \\ &= \frac{(-1)^l 4\pi}{\sqrt{(2l+1)}}\{Y_l(\mathbf{n})\otimes Y_l(\mathbf{n}')\}_{00}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\nabla P_l(\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}') = \frac{dP_l(\cos\theta)}{d\cos\theta}\nabla\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{rr'} = \frac{1}{r}P_l^{(1)}(\cos\theta)\big(\mathbf{n}' - (\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}')\,\mathbf{n}\big). \quad (2.4)$$

$P_l^{(k)}(x) = (d/dx)^k P_l(x)$, есть k-я производная P_l. Для дальнейших применений равенства (2.4), будем считать r переменной величиной. Подстановку $r = 1$ необходимо делать только в финальных результатах. Теперь действие оператора орбитального момента $\hat{\mathbf{l}} = -i[\mathbf{r}\times\nabla]$ на

$P_l(\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}')$ можно представить в двух формах

$$\hat{\mathbf{l}}P_l(\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}') = -i[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']P_l^{(1)}(\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}') = 4\pi(-1)^l\sqrt{\frac{l(l+1)}{3(2l+1)}}\;Y_1^{ll}(\mathbf{n},\mathbf{n}'). \tag{2.5}$$

Здесь первое равенство следует из (2.4) и было также получено (другим способом) в учебнике Ландау и Лифшица (1989) [7] при анализе спин-орбитальных эффектов в рассеянии электронов. Последнее равенство в (2.5) получается в результате действия $\hat{\mathbf{l}}$ на $Y_{lm}(\mathbf{n})$ в (2.3), с учетом известных правил действия операторов $\hat{l}_z$, $\hat{l}_\pm$ [4] на Y_{lm}

$$\hat{l}_\mu Y_{lm} = (-1)^{l-m}\sqrt{\frac{l(l+1)(2l+1)}{3}}C^{1\mu}_{l\,m+\mu\;\;l\,-m}Y_{l\;m+\mu}. \tag{2.6}$$

Таким образом, как и указано выше, Y_1^{ll} выражается через векторное произведение.

Для БГ с произвольным рангом L техника приведения усложняется. Простейший способ последовательного понижения внутренних тензорных рангов l, l' БГ есть использование рекуррентного соотношения

$$\begin{aligned} A_{00}\,Y_{jm}^{ll'}(\mathbf{n},\mathbf{n}') &= -A_{11}\;Y_{jm}^{l-2,l'-2}(\mathbf{n},\mathbf{n}') + A_{10}Y_{jm}^{l-2,l'}(\mathbf{n},\mathbf{n}') \\ &+\;A_{01}Y_{jm}^{l,l'-2}(\mathbf{n},\mathbf{n}') - \Pi_{l-1,l'-1}\cos\theta Y_{jm}^{l-1,l'-1}(\mathbf{n},\mathbf{n}'), \quad \cos\theta = \mathbf{n}\cdot\mathbf{n}', \end{aligned} \tag{2.7}$$

которое непосредственно следует из известного правила изменения схемы связи в неприводимом тензорном произведении [4], примененного к тензорному произведению

$$\left\{Y_j^{l-1,l'-1}(\mathbf{n},\mathbf{n}')\otimes\{\mathbf{n}\otimes\mathbf{n}'\}_0\right\}_{jm}.$$

$\Pi_{a,b,\ldots} = \sqrt{(2a+1)(2b+1)\ldots}$. Коэффициенты $_{p,q}$ в (2.7) есть

$$\begin{aligned} A_{p,q} \;\;=\;\; & \sqrt{\frac{(p+q+(-1)^p\,l+(-1)^q\,l')^2-j^2}{2l+1-4p}} \\ & \times\sqrt{\frac{(p+q+(-1)^p\,l+(-1)^q\,l')^2-(j+1)^2}{2l'+1-4q}}. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Рекуррентное соотношение (2.7) доказывает утверждение раздела 1.5 о полноте набора минимальных биполярных гармоник. Важно, что равенство (2.7) имеет инвариантную форму и не зависит от выбора системы координат. Последовательное применение этого рекуррентного соотношения приводит к понижению суммы внутренних рангов вплоть до j. Но для $(l+l')\gg j$ эта процедура сильно усложняется, и ниже будут представлены более компактные методы решения данной проблемы.

Анализ равенства (2.7) показывает, что в соответствии с изложенными выше соображениями, окончательное выражение для $Y_{jm}^{ll'}$ должно иметь следующую структуру

$$Y_{jm}^{ll'}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = \sum_{\lambda=\lambda_p}^{j} a_\lambda(\cos\theta)Y_{jm}^{\lambda,j+\lambda_p-\lambda}(\mathbf{n},\mathbf{n}'). \tag{2.9}$$

$$\lambda_p = \begin{cases} 0, & \text{для четных } (l+l'-j); \\ 1, & \text{для нечетных } (l+l'-j). \end{cases}$$

Параметр λ_p описывает поведение гармоник (2.1) при пространственной инверсии. А именно: $\lambda_p = 0$ если $Y_{jm}^{ll'}$ –тензор и $\lambda_p = 1$ если $Y_{jm}^{ll'}$ –псевдотензор (аксиальный тензор). Отметим, что коэффициенты a_λ в (2.9) зависят от θ и поэтому разложение (2.9) не противоречит известному утверждению о полноте системы биполярных гармоник. Как следует из (2.7), (2.9), коэффициенты a_λ удовлетворяют важному соотношению симметрии:

$$a_\lambda(l, l', j, \cos\,\theta) = a_{j-\lambda_p-\lambda}(l', l, j, \cos\theta). \tag{2.10}$$

Поэтому их можно вычислять только для больших ($\lambda = j, j-1, \ldots, [j/2]$) или для малых ($\lambda < [j/2]$) величин индекса λ.

Простейший метод определения a_λ состоит в использовании результатов главы 1. Пусть в системе координат K ось OZ направлена вдоль вектора $\mathbf{n}'$ и ось OY вдоль $[\mathbf{n}' \times \mathbf{n}]$. Явное выражение (2.1) БГ в системе K упрощается

$$Y_{jm}^{ll'}(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \sum_{k,k'} C_{lkl'k'}^{jm} Y_{lk}(\theta, 0) Y_{l'k'}(0,0) = \frac{\Pi_{ll'}}{4\pi} \sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\, C_{lml'0}^{jm} P_l^{|m|}(\cos\theta), \tag{2.11}$$

где $P_l^m(x)$ – присоединенный полином Лежандра. Тензорное равенство (2.9) само по себе можно рассматривать как систему уравнений для определения скалярных коэффициентов a_λ, учитывая что тензор $Y_{jm}^{ll'}$ имеет только $(j+\lambda_p)$ существенных компонент (с $m \geq 0$).

К более простым результатам приводит использование метода, базирующегося на использовании дифференциальных представлений БГ, аналогично рассмотренному выше случаю $l = l'$, $L = 1$. Исследуем сначала случай $l = l'$. Будем использовать обозначение

$$\{\mathbf{a}\}_{jm} \equiv \{\cdots\{\mathbf{a} \otimes \mathbf{a}\}_2 \otimes \cdots \mathbf{a}\}_{j-1} \otimes \mathbf{a}\}_{jm} \tag{2.12}$$

для тензорного произведения j векторов $\mathbf{a}$ (или векторных операторов $\hat{\mathbf{a}}$). Как указано в приложении А, тензор $\{\mathbf{a}\}_{jm}$ не зависит от схемы связи в правой стороне (2.12). В соответствии с (2.6) имеем

$$\{\hat{\mathbf{l}}\}_{jm} Y_{l\mu}(\mathbf{n}) = \sum_\nu A_\nu Y_{l\nu}(\mathbf{n}), \tag{2.13}$$

где матричный элемент $A_\nu = \langle l\nu|\{\hat{\mathbf{l}}\}_{jm}|l\mu\rangle$ можно вычислить с помощью теоремы Вигнера-Эккарта. Приведенный матричный элемент $\langle l||\{\hat{\mathbf{l}}\}_j||l\rangle$ удобно вычислять, используя (2.6) и равенство

$$\{\hat{\mathbf{l}}\}_{jj} = (\hat{l}_+)^j,$$

которое следует из определения (2.12) с учетом равенства $C_{aa\ bb}^{a+b\ a+b} = 1$. Имеем

$$\langle l||\{\hat{\mathbf{l}}\}_j||l\rangle = \frac{1}{2^j}\sqrt{\frac{j!(2l+j+1)!}{(2j-1)!!(2l-j)!}}. \tag{2.14}$$

Умножая равенство (2.13) на $Y^*_{l\mu}(\mathbf{n}')$, суммируя затем по μ и используя явный вид A_ν, находим следующее представление для БГ с равными рангами внутренних сферических гармоник

$$Y^{ll}_{jm}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = (-1)^l \frac{(2l+1)2^j}{4\pi} \sqrt{\frac{(2j+1)!!(2l-j)!}{j!(2l+j+1)!}} \{\hat{\mathbf{l}}\}_{jm} P_l(\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'). \tag{2.15}$$

Для $j=1$ получаем последнее равенство в (2.5). Используя (2.5) и простое соотношение

$$\{\hat{\mathbf{l}} \otimes [\mathbf{n}\times\mathbf{n}']\}_2 = -i\{\mathbf{n}\otimes\mathbf{n}'\}_2$$

получаем следующее разложение $Y^{ll}_{jm}(\mathbf{n},\mathbf{n}')$ по минимальным тензорам

$$Y^{ll}_{jm}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = (-1)^l(-2i)^j \sqrt{\frac{(2l-j)!}{j!(2l+j+1)!}} \sum_{s=0}^{[j/2]} \frac{(2l+1)}{(2s+1)!!} \sqrt{\frac{4\pi(2j+1)!}{(2j-4s+1)!}}$$
$$\times P_l^{(j-s)}(\cos\theta)\big(\sin\theta\big)^{j-2s} \{Y_{j-2s}(\mathbf{n}_0)\otimes \mathcal{Y}^s_{2s}(\mathbf{n},\mathbf{n}')\}_{jm}. \tag{2.16}$$

Где аргумент сферической функции $Y_{j-2s}(\mathbf{n}_0)$ есть $\mathbf{n}_0 = [\mathbf{n}\times\mathbf{n}']/\sin\theta$.

Для общего случая $l \neq l'$ выражение, аналогичное (2.15) может быть получено с использованием тензорного оператора, понижающего ранг сферической функции $Y_{lm}\big(\mathbf{r}/r\big)$. Такой оператор введен в приложении А, и теперь БГ может быть представлена в следующем операторном виде (см. приложение А)

$$Y^{ll'}_{jm}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = (-1)^{j+n} \frac{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}}{4\pi(2n+1)!} c_j(l,l')$$
$$\times \big\{\{\nabla\}_{k+\lambda_p}\otimes\{\nabla'\}_{j-k}\big\}_{jm} r^n r'^n P_n(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'/rr'). \tag{2.17}$$

Здесь

$$c_j(l,l') = \sqrt{\frac{2^{j+\lambda_p}(l+l'+j+1)!(2j+\lambda_p+1)!(l+l'-j)!}{(j+\lambda_p+l-l')!(j+\lambda_p+l'-l)!}},$$

$n = \frac{1}{2}(l+l'+j+\lambda_p)$, $k = \frac{1}{2}(l'-l+j-\lambda_p)$. Как указано выше, подстановку r, $r'=1$ в правой части (2.17) надо производить после действия операторов градиента.

Используя технику, изложенную в приложении Б, можно в явном виде вычислить действие операторов градиента на P_n в (2.17). В результате получаем формулы разложения произвольных БГ по базису «минимальных» гармоник (1.40):

(а) $\lambda_p = 0$ ($l+l'+j$ – четное)

$$Y^{ll'}_{jm}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = \sum_{s=0}^{j} a^0_s(l,l',j)\mathcal{Y}^s_{jm}(\mathbf{n},\mathbf{n}'), \tag{2.18}$$

(б) $\lambda_p = 1$ ($l+l'+j$ – нечетное)

$$Y^{ll'}_{jm}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = \sum_{s=0}^{j-1} a^1_s(l,l',j)\left\{[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']\otimes\mathcal{Y}^s_{j-1}(\mathbf{n},\mathbf{n}')\right\}_{jm}, \tag{2.19}$$

где

$$a_s^{\lambda_p} = (-i)^{\lambda_p}(-1)^{l'}\Pi_{ll'}\sqrt{\frac{(q-2j)!}{(q+1)!\,(q-2l)!\,(q-2l')!}}$$
$$\times\sqrt{\frac{2^j\,(2j+1)!\,s!\,(j-s-\lambda_p)!}{(2s+1)!!\,(2j-2s-2\lambda_p+1)!!}}$$
$$\sum_{t=0}^{t_{\max}}(-1)^{s+t}\binom{\frac{1}{2}(q-\lambda_p)-l}{t}\binom{j-\lambda_p-t}{s}$$
$$\times\frac{(q-\lambda_p+1)!!}{(q-\lambda_p-2t+1)!!}P^{(j-t)}_{j+l'-\lambda_p-t-s}(\cos\theta). \quad (2.20)$$

Здесь $q\equiv l+l'+j$, $t_{\max}=\min\{j-\lambda_p-s;\frac{1}{2}(q-\lambda_p-l)\}$. $\binom{m}{n}$ – биномиальный коэффициент. Полиномы $P_n^{(m)}$ соответствуют полиномам Гегенбауэра C_q^k

$$P_n^{(m)}(x)=(d/dx)^m P_n(x)=(2m-1)!!C_{n-m}^{m+1/2}(x).$$

Отметим, что полиномы $P_n^{(m)}(x)$ с различными индексами n и m не является линейно независимыми. Это следует, например, из рекуррентного соотношения

$$P_n^{(m)}(x)+(2n+3)P_{n+1}^{(m-1)}(x)-P_{n+2}^{(m)}(x)=0,$$

которое проверяется непосредственно. Данное обстоятельство приводит к отсутствию явной симметрии коэффициентов (2.20) относительно преобразования $l\rightleftharpoons l'$ как это должно следовать из общего соотношения симметрии (2.10)). Для $l<l'$ равенства (2.20) удобно использовать для вычисления $a_s^{\lambda_p}$ при больших значениях $s\geq[j/2]$, а соответствующие результаты для $s<[j/2]$ можно получить с помощью (2.10). Формулы приведения для БГ с рангами $1,2,3$ приведены в приложении В. Интересно, что первоначально формулы для БГ рангов 1,2 были получены с неявным использованием инвариантных представлений БГ в работе [55].

Отметим еще одно важное обстоятельство: для коэффициентов $a_s^{\lambda}(\theta)$ в разложениях (2.18), (2.19) справедливо рекуррентное соотношение (2.7), из которого, в частности, следует, что в общем случае полиномы $a_s^{\lambda}(\theta)$ не являются классическими ортогональными многочленами.

Наряду с угловыми распределениями, БГ $Y_{LM}^{ll'}(\mathbf{n},\mathbf{n}')$ используются при анализе двухэлектронных атомных волновых функций, соответствующих определенным значениям полного орбитального момента L двух электронов и его проекции M на фиксированную ось. Некоторые методы вычисления биполярных гармоник (рекуррентные соотношения) были получены в работе [63]. Функция $F_{ll'}^{L,-M}(\theta)$, введенная в этой работе, совпадает с БГ (2.1), но в специальной системе координат K с осью Z, направленной вдоль $[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']$. Поэтому, явные выражения для $F_{ll'}^{L,-M}$ с $L=1,2$, полученные в указанной работе не имеют инвариантного вида, и различны для разных значений M. В системе координат K формулы (.1) - (.5) дают те же результаты.

2.2 Схема приведения мультиполярных гармоник

Часто возникает ситуация, когда ранги некоторых тензоров внутри мультиполярной гармоники малы. Такие гармоники, например, возникают при анализе эффектов электронной поляризации в атомных процессах. Так, в случае фотоионизации мы имеем $l = 0, 1$ в триполярной гармонике (см. (2.2) выше). В этом разделе указано, что для приведения таких $k-$полярных гармоник можно использовать технику векторного дифференцирования. В частности, триполярную гармонику можно представить как результат действия скалярного дифференциального оператора на БГ. В каждом конкретном случае такой оператор можно составить, используя равенства

$$\{Y_l(\mathbf{r}/r) \otimes \mathbf{a}\}_{l+1} = \frac{1}{\sqrt{(l+1)(2l+3)}r^l}(\mathbf{a}\cdot\nabla)r^{l+1}Y_{l+1}(\mathbf{r}/r), \tag{2.21}$$

$$\{Y_l(\mathbf{r}/r) \otimes \mathbf{a}\}_{l} = -\frac{i}{\sqrt{l(l+1)}}(\mathbf{a}\cdot[\mathbf{r}\times\nabla])Y_{l}(\mathbf{r}/r), \tag{2.22}$$

$$\{Y_l(\mathbf{r}/r) \otimes \mathbf{a}\}_{l-1} = \frac{r^{l+1}}{\sqrt{l(2l-1)}}(\mathbf{a}\cdot\nabla)\frac{1}{r^l}Y_{l-1}(\mathbf{r}/r), \tag{2.23}$$

которые следуют из известных определений [4] сферических векторов $\mathbf{Y}^L_{JM}(\mathbf{r}/r)$, и простого соотношения

$$(\mathbf{a}\cdot\mathbf{Y}^L_{JM}(\mathbf{r}/r)) = \{Y_L(\mathbf{r}/r)\otimes\mathbf{a}\}_{JM}.$$

Здесь $\mathbf{a}$ – произвольный вектор.

Так, если k-полярная гармоника включает только один вектор $\mathbf{a}$ (или, то же самое, сферическую функцию $Y_{1m}(\mathbf{a}/a)$), то используя (2.21) - (2.23), можно вынести скалярный дифференциальный оператор за знак тензорного произведения, определяющего k-полярную гармонику, которая трансформируется, таким образом, в $(k-1)$-полярную гармонику. Если в триполярную гармонику входит два или более векторов $\mathbf{a}$, то надо использовать соотношения вида

$$\{Y_l(\mathbf{r}/r)\otimes\{\mathbf{a}\otimes\mathbf{a}\}_2\}_{l+2} = \{\{Y_l(\mathbf{r}/r)\otimes\mathbf{a}\}_{l+1}\otimes\mathbf{a}\}_{l+2}$$

с последующим применением (2.21) - (2.23).

В качестве примера использования этой техники приведем результаты приведения некоторых триполярных гармоник (2.2) с $l = 1$, $L = 1, 2$, которые возникают при анализе поляризационных эффектов в фотоионизации

$$\begin{aligned}\{\{\mathbf{s}\otimes Y_{r-1}(\mathbf{p})\}_r\otimes Y_r(\mathbf{a})\}_1 &= \frac{1}{\sqrt{r(2r+1)}}(\mathbf{s}\cdot\nabla_{\mathbf{p}})p^r\ \{Y_r(\mathbf{p})\otimes Y_r(\mathbf{a})\}_1|_{p=1}\\ &= \frac{i(-1)^r\sqrt{3}}{4\pi r\sqrt{r+1}}\Big((r-1)P_r^{(1)}(x)(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p})[\mathbf{p}\times\mathbf{a}]\\ &\qquad + P_r^{(2)}(x)\left([\mathbf{a}\times\mathbf{p}]\cdot[\mathbf{s}\times\mathbf{p}]\right)[\mathbf{p}\times\mathbf{a}] + P_r^{(1)}(x)[\mathbf{s}\times\mathbf{a}]\Big),\end{aligned} \tag{2.24}$$

$$
\begin{aligned}
\{\{\mathbf{s}\otimes Y_{r+2}(\mathbf{p})\}_{r+2}\otimes Y_r(\mathbf{a})\}_2 &= \frac{i}{\sqrt{(r+2)(r+3)}}(\mathbf{s}\cdot[\mathbf{p}\times\nabla_{\mathbf{p}}])\{Y_{r+2}(\mathbf{p})\otimes Y_r(\mathbf{a})\}_2 \\
&= \frac{i(-1)^r\sqrt{5}}{4\pi(r+2)\sqrt{(r+1)(r+3)(2r+3)}}\Bigg[P^{(2)}_{r+2}(x)\{\mathbf{p}\otimes[\mathbf{s}\times\mathbf{p}]\}_2 \\
&\quad - P^{(2)}_{r+1}(x)\{\mathbf{a}\otimes[\mathbf{s}\times\mathbf{p}]\}_2 + (\mathbf{s}\cdot[\mathbf{p}\times\mathbf{a}])\bigg(\frac{1}{2}P^{(3)}_{r+2}(x)\{\mathbf{p}\otimes\mathbf{p}\}_2 \\
&\quad + \frac{1}{2}P^{(3)}_{r}(x)\{\mathbf{a}\otimes\mathbf{a}\}_2 - P^{(3)}_{r+1}(x)\{\mathbf{a}\otimes\mathbf{p}\}_2\bigg)\Bigg]. \qquad (2.25)
\end{aligned}
$$

Здесь $x = \mathbf{a}\cdot\mathbf{p}$. Эти равенства получаются с использованием формул (.1), (.4) для БГ. Вычисления гармоник (2.2) для других значений l', j' могут быть проделаны аналогично.

2.2.1 Вычисление тензорных произведений векторов

При использовании техники квантового углового момента для разделения кинематических и динамических факторов в сечениях процессов, содержащих несколько векторов (векторы поляризации фотонов, импульсы и спины частиц и т. д.), приходится иметь дело со скалярными произведениями неприводимых тензоров, составленных из указанных векторов. Такие конструкции в наиболее общем случае имеют вид

$$
\Big(\big\{\ldots\{\mathbf{a}\otimes\mathbf{a}_1\}_{i_1}\otimes\ldots\mathbf{a}_k\big\}_l\cdot\big\{\ldots\{\mathbf{b}\otimes\mathbf{b}_1\}_{j_1}\otimes\ldots\mathbf{b}_{k'}\big\}_l\Big) \qquad (2.26)
$$

и, будучи скалярами, должны, очевидно, переписываться через комбинации скалярных и смешанных произведений векторов $\mathbf{a}_i$ и $\mathbf{b}_j$. Для выражений (2.26), содержащих три и четыре вектора, соответствующие формулы приведены в справочнике [4]. Ниже описана процедура, позволяющая упрощать выражения (2.26) при произвольных значениях k, k' и i_k.

Для скалярного произведения тензоров $\{\mathbf{a}\}_{jm}$ и $\{\mathbf{b}\}_{jm}$ справедливо равенство, следующее из известного представления сферической функции $Y_{jm}(\mathbf{a}/a)$ через $\{\mathbf{a}\}_{jm}$ [4] и теоремы сложения для сферических функций

$$
(\{\mathbf{a}\}_j\cdot\{\mathbf{b}\}_j) = P_j(\cos\theta)\frac{j!}{(2j-1)!!}(ab)^j, \qquad (2.27)
$$

$\cos\theta = \mathbf{a}\cdot\mathbf{b}/ab$, P_j-полином Лежандра.

Покажем теперь, что всякую тензорную конструкцию

$$
\Big\{\ldots\big\{\{\mathbf{a}\otimes\mathbf{a}_1\}_{i_1}\otimes\mathbf{a}_2\big\}_{i_2}\otimes\ldots\mathbf{a}_k\Big\}_{i_km_k}
$$

можно представить в виде

$$
\big\{\ldots\{\mathbf{a}\otimes\mathbf{a}_1\}_{i_1}\otimes\ldots\mathbf{a}_k\big\}_{i_km_k} = \hat{O}(\mathbf{a},\mathbf{a}_1,\ldots,\mathbf{a}_k)\,\{\mathbf{a}\}_{i_km_k}\,, \qquad (2.28)
$$

где $\hat{O}-$ скалярный дифференциальный оператор, содержащий векторы $\mathbf{a}_1,\ldots,\mathbf{a}_k$ и оператор градиента $\nabla_a \equiv \partial/\partial\mathbf{a}$. Действительно, для каждого конкретного набора значений $i_1, i_2, \ldots, i_k$

в (2.28) такой оператор можно составить, используя следующие равенства

$$\{\{\mathbf{a}\}_l \otimes \mathbf{b}\}_{l+1\ m} = \frac{1}{l+1}(\mathbf{b}\cdot\nabla_a)\,\{\mathbf{a}\}_{l+1\ m}\,, \tag{2.29}$$

$$\{\{\mathbf{a}\}_l \otimes \mathbf{b}\}_{lm} = -\frac{i}{\sqrt{l(l+1)}}(\mathbf{b}\cdot[\mathbf{a}\times\nabla_a])\,\{\mathbf{a}\}_{lm}\,, \tag{2.30}$$

$$\{\{\mathbf{a}\}_l \otimes \mathbf{b}\}_{l-1\ m} = \frac{a^{2l+1}}{\sqrt{(2l-1)(2l+1)}}(\mathbf{b}\cdot\nabla_a)a^{-2l+1}\,\{\mathbf{a}\}_{l-1\ m}\,, \tag{2.31}$$

которые получаются из (2.21) – (2.23) с учетом определения сферической функции (1.13).

Приведенные результаты достаточны для записи конструкций типа (2.26) через скалярные и смешанные произведения входящих в них векторов. Используя (2.29) - (2.31), векторы $\mathbf{a}_1,\ldots,\mathbf{a}_k$ и $\mathbf{b}_1,\ldots,\mathbf{b}_{k'}$ выносятся в скалярный (содержащий только скалярные и смешанные произведения) дифференциальный оператор (см. (2.28)), действующий на скалярное произведение (2.27) с $j=l$. Вычисляя действие этого оператора на полином Лежандра, записанный в явном виде через скалярные произведения $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}$ с помощью результатов приложения Б, получаем окончательный результат. Например, с учетом (2.29) при $l=1$ имеем

$$\begin{aligned}
(\{\mathbf{a}\otimes\mathbf{a}_1\}_2\cdot\{\mathbf{b}\otimes\mathbf{b}_1\}_2) &= \frac{1}{6}\,(\mathbf{a}_1\cdot\nabla_a)\,(\mathbf{b}_1\cdot\nabla_b)\,P_2(\cos\theta)\\
&= \frac{1}{4}\,(\mathbf{a}_1\cdot\nabla_a)\,(\mathbf{b}_1\cdot\nabla_b)\left\{(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})^2-\frac{1}{3}a^2b^2\right\}\\
&= \frac{1}{2}\,(\mathbf{a}_1\cdot\nabla_a)\left\{(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})\,(\mathbf{b}_1\cdot\mathbf{a})-\frac{1}{3}a^2\,(\mathbf{b}_1\cdot\mathbf{b})\right\}\\
&= \frac{1}{2}\,(\mathbf{b}\cdot\mathbf{a}_1)\,(\mathbf{b}_1\cdot\mathbf{a})+\frac{1}{2}\,(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})\,(\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{b}_1)-\frac{1}{3}\,(\mathbf{b}\cdot\mathbf{b}_1)\,(\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}_1)\,,
\end{aligned} \tag{2.32}$$

что совпадает с формулами, приведенными в [4]. Ниже представлены результаты расчета скалярных произведений, содержащих пять и шесть векторов, возникающих при определении угловой структуры в пп. 5.1.2, 5.3

$$\begin{aligned}
\big(\{\{\mathbf{a}\otimes\mathbf{a}_1\}_2\otimes\mathbf{a}_2\}_2\cdot\{\mathbf{b}\otimes\mathbf{b}_1\}_2\big) &= \frac{i}{2\sqrt{6}}\Big[(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})(\mathbf{b}_1\cdot[\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_2])\\
+(\mathbf{b}_1\cdot\mathbf{a}_1)(\mathbf{b}\cdot[\mathbf{a}\times\mathbf{a}_2]) &+ (\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{b})(\mathbf{b}_1\cdot[\mathbf{a}\times\mathbf{a}_2])+(\mathbf{b}_1\cdot\mathbf{a})(\mathbf{b}\cdot[\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_2])\Big];
\end{aligned}$$

Тензорное произведение, содержащее 6 векторов имеет вид:

$$\begin{aligned}
&6\,\big(\{\mathbf{a}\otimes\{\mathbf{a}_1\otimes\mathbf{a}_2\}_2\}_3\cdot\{\mathbf{b}\otimes\{\mathbf{b}_1\otimes\mathbf{b}_2\}_2\}_3\big)\\
&= (\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{b}_1)\big[(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})(\mathbf{a}_2\cdot\mathbf{b}_2)+(\mathbf{b}\cdot\mathbf{a}_2)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}_2)\big]+(\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{b})\big[(\mathbf{b}_1\cdot\mathbf{a}_2)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}_2)+(\mathbf{a}_2\cdot\mathbf{b}_2)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}_1)\big]\\
&+(\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{b}_2)\big[(\mathbf{b}_1\cdot\mathbf{a})(\mathbf{b}\cdot\mathbf{a}_2)+(\mathbf{b}_1\cdot\mathbf{a}_2)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})\big]-\frac{2}{5}\Big((\mathbf{b}\cdot\mathbf{b}_1)\big[(\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}_1)(\mathbf{a}_2\cdot\mathbf{b}_2)+(\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}_2)\\
&+(\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}_2)(\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{b}_2)\big]+(\mathbf{b}_1\cdot\mathbf{b}_2)\big[(\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}_1)(\mathbf{b}\cdot\mathbf{a}_2)+(\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}_2)(\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{b})+(\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})\big]\\
&+(\mathbf{b}\cdot\mathbf{b}_2)\big[(\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}_1)+(\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}_1)(\mathbf{a}_2\cdot\mathbf{b}_1)+(\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{b}_1)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}_2)\big]\Big).
\end{aligned} \tag{2.33}$$

В заключение укажем, что изложенная техника преобразования скалярных произведений типа (2.26) применима и для упрощения тензоров R_{kq} низкого ранга k, построенных из нескольких векторов. Так, для упрощения тензора первого ранга R_{1q} вначале следует вычислить скалярное произведение $(R_1 \cdot \mathbf{r})$, где $\mathbf{r}$-произвольный вектор, а затем получить явное выражение для R_{1q}, действуя оператором $(\nabla_{\mathbf{r}})_q$ на $(R_1 \cdot \mathbf{r})$.

Глава 3

Поляризационно-угловая структура сечений однофотонных процессов

В этой главе рассмотрена поляризационно-угловая структура сечений однофотонных процессов: а) излучение фотонов поляризованными атомами; б) одноэлектронная фотоионизация поляризованного атома; в) двухэлектронная фотоионизация атома с произвольным начальным моментом; г) релятивистский фотоэффект с учетом поляризации фотоэлектрона.

3.1 Излучение фотонов поляризованными атомами

Как применение разложений (1.63)-(1.65) к решению конкретных физических задач, рассмотрим излучение фотонов поляризованным атомом. В электрическом дипольном приближении в калибровке длины, угловое распределение $dw_{\mathbf{ke}}/d\Omega$ фотонов, излучаемых поляризованным атомом в направлении $\mathbf{k}$ может быть представлено в виде [3]

$$\frac{dw_{\mathbf{ke}}}{d\Omega} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} T_{fi},$$

где

$$T_{fi} = \sum_{M_i M_i' M_f} \langle E_f J_f M_f | (\mathbf{e}\cdot\mathbf{d}) | E_i J_i M_i \rangle \langle E_f J_f M_f | (\mathbf{e}\cdot\mathbf{d}) | E_i J_i M_i' \rangle^* \langle J_i M_i | \rho^i | J_i M_i' \rangle. \tag{3.1}$$

Здесь $\mathbf{e}$, $\mathbf{d}$ — векторы поляризации фотона и оператор дипольного момента, соответственно, и ρ^i – оператор матрицы плотности. Использование стандартной алгебры углового моменты приводит к следующему выражению для T_{fi}:

$$T_{fi} = (-1)^{J_i + J_f} |\langle E_f J_f \parallel \mathbf{d} \parallel E_i J_i \rangle|^2 \sum_{p=0,1,2} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & p \\ J_i & J_i & J_f \end{Bmatrix} (P_p \cdot \{\mathbf{e} \otimes \mathbf{e}^*\}_p), \tag{3.2}$$

где тензоры P_{pm} определены в (1.61). Скалярное произведение в правой части этого равенства легко вычисляется в соответствии с (1.63) – (1.66). Окончательно получаем:

$$\frac{dw_{\mathbf{ke}}}{d\Omega} = \frac{\omega^3}{6\pi\hbar c^3}(-1)^{J_i+J_f}|\langle E_f J_f \parallel \mathbf{d} \parallel E_i J_i\rangle|^2 \Big[(-1)^{J_i+J_f}\frac{1}{\sqrt{2J_i+1}}$$
$$- \frac{3}{\sqrt{2}}\begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ J_i & J_i & J_f \end{Bmatrix}\xi(\mathbf{k}\cdot\mathbf{P}_1) + \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ J_i & J_i & J_f \end{Bmatrix}\Big(\mathcal{P}_{20}(3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{a}|^2 - 1)$$
$$+ \mathcal{P}_{22}(3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{b}|^2 - 1) + 3\mathcal{P}_{21}\mathrm{Re}(\mathbf{e}\cdot\mathbf{a})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{b})$$
$$+ 3\mathcal{P}'_{21}\mathrm{Re}(\mathbf{e}\cdot\mathbf{a})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{c}) + 3\mathcal{P}'_{22}\mathrm{Re}(\mathbf{e}\cdot\mathbf{b})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{c})\Big)\Big]. \quad (3.3)$$

Это выражение обладает высокой симметрией и инвариантной структурой, поскольку содержит только скалярные произведения векторов. 8 параметров $\mathcal{P}$ описывают поляризационные свойства начального атомного состояния с произвольным полным угловым моментом J. Отметим также, что вектор «атомной ориентации» $\mathbf{P}_1$ в ур. (3.3) описывает эффект циркулярного дихроизма в угловом распределении, т.е., разность между интенсивностями излучения с противоположными знаками циркулярной поляризации, детектированного в направлении $\mathbf{k}$.

Для анализа эффектов фотонной поляризации полезны следующие тождества

$$(\mathbf{e}\cdot\mathbf{a})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{b}) = \mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{a})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{b})\} + \frac{i}{2}\,\xi\,\mathbf{k}\cdot[\mathbf{a}\times\mathbf{b}], \quad (3.4)$$

$$2\,\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{a})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{b})\} = 2l\ (\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\epsilon})(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\mathbf{b}) + (l-1)\ \ [\mathbf{a}\times\mathbf{k}]\cdot[\mathbf{k}\times\mathbf{b}], \quad (3.5)$$

которые справедливы для действительных векторов $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ [6].

Все частные экспериментальные ситуации, связанные с атомной поляризацией могут быть легко проанализированы с использованием соотношений (3.3), (1.67). Например, если атомный ансамбль возбуждался в результате поглощения поляризованных фотонов, то удобно выбирать направление векторов $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ вдоль главной оси эллипса поляризации и вдоль направления падающих фотонов, соответственно. Для линейно поляризованных фотонов, член в (3.3), содержащий векторы $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ должен быть опущен, в отличие от ситуации полностью циркулярно поляризованных фотонов, когда члены с $\mathbf{a}$, $\mathbf{c}$ выпадают. Мы не будем проводить здесь дальнейшего анализа особенностей углового распределения $dw_{\mathbf{ke}}/d\Omega$, поскольку они легко следуют из (3.3) и обсуждались в деталях ранее в работах [27, 39].

3.2 Угловые распределения в однократной фотоионизации

3.2.1 Общая структура угловых распределений

Будем рассматривать угловое распределение $d\sigma/d\Omega_{\mathbf{p}}$ фотоэлектронов в фотоионизации поляризованного атома пучком произвольно поляризованных фотонов, с учетом спина фотоэлектрона. Для простоты, не учитываются поляризационные состояния фотоионов. Единичный вектор $\mathbf{p}$ определяет направление вылета фотоэлектрона. Для оператора взаимодействия фотона с атомом будем использовать электрическое дипольное приближение в калибровке длины.

Пусть $\mathbf{e}$, ω и $\mathbf{k}$ – единичный (комплексный) вектор поляризации, частота и единичный вектор в направлении фотонного пучка, соответственно $\mathbf{e}\cdot\mathbf{e}^* = 1$, $\mathbf{e}\cdot\mathbf{k} = 0$. Поляризационное состояние фотона будем описывать неприводимым тензором

$$T_{pm}(\mathbf{e}, \mathbf{e}^*) = (-1)^{1-p}\sqrt{\frac{3(p+1)}{(2p+1)}}\{\mathbf{e}\otimes\mathbf{e}^*\}_{pm}, \quad p = 0, 1, 2. \tag{3.6}$$

Этот подход эквивалентен использованию матрицы плотности фотона ρ^γ [27], но определение (3.6) более удобно для записи $d\sigma$ в инвариантной векторной форме. В частности,

$$T_0 = 1,\ \ T_1 = \xi\mathbf{k}, \qquad \xi = i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{e}\times\mathbf{e}^*],$$

где $-1 \le \xi \le +1$ есть степень циркулярной поляризации, которая эквивалентна стандартному параметру Стокса ξ_2. Отметим, что степень циркулярной поляризации является псевдоскалярной Т-нечетной величиной. Вектор $\mathbf{k}$ используется ниже для определения оси Z лабораторной системы координат.

Будем считать, что приготовленное атомное состояние обладает аксиальной симметрией, т.е. атом с начальным угловым моментом J_0 поляризован вдоль направления единичного вектора $\mathbf{a}$. Атомная матрица плотности ρ^a диагональна в атомной системе с осью Z, направленной вдоль вектора $\mathbf{a}$ и в этой системе отличны от нуля только компоненты атомных мультиполей состояния $\rho^a_{rm_r}$ с $m_r = 0$. В лабораторной системе матрица ρ^a недиагональна и включает сферические функции вектора $\mathbf{a}$ [27]

$$\langle J_0, M_0|\rho^a|J_0, M_0'\rangle = \sum_{r=0}^{2J_0}\sum_{m_r}(-1)^{J_0-M_0}\sqrt{\frac{4\pi}{2r+1}}C^{rm_r}_{J_0M_0'J_0-M_0}Y_{rm_r}(\mathbf{a})\rho^a_{r0}. \tag{3.7}$$

Здесь M_0, M'_0 – проекция $\mathbf{J}_0$ на вектор $\mathbf{k}$.

Будем считать также, что поляризационная ось электронного детектора фиксирована в направлении единичного вектора $\mathbf{n}_s$, и поэтому матрица плотности $\rho^s_{\mu,\mu'}$ в лабораторной системе имеет такой же вид, как и (3.7), с двумя ненулевыми мультиполями ρ^s_{g0}

$$\rho^s_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}},\ \ \rho^s_{10} = \sqrt{2}\overline{\mu_0}, \qquad -\frac{1}{2} \le \overline{\mu_0} \le \frac{1}{2}.$$

Так, $\mathbf{s} = \overline{\mu_0}\ \mathbf{n}_s$ есть средний спин фотоэлектрона, измеряемый детектором, и для описания эффектов спиновой поляризации определим сферический тензор

$$\widetilde{Y}_{gm_g}(\mathbf{s}) = \sqrt{\frac{2\pi}{2g+1}}\rho^s_{g0}Y_{gm_g}(\mathbf{n}_s), \tag{3.8}$$

который равен $1/2$ и $\mathbf{s}$ при $g = 0$ и $g = 1$ соответственно. Вектор $\mathbf{s}$ есть Т-нечетный аксиальный вектор и для него мы будем использовать термин «спин фотоэлектрона».

Используя определения (3.6) - (3.8), векторную структуру дифференциального сечения $d\sigma/d\Omega$ можно определить из соображений симметрии и вращательной инвариантности. Действительно, поскольку амплитуда однофотонного перехода линейна по $\mathbf{e}$, общая форма зависимости любого однофотонного процесса от поляризации фотона может быть записана в виде

$$d\sigma = \sum_{p=0}^{2} \sum_{\alpha} (A_p^{(\alpha)}(\{\mathbf{n}_a\}) \cdot T_p(\mathbf{e}, \mathbf{e}*)). \tag{3.9}$$

Здесь $A_{pm}^{(\alpha)}(\{\mathbf{n}_a\})$ – все возможные неприводимые тензоры ранга p, которые могут быть составлены из набора $\{\mathbf{n}_a\}$ векторов задачи, отличных от $\mathbf{e}, \mathbf{e}^*$. $a = 1, 2, \ldots$ Эти тензоры должны быть T-нечетными псевдотензорами (T-нечетными аксиальными векторами) при $p = 1$ и T-четными скалярами и T-четными тензорами при $p = 0$ и $p = 2$, соответственно. В наиболее общем случае $A_{pm}^{(\alpha)}(\{\mathbf{n}_a\}) = A_{pm}^{(\alpha)}(\mathbf{a}, \mathbf{s}, \mathbf{p})$. Когда тензоры $A_p^{(\alpha)}$ будут составлены в явном виде, может быть использована известная техника [4] для записи скалярных произведений тензоров в (3.9) в терминах скалярных и смешанных произведений векторов.

Так, в случае неполяризованного электрона и неполяризованного атома только тензоры вида $\{\mathbf{p} \otimes \mathbf{p}\}_0$ или $\{\mathbf{p} \otimes \mathbf{p}\}_2$ возможны для $A_p^{(\alpha)}(\mathbf{p})$, и мы имеем поэтому

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \frac{\sigma}{4\pi}\left(1 + \beta \frac{3|\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}|^2 - 1}{2}\right). \tag{3.10}$$

Здесь параметры σ and β – полное сечение фотоионизации и параметр угловой асимметрии.

Направим единичный вектор $\boldsymbol{\epsilon}$ вдоль главной оси эллипса поляризации фотона; очевидно, что в случае чистой линейной поляризации он совпадает с $\mathbf{e}$. Анализ зависимости $d\sigma/d\Omega_{\mathbf{p}}$ от поляризации фотона упрощается, если учесть легко проверяемое тождество (оно следует из соотношения (3.5) со стр. 43)

$$|\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}|^2 = l\, (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p})^2 - \frac{(l-1)}{2}[\mathbf{k} \times \mathbf{p}]^2. \tag{3.11}$$

Здесь $l = \mathbf{e} \cdot \mathbf{e} = \mathbf{e}^2$ есть степень линейной поляризации $(0 \le l \le 1)$. Поэтому для линейно поляризованных $(l = 1)$ и циркулярных или неполяризванных $(l = 0)$ фотонов из (3.10) следуют известные результаты, которые обычно получают по отдельности. Ясно, что для эллиптической или частичной поляризации фотонов, угловое распределение усложняется и зависит от двух углов. Как видно из (3.11), для описания эффектов фотонной поляризации в общем случае наиболее удобны углы между векторами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{k}$ и между $\mathbf{p}$ и $\boldsymbol{\epsilon}$.

Аналогично, учет эффектов электронной поляризации разрешает новые тензорные формы для $A_p^{(\alpha)}(\mathbf{s}, \mathbf{p})$, а именно $\mathbf{s}$ и $\left\{\{\mathbf{s} \otimes \mathbf{p}\}_1 \otimes \mathbf{p}\right\}_p$, в соответствии с правилами симметрии. Так, в дополнение к (3.10) $d\sigma(\mathbf{s})/d\Omega_{\mathbf{p}}$ содержит три линейных по $\mathbf{s}$ члена

$$\frac{d\sigma(\mathbf{s})}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \frac{1}{2}\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} + \frac{1}{8\pi}\Big(\xi\,\gamma\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{s} + \xi\,\gamma_1\big(3(\mathbf{k}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p}) - \mathbf{k}\cdot\mathbf{s}\big) + \gamma_2\,\mathrm{Re}\big\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}^*\cdot[\mathbf{s}\times\mathbf{p}])\big\}\Big). \quad (3.12)$$

Полное сечение равно

$$\sigma(\mathbf{s}) = \frac{1}{2}(\sigma + \xi\,\gamma\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}). \quad (3.13)$$

При линейной и циркулярной поляризации фотонов эти результаты совпадают с результатами работы [30], в которой представлены выражения для параметров γ, $\gamma_{1,2}$ в терминах дипольных матричных элементов.

Учет атомных поляризационных эффектов не так прост, поскольку в соответствии (3.7) сечение должно содержать все мультиполи состояния ρ^a_{r0}, скалярные или псевдоскалярные при четных или нечетных значениях индекса r соответственно, и сферические функции $Y_{rm_r}(\mathbf{a})$ с $0 \le r \le (2J_0+1)$. Другими словами, каждая тензорная конструкция $A^{(\alpha)}_p(\mathbf{a},\mathbf{p})$ в (3.9) должна включать сумму $(2J_0+1)$ тензоров ранга p, составленных из векторов $\mathbf{p}$ и из r векторов $\mathbf{a}$ с $r = 0, 1, \ldots, 2J_0$. Поскольку максимальное значение ранга p только 2, ясно что в общем случае каждое слагаемое в правой части (3.9) должно включать также полиномы четной или нечетной степени от $\cos\theta = \mathbf{a}\cdot\mathbf{p}$. Принимая все это во внимание, общую форму $d\sigma(\mathbf{a})/d\Omega_{\mathbf{p}}$ можно представить в виде суммы девяти слагаемых

$$\frac{d\sigma(\mathbf{a})}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \frac{1}{4\pi}\big(\sigma^{(e)}_0 + \sigma^{(1,e)}_1\,\xi\mathbf{k}\cdot\mathbf{a} + \sigma^{(1,o)}_1\,\xi\mathbf{k}\cdot\mathbf{p} + \sigma^{(2,o)}_1\,\xi\mathbf{k}\cdot[\mathbf{p}\times\mathbf{a}] + \sigma^{(1,e)}_2\,\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}^*\cdot[\mathbf{p}\times\mathbf{a}])\} + \sigma^{(1,o)}_2\,\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{a})(\mathbf{e}^*\cdot[\mathbf{p}\times\mathbf{a}])\} + \sigma^{(2,e)}_2(3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{p}|^2 - 1) + \sigma^{(3,e)}_2(3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{a}|^2 - 1) + \sigma^{(2,o)}_2\big(3\,\mathrm{Re}\,\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{a})\} - \mathbf{p}\cdot\mathbf{a}\big)\big). \quad (3.14)$$

Параметры $\sigma^{(\alpha,e)}_p(\sigma^{(\alpha,o)}_p)$ есть четные (нечетные) функции от $\cos\theta$ и, поэтому, они являются скалярами (псевдоскалярами). Интегрирование в (3.14)) по направлениям $\mathbf{p}$ дает

$$\sigma(\mathbf{a}) = \sigma + \xi\,\gamma'\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{a} + \beta'\frac{3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{a}|^2 - 1}{2}. \quad (3.15)$$

Не зависящие от θ факторы γ', β' включают мультиполи состояния с $r = 1, 2$, соответственно.

Если поляризованы и атом и электрон, то число независимых тензорных комбинаций векторов в (3.9) велико. Поскольку вектор $\mathbf{s}$ может входить в сечение только линейно, коэффициенты при векторных комбинациях являются также четными или нечетными функциями только от $\cos\theta$, как это обсуждалось перед равенством (3.14)). Так, при $p = 0$ возможны 4 комбинации

$$1,\ \ \mathbf{p}\cdot\mathbf{s},\ \ \mathbf{a}\cdot\mathbf{s},\ \ \mathbf{p}\cdot[\mathbf{a}\times\mathbf{s}],$$

но при $p = 2$ возникает уже 21 различная векторная комбинация, включающая $\mathbf{e}$ и $\mathbf{e}^*$. Одна из них есть $|\mathbf{e}\cdot\mathbf{a}|^2\big(\mathbf{p}\cdot[\mathbf{a}\times\mathbf{s}]\big)$ и появляется в $d\sigma$ только при $J_0 \geq 2$. При $J_0 = 1$, $p = 2$ дают вклад в $d\sigma$ 16 комбинаций, а для $J_0 = 1/2$, $p = 2$ – 8 комбинаций. Двенадцать комбинаций с $p = 1$ пропорциональны $\xi\mathbf{k}$ и описывают циркулярный дихроизм в угловом распределении

$$\Delta_{CD}(\mathbf{a},\mathbf{s},\mathbf{p}) = \frac{d\sigma(\mathbf{a},\mathbf{s},\xi)}{d\Omega_{\mathbf{p}}} - \frac{d\sigma(\mathbf{a},\mathbf{s},-\xi)}{d\Omega_{\mathbf{p}}}.$$

Анализ независимых векторных конструкций для $A^{(\alpha)}_{p=1}(\mathbf{a},\mathbf{s},\mathbf{p})$ в (3.9) показывает, что выражение для Δ можно записать в виде

$$\begin{aligned}\Delta_{CD} = \frac{1}{4\pi}\xi\Big((\gamma-\gamma_1)\mathbf{k}\cdot\mathbf{s} + 3\gamma_1(\mathbf{k}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p}) + \sigma_1^{(1,e)}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{a} + \sigma_1^{(1,o)}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{p} \\ + \sigma_1^{(2,o)}\,\mathbf{k}\cdot[\mathbf{p}\times\mathbf{a}]\Big) + 2\xi\Big(f_1^{(e)}\mathbf{k}\cdot\mathbf{s} + f_2^{(e)}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p}) + f_3^{(e)}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})(\mathbf{s}\cdot\mathbf{a}) + f_4^{(o)}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{s}\cdot\mathbf{a}) + \\ f_5^{(o)}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p}) + \ g_1^{(e)}\ \mathbf{k}\cdot[\mathbf{s}\times\mathbf{a}] + g_2^{(e)}\big(\mathbf{k}\cdot[\mathbf{a}\times\mathbf{p}]\big)(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p}) \\ + g_3^{(e)}\big(\mathbf{s}\cdot[\mathbf{a}\times\mathbf{p}]\big)(\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}) + g_4^{(o)}\big(\mathbf{s}\cdot[\mathbf{a}\times\mathbf{p}]\big)(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})\Big). \quad (3.16)\end{aligned}$$

Как и раньше, верхние индексы параметров f, g определяют тип зависимости от $\cos\theta$. При $J_0 \geq 3/2$ все слагаемые в (3.16) отличны от нуля. Они имеют простой физический смысл. Слагаемые в первой скобке описывают «электронный», Δ_s, и «атомный», Δ_a, дихроизмы; они те же, что и в (3.12), (3.14). Слагаемые $f_1^{(e)}$, $f_2^{(e)}$ второй скобки дают поправки к $\Delta_{s,a}$, обусловленные эффектами типа выстраивания. По этой причине параметры f_k включают только четные атомные мультиполи. Отметим, что поправки $\sim f_3^{(e)}$, $f_5^{(o)}$ отличны от нуля также при $\mathbf{k}\cdot\mathbf{s} = \mathbf{k}\cdot\mathbf{p} = 0$ когда Δ_s исчезает. Слагаемые с $f_3^{(e)} - g_4^{(o)}$ описывают новый тип ЦД, который обусловлен корреляцией между ориентациями электрона и атома и имеет, таким образом, интерференционную природу. Коэффициенты $g^{(\alpha)}_{1-4}$ включают только нечетные мультиполи состояния и «интерференционный» ЦД отличен от нуля даже в случае $\mathbf{a}\|\mathbf{p}$, $\mathbf{k}\perp\mathbf{s}$, $\mathbf{k}\perp\mathbf{a}$, когда «обычный» дихроизм исчезает.

Полное сечение включает векторы $\mathbf{e}$, $\mathbf{e}^*$, $\mathbf{s}$ и, следовательно общее выражение для $\sigma(\mathbf{s},\mathbf{a})$ при произвольной поляризации фотона можно представить в следующей удобной форме

$$\begin{aligned}\sigma(\mathbf{s},\mathbf{a}) = \frac{1}{2}\Big(\sigma(\mathbf{a}) + \xi\,\gamma\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}\Big) + \delta_1\,\mathbf{a}\cdot\mathbf{s} + \delta_2\,\xi\mathbf{k}\cdot[\mathbf{s}\times\mathbf{a}] \\ + \delta_3\,\xi\big(3(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})(\mathbf{s}\cdot\mathbf{a}) - \mathbf{k}\cdot\mathbf{s}\big) + \delta_4\,\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{a})(\mathbf{e}^*\cdot[\mathbf{s}\times\mathbf{a}])\} \\ + \delta_5\,\big(\mathbf{s}\cdot\mathbf{a})(3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{a}|^2 - 1\big) + \delta_6\,\big(3\,\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{a})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{s})\} - \mathbf{a}\cdot\mathbf{s}\big). \quad (3.17)\end{aligned}$$

Так, в дополнение к γ, γ', β', здесь возникают шесть новых параметров δ_i, которые включают атомные мультиполи состояния вплоть до третьего ранга. Слагаемое с δ_2 описывает «интерференционный» ЦД, который достигает максимума при $\mathbf{k} \parallel [\mathbf{s}\times\mathbf{a}]$ в противоположность чистым «электронному» и «атомному» ЦД, которые максимальны при $\mathbf{k} \parallel \mathbf{s}$ и $\mathbf{k} \parallel \mathbf{a}$, соответственно.

В заключение отметим, что при ненулевой поляризации атома интересный эффект состоит в существовании ненулевой степени поляризации фотоэлектрона при нулевой степени циркулярной поляризации фотона. Этот специфический эффект «переноса поляризации» от атома к электрону отличен от нуля даже для неполяризованного фотонного пучка.

3.2.2 Параметры угловых распределений

Количественную проверку вышеизложенного и явный вид зависящих от $\cos\theta$ параметров можно получить при прямом анализе стандартного квантовомеханического выражения для $d\sigma$ в первом порядке теории возмущений. Однако, общую форму $d\sigma$ легко получить и без детальных вычислений. Действительно, используя определения (3.6) - (3.8) и учитывая, что любое тройное разложение по сферическим функциям трех направлений можно представить как разложение по триполярным гармоникам [4], мы приходим к следующему общему выражению

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \sigma\ \sqrt{2J_0+1}\sum_{r=0}^{2J_0}\rho^a_{r0}\sum_{p=0}^{2}\sum_{q,s,h}\beta^{hp}_{qsr}\left\{\left\{Y_q(\mathbf{p})\otimes\widetilde{Y}_s(\mathbf{s})\right\}_h\otimes Y_r(\mathbf{a})\right\}_p\cdot T_p(\mathbf{e},\mathbf{e}^*) \tag{3.18}$$

с независящими от углов атомными факторами β, которые определяются характеристиками конкретного атома (схемой связи, моментом J_0, другими квантовыми числами γ_0 и т.п.). Здесь σ – полное сечение, $\beta^{00}_{000} = 1$ и индекс q пробегает вследствие закона сохранения четности только четные значения.

Аккуратный вывод равенства (3.18) и явные выражения для параметров β приведены в работе [49] (см. также [44]) в наиболее общем случае, с учетом эффектов сверхтонкой структуры. Пренебрегая для простоты сверхтонкой структурой, имеем

$$\sigma = \frac{4\pi^2\alpha\omega}{3(2J_0+1)}\sum_{ljJ}\Big|\left\langle\gamma_f J_f(lj);J\right\|\mathbf{D}\left\|\gamma_0 J_0\right\rangle\Big|^2,\ \ \beta^{hp}_{qsr} = B^{hp}_{qsr}/B^{00}_{000}, \tag{3.19}$$

$$\begin{aligned}B^{hp}_{qsr} = \sqrt{\frac{2}{3(p+1)}}&\sum_{\gamma_f J_f JlJ'l'jj'}(-1)^{J_f+J+l+j+r+s}\Pi_{hspll'jj'JJ'}C^{q0}_{l0l'0}\\ &\times\begin{Bmatrix} J_f & J & j\\ h & j' & J'\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j & \frac{1}{2} & l\\ j' & \frac{1}{2} & l'\\ h & s & q\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} J_0 & 1 & J\\ J_0 & 1 & J'\\ r & p & h\end{Bmatrix}\\ &\times\left\langle\gamma_f J_f lj:J\right\|\mathbf{D}\left\|\gamma_0 J_0\right\rangle\left\langle\gamma_f J_f l'j':J'\right\|\mathbf{D}\left\|\gamma_0 J_0\right\rangle^*.\end{aligned} \tag{3.20}$$

Здесь γ_f, J_f, есть квантовые числа фотоиона. Дипольный матричный элемент в наших обозначениях включает фазовый фактор $i^l\exp(-i\delta_{jl})$, который содержат волновые функции континуума с фазами рассеяния δ_{jl}. Учитывая фазовый фактор, легко проверить, что B^{hp}_{qsr} действительное число, если $(p+r+s)$ – четное и чисто мнимое, если $(p+r+s)$ – нечетное. В последнем случае $\operatorname{Im} B$ содержит Т-нечетный фактор $\sin(\delta_{j'l'} - \delta_{jl})$ и поэтому эти атомные параметры исчезают в борновском приближении для волновых функций вылетающего электрона.

В наиболее общем случае $J_0 \geq 2$ (3.18) включает 37 различных триполярных гармоник, которые, сворачиваясь с тензором $T_{pm}(\mathbf{e}, \mathbf{e}^*)$, образуют 37 различных векторных конструкций в соответствии с качественным анализом раздела 3.2.1. Использование формул приведения типа (2.25), (.1) - (.5) кардинально упрощает выражение для $d\sigma(\mathbf{a}, \mathbf{s})/d\Omega_{\mathbf{p}}$, которое поэтому может быть записано в терминах скалярных и смешанных произведений векторов $\mathbf{a}$, $\mathbf{p}$, $\mathbf{s}$, $\mathbf{e}$, $\mathbf{e}^*$, с полиномами от $\cos\theta \equiv \mathbf{a} \cdot \mathbf{p}$ в качестве коэффициентов.

Параметры полного сечения (3.15), (3.17) имеют простую форму при любых J_0. Пусть $\mathcal{A}^p_{sr} \equiv 4\pi^2 \alpha\omega B^{sp}_{0sr}\ \rho^a_{r0}$, тогда мы имеем

$$\gamma' = \sqrt{3}\mathcal{A}^1_{01}, \ \ \beta' = -\sqrt{6}\mathcal{A}^2_{02}, \ \ \delta_1 = -\mathcal{A}^0_{11}, \ \ \delta_2 = i\sqrt{\frac{3}{2}}\mathcal{A}^1_{11},$$

$$\delta_3 = \frac{1}{3\sqrt{2}}\mathcal{A}^1_{12}, \ \ \delta_4 = -i3\mathcal{A}^2_{12}, \ \ \delta_5 = \sqrt{\frac{5}{2}}\mathcal{A}^2_{13}, \ \ \delta_6 = -\frac{1}{\sqrt{5}}\left(\sqrt{3}\mathcal{A}^2_{11} + \sqrt{2}\mathcal{A}^2_{13}\right).$$

Ниже представлены результаты для некоторых интересных случаев угловых распределений

(а) *неполяризованный атом, поляризованный электрон.* В этом простейшем случае мы имеем $r = 0$, $h = p$, $q = 0, 2$ в (3.18), которое сразу переходит в выражение (3.12) и приведение мультиполярных гармоник здесь не требуется. В этом случае отличны от нуля

$$\mathcal{B}^p_{qs} \equiv 4\pi^2 \alpha\omega B^{pp}_{qs0}/\sqrt{2J_0 + 1}$$

только пять атомных факторов, которые определяют пять атомных параметров (3.10), (3.12)

$$\sigma = \mathcal{B}^0_{00}, \quad \beta = -\sqrt{6}\frac{\mathcal{B}^2_{20}}{\mathcal{B}^0_{00}}, \quad \gamma = 2\mathcal{B}^1_{01}, \quad \gamma_1 = -\sqrt{2}\mathcal{B}^1_{21}, \quad \gamma_2 = i6\mathcal{B}^2_{21}. \tag{3.21}$$

Явный вид этих параметров для конкретных схем связи исследован в работе [30].

(б) *поляризованный атом, неполяризованный электрон.* В этом случае мы имеем $s = 0, q = h$ в (3.18) и $d\sigma(\mathbf{a})/d\Omega_{\mathbf{p}}$ включает только биполярные гармоники от векторов $\mathbf{a}$, $\mathbf{p}$, которые представлены в приложении B. Используя обозначение

$$B^{qp}_{q0r} \equiv B^p_{qr}, \ \ \sigma^{(\alpha)}_i = 12\pi^2 \alpha\omega C^{(\alpha)}_i,$$

окончательное выражение для параметров углового распределения (3.14) можно представить в следующем удобном виде

$$\begin{aligned}
C_0^{(e)} &= \frac{1}{3} \sum_{r=0,\mathrm{even}}^{2J_0} \rho^a_{r0}\sqrt{2r+1}B^0_{rr}\; P_r(x), && (3.22)\\
C_1^{(1,e)} &= \sum_{r=1,\mathrm{odd}}^{2J_0} \rho^a_{r0}\Big(\sum_{q=r\pm1}\sqrt{\frac{1}{3\max(q,r)}}B^1_{q\,r}\Big)P^{(1)}_r(x), && (3.23)\\
C_1^{(1,o)} &= -\sum_{r=1,\mathrm{odd}}^{2J_0} \rho^a_{r0}\sum_{q=r\pm1}\sqrt{\frac{1}{3\max(q,r)}}B^1_{q\,r}\; P^{(1)}_q(x), && (3.24)\\
C_1^{(2,o)} &= \sum_{r=2,\mathrm{even}}^{2J_0} \rho^a_{r0}\sqrt{\frac{2r+1}{3r(r+1)}}\;\mathrm{Im}\, B^1_{r\,r}\, P^{(1)}_r(x), && (3.25)\\
C_2^{(1,e)} &= \sum_{r=1,\mathrm{odd}}^{2J_0} \rho^a_{r0}\sum_{q=r\pm1}\sqrt{\frac{2}{qr(\max(q,r)+1)}}\,\mathrm{Im}\, B^2_{q\,r}\, P^{(2)}_q(x), && (3.26)\\
C_2^{(1,o)} &= -\sum_{r=3,\mathrm{odd}}^{2J_0} \rho^a_{r0}\Big(\sum_{q=r\pm1}\sqrt{\frac{2}{qr(\max(q,r)+1)}}\,\mathrm{Im}\, B^2_{q\,r}\Big)P^{(2)}_r(x), && (3.27)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_2^{(2,e)} &= -\sum_{r=0,\mathrm{even}}^{2J_0} \rho^a_{r0}\sum_{q=r,r\pm2} b(q,r)\, P^{(2)}_q(x), && (3.28)\\
C_2^{(3,e)} &= -\sum_{r=2,\mathrm{even}}^{2J_0} \rho^a_{r0}\Big(\sum_{q=r,r\pm2} b(q,r)\Big)P^{(2)}_r(x), && (3.29)\\
C_2^{(2,o)} &= \sum_{r=2,\mathrm{even}}^{2J_0} \rho^a_{r0}\Big(b(r,r)(P^{(1)}_r(x)+2xP^{(2)}_r(x)) \\
&\quad +2\sum_{q=r\pm2} b(q,r)\, P^{(2)}_{(r+q)/2}(x)\Big). && (3.30)
\end{aligned}$$

Здесь

$$b(r,r) = \sqrt{\frac{2(2r+1)}{3(2r-1)r(r+1)(2r+3)}}B^2_{rr},$$

$$b(q,r)\Big|_{q=r\pm2} = \frac{1}{3\sqrt{\max(q,r)(\max(q,r)-1)(2\max(q,r)-1)}}B^2_{qr} \quad (3.31)$$

Отметим высокую симметрию и регулярную структуру равенств (3.14), (3.22) – (3.30). Важно, что каждый параметр $\sigma_i^{(\alpha)}$ включает мультиполи состояния ρ^a_{r0} одинаковой четности. Так, пять членов в (3.14) ($\sigma_0^{(e)}$, $\sigma_1^{(2,o)}$, $\sigma_2^{(2,o)}$, $\sigma_2^{(2,e)}$, $\sigma_2^{(3,e)}$) содержат ρ^a_{r0} с четными r и оставшиеся четыре содержат нечетные мультиполи состояния.

Наряду с (3.14), для некоторых задач полезна следующая форма записи сечения (ср. (3.18))

$$\frac{d\sigma(\mathbf{a})}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} + \pi\alpha\omega\sum_{r=1}^{2J_0}\rho^a_{r0}\chi_r(\mathbf{a},\mathbf{p};\mathbf{e},\mathbf{e}^*). \quad (3.32)$$

Явный вид χ_r может быть получен из представленных выше результатов.

В качестве примера, ниже представлен вклад мультиполей состояния с $r = 1, 2, 3$

$$\chi_1(\mathbf{a}, \mathbf{p}, \mathbf{e}, \mathbf{e}^*) = a_1\xi(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}) + b_1\xi\big(3(\mathbf{k}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}) - \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}\big) \\ + c_1\,\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}^*\cdot[\mathbf{p}\times\mathbf{a}])\}, \quad (3.33)$$

$$\chi_2(\mathbf{a}, \mathbf{p}, \mathbf{e}, \mathbf{e}^*) = a_2\big(3\cos^2\theta - 1\big) + b_2\xi(\mathbf{a}\cdot\mathbf{p})\big(\mathbf{k}\cdot[\mathbf{a}\times\mathbf{p}]\big) + c_2\big(3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{a}|^2 - 1\big) \\ + \big(d_2 + e_2\cos^2\theta\big)\big(3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{p}|^2 - 1\big) + f_2(\mathbf{a}\cdot\mathbf{p})\big(3\,\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{a})\} - (\mathbf{a}\cdot\mathbf{p})\big), \quad (3.34)$$

$$\chi_3(\mathbf{a}, \mathbf{p}, \mathbf{e}, \mathbf{e}^*) = a_3\xi\big(5\cos^2\theta - 1\big)(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}) + \xi\big(b_3 + c_3\cos^2\theta\big)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}) \\ + d_3(\mathbf{a}\cdot\mathbf{p})\,\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{a})(\mathbf{e}^*\cdot[\mathbf{p}\times\mathbf{a}])\} + \big(e_3 + f_3\cos^2\theta\big)\,\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}^*\cdot[\mathbf{p}\times\mathbf{a}])\}. \quad (3.35)$$

$\cos\theta \equiv \mathbf{a}\cdot\mathbf{p}$. Параметры $a_1, \ldots, f_3$ являются комбинацией 14 различных B^p_{qr}-факторов

$$a_1 = \sqrt{3}B^1_{01}; \quad b_1 = -\sqrt{\frac{3}{2}}B^1_{21}; \quad c_1 = 3\sqrt{3}\,\mathrm{Im}\,B^2_{21};$$

$$a_2 = \frac{\sqrt{5}}{2}B^0_{22}; \quad b_2 = -3\sqrt{\frac{5}{2}}\,\mathrm{Im}\,B^1_{22};$$

$$c_2 = -\sqrt{3}\Big(\frac{1}{\sqrt{2}}B^2_{02} + \sqrt{\frac{5}{7}}B^2_{22} + \frac{1}{2\sqrt{7}}B^2_{42}\Big);$$

$$d_2 = \sqrt{\frac{5}{21}}\left(\frac{\sqrt{5}}{4}B^2_{42} - B^2_{22}\right); \quad e_2 = -\frac{5}{4}\sqrt{\frac{7}{3}}B^2_{42};$$

$$f_2 = \sqrt{\frac{15}{7}}\left(3B^2_{22} + \sqrt{5}B^2_{42}\right);$$

$$a_3 = \frac{3}{2}\left(B^1_{23} + \frac{\sqrt{3}}{2}B^1_{43}\right); \quad b_3 = \sqrt{3}\left(\frac{15}{4}B^1_{43} - \sqrt{3}B^1_{23}\right); \quad c_3 = -\frac{35}{4}\sqrt{3}B^1_{43};$$

$$d_3 = -3\sqrt{\frac{15}{2}}\,\mathrm{Im}\left(B^2_{43} + \sqrt{\frac{5}{2}}B^2_{23}\right); \quad e_3 = \frac{3\sqrt{3}}{2}\,\mathrm{Im}\left(B^2_{23} - \sqrt{\frac{5}{2}}B^2_{43}\right);$$

$$f_3 = \frac{21}{2}\sqrt{\frac{15}{2}}\,\mathrm{Im}\,B^2_{43}\,.$$

Эти формулы необходимы для детального анализа угловых распределений в случае $J_0 = 3/2$, который был неполно рассмотрен в работах [20, 31]. Для $J_0 = 1/2$ только χ_1 отлично от нуля, и атомные параметры a_1, b_1, c_1 аналогичны электронным параметрам γ, γ_1, γ_2 в (3.12). Форма χ_r с $r \geq 3$ очевидна: члены χ_r с четными и нечетными r имеют ту же векторную структуру что и в (3.34) и (3.35) соответственно, но с более сложной зависимостью от $\cos^2\theta$. Этот комментарий согласуется с указанными выше особенностями феноменологического выражения (3.14).

(в) *дихроизм в случае поляризованного электрона и поляризованного атома.* Для произвольного J_0 общее выражение для $d\sigma(\mathbf{a},\mathbf{s})/d\Omega_{\mathbf{p}}$ довольно длинно, хотя и может быть выписано в явном виде с учетом выражений типа (2.25) для триполярных гармоник ранга два. Ниже представлены только результаты для параметров ЦД в (3.16). Как видно из (3.18), ЦД в данном случае описывают только триполярные гармоники ранга $p = 1$, которые можно легко вычислить в соответствии с результатами раздела 2.2.

Параметр Δ – сумма «электронного», Δ_s, «атомного», Δ_a, и «комбинированного», Δ_{sa}, дихроизмов. Последний описывает комбинированные эффекты электронной и атомной поляризации. Параметры γ, γ_1 и $\sigma_1^{(i,\alpha)}$ в (3.16) – те же самые, что и в (3.21), (3.22), и описывают Δ_s и Δ_a.

Комбинированный дихроизм Δ_{sa} можно представить в виде, аналогичном (3.32)

$$\Delta_{sa}(\mathbf{a},\mathbf{s},\mathbf{k},\mathbf{p}) = \frac{\xi}{4\pi}\mathbf{k}\cdot\Big(\sum_{r=2,4,\ldots}^{2J_0}\rho^a_{r0}\,\boldsymbol{\Delta}^{(o)}_r(\mathbf{a},\mathbf{s},\mathbf{p}) + \sum_{r=1,3,\ldots}^{2J_0}\rho^a_{r0}\,\boldsymbol{\Delta}^{(e)}_r(\mathbf{a},\mathbf{s},\mathbf{p})\Big). \tag{3.36}$$

Здесь T-нечетный аксиальный вектор $\boldsymbol{\Delta}^{(o)}_r$ определяют поправки к Δ_s, Δ_a, обусловленные эффектами типа выстраивания

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Delta}^{(o)}_r = \Big([\mathbf{a}\times[\mathbf{s}\times\mathbf{p}]]\alpha_r - 2\mathbf{a}(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p})d_r\Big)P^{(1)}_r(x)&\\ + \Big([\mathbf{a}\times\mathbf{p}]\big(\mathbf{s}\cdot[\mathbf{p}\times\mathbf{a}]\big)\alpha_r - \mathbf{a}(\mathbf{s}\cdot\mathbf{a})d_t\Big)P^{(2)}_r(x)&\\ + \sum_{h=r\pm1}c_h\Big(\mathbf{s}P^{(1)}_h(x) + \mathbf{p}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{s})P^{(2)}_h(x)\Big) + &\\ \mathbf{a}(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p})\sum_{h=r,r\pm1}d_hP^{(2)}_h(x) - \mathbf{p}(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p})\sum_{h=r\pm2}d_hP^{(2)}_h(x).&\end{aligned} \tag{3.37}$$

Здесь

$$d_r = \sum_{h=r\pm1}\alpha^h_r,\ \ d_{r\pm1} = \alpha^{r+1}_{r+1\pm1} + \alpha^{r-1}_{r-1\pm1},$$
$$d_{r\pm2} = \alpha^{r\pm1}_{r\pm2},\ \ d_t = \sum_{h=r,r\pm2}d_h,\ \ c_h = \sum_{q=h\pm1}\alpha^h_q.$$

T-четный аксиальный вектор $\boldsymbol{\Delta}^{(e)}$ описывает «интерференционный» ЦД

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Delta}^{(e)}_r = \sum_{h=r\pm1}\Big[\beta^r_h\Big([\mathbf{a}\times\mathbf{s}]P^{(1)}_r(x) + [\mathbf{a}\times\mathbf{p}](\mathbf{a}\cdot\mathbf{s})P^{(2)}_r(x)&\\ - [\mathbf{a}\times\mathbf{p}](\mathbf{p}\cdot\mathbf{s})P^{(2)}_h(x)\Big) + \beta^h_h\Big([\mathbf{p}\times\mathbf{s}]P^{(1)}_h(x)&\\ + \mathbf{a}\big(\mathbf{s}\cdot[\mathbf{p}\times\mathbf{a}]\big)P^{(2)}_r(x) - \mathbf{p}\big(\mathbf{s}\cdot[\mathbf{p}\times\mathbf{a}]\big)P^{(2)}_h(x)\Big)\Big].&\end{aligned} \tag{3.38}$$

и содержит T-нечетный фактор $\sin(\delta_{j'l'} - \delta_{jl})$). Таким образом, «интерференционный» ЦД исчезает в борновском приближении.

Используя обозначения

$$\alpha_r = \sqrt{3}\pi\alpha\omega\frac{\sqrt{2r+1}}{r(r+1)}B^{r1}_{r1r}, \quad \alpha^h_q = \frac{\sqrt{3}\pi\alpha\omega B^{h1}_{q1r}}{\sqrt{(2h+1)\max(q,h)\max(r,h)}},$$

$$\beta^h_q = \frac{\sqrt{3}\pi\alpha\omega\,\mathrm{Im}\,B^{h1}_{q1r}}{\sqrt{h(h+1)\max(r,q)}}.$$

параметры f_i и g_i «комбинированного» дихроизма можно представить в следующем виде

$$\begin{aligned} f^{(e)}_1 &= \sum_{r=2,\mathrm{even}}^{2J_0}\rho^a_{r0}\Big[\alpha_r\big(xP^{(1)}_r(x)-(1-x^2)P^{(2)}_r(x)\big) \\ &\quad + \sum_{h=r\pm1}P^{(1)}_h(x)\sum_{q=h\pm1}\alpha^h_q\Big], \end{aligned} \tag{3.39}$$

$$f^{(e)}_2 = \sum_{r=2,\mathrm{even}}^{2J_0}\rho^a_{r0}\Big[\alpha_r P^{(2)}_r(x) - \sum_{h=r\pm1}\sum_{q=h\pm1}\alpha^h_q P^{(2)}_q(x)\Big], \tag{3.40}$$

$$f^{(e)}_3 = \sum_{r=2,\mathrm{even}}^{2J_0}\rho^a_{r0}\,P^{(2)}_r(x)\Big[\alpha_r - \sum_{h=r\pm1}\sum_{q=h\pm1}\alpha^h_q\Big], \tag{3.41}$$

$$\begin{aligned} f^{(o)}_4 &= -\sum_{r=2,\mathrm{even}}^{2J_0}\rho^a_{r0}\Big[\alpha_r\big(P^{(1)}_r(x) \\ &\quad +xP^{(2)}_r(x)\big) - \sum_{h=r\pm1}P^{(2)}_h(x)\sum_{q=h\pm1}\alpha^h_q\Big], \end{aligned} \tag{3.42}$$

$$\begin{aligned} f^{(o)}_5 &= -x\,f^{(e)}_3 + \sum_{r=2,\mathrm{even}}^{2J_0}\rho^a_{r0}P^{(1)}_r(x) \\ &\quad \times\sum_{h=r\pm1}\sum_{q=h\pm1}(h-q)\max(h,q)\alpha^h_q, \end{aligned} \tag{3.43}$$

$$g^{(e)}_1 = -\sum_{r=1,\mathrm{odd}}^{2J_0}\rho^a_{r0}P^{(1)}_r(x)\sum_{h=r\pm1}\beta^r_h, \tag{3.44}$$

$$g^{(e)}_2 = \sum_{r=1,\mathrm{odd}}^{2J_0}\rho^a_{r0}\sum_{h=r\pm1}\beta^r_h\Big(P^{(2)}_{2r-h}(x) - 3P^{(1)}_r(x)\Big), \tag{3.45}$$

$$g^{(e)}_3 = \sum_{r=1,\mathrm{odd}}^{2J_0}\rho^a_{r0}\sum_{h=r\pm1}\sqrt{\frac{h}{\max(r,h)}}\beta^h_h P^{(2)}_h(x), \tag{3.46}$$

$$g^{(o)}_4 = -\sum_{r=3,\mathrm{odd}}^{2J_0}\rho^a_{r0}P^{(2)}_r(x)\sum_{h=r\pm1}\sqrt{\frac{h}{\max(r,h)}}\beta^h_h. \tag{3.47}$$

Замечания относительно (3.22), (3.32) здесь также остаются в силе. При фиксированном ранге r мультиполей состояния параметры f, g содержат 9 атомных параметров α, β, включающих 9 различных факторов B^{h1}_{q1r} вместе с девятью линейно независимыми угловыми функциями.

(г) *поляризованный атом с* $J_0 = 1/2$ *и поляризованный электрон*. Даже в этом простейшем случае, без конкретизации структуры состояния $|\gamma_0 J_0>$, $d\sigma(\mathbf{a},\mathbf{s})/d\Omega_{\mathbf{p}}$ содержит 18 различных факторов B^{hp}_{qsr} с $r,s=0,1$, вместе с соответствующими угловыми функциями. В случае одноэлектронного состояния проблема упрощается, поскольку отличны от нуля только два радиальных матричных элемента $\rho_{j'l'} =< \epsilon l'j'|r|\gamma_0 l\frac{1}{2} >$ и, поэтому, только четыре атомных параметра входят в сечение.

Для оболочки $s_{\frac{1}{2}}$ эти параметры

$$d_1=|\rho_{\frac{1}{2}1}|^2,\quad d_2=|\rho_{\frac{3}{2}1}|^2,\quad d_3=\rho_{\frac{1}{2}1}\rho_{\frac{3}{2}1}\cos\Delta,\quad d_4=\rho_{\frac{1}{2}1}\rho_{\frac{3}{2}1}\sin\Delta,$$

где $\Delta=\delta_{\frac{1}{2}1}(\epsilon)-\delta_{\frac{3}{2}1}(\epsilon)$, – разность фазовых сдвигов фотоэлектронов.

Для оболочки $p_{\frac{1}{2}}$:

$$d'_1=|\rho_{\frac{1}{2}0}|^2,\quad d'_2=|\rho_{\frac{3}{2}2}|^2,\quad d'_3=\rho_{\frac{1}{2}0}\rho_{\frac{3}{2}2}\cos\Delta',\quad d'_4=\rho_{\frac{1}{2}0}\rho_{\frac{3}{2}2}\sin\Delta',$$

где $\Delta'=\delta_{\frac{1}{2}0}(\epsilon)-\delta_{\frac{3}{2}2}(\epsilon)$.

В рассматриваемых случаях вычисление тензорных произведений в (3.18) упрощается, и окончательные результаты могут быть выписаны только через параметры (3.21) случая поляризованного электрона. Таким образом, для оболочки $s_{\frac{1}{2}}$ мы находим

$$\begin{aligned}
d\sigma_{s_{\frac{1}{2}}}(\mathbf{j},\mathbf{s})/d\Omega_{\mathbf{p}} = \frac{1}{8\pi}\Big\{\sigma\Big[1+\beta\frac{3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{p}|^2-1}{2}\Big](1+4\mathbf{j}\cdot\mathbf{s})\\
+\xi\Big\{(\gamma-\gamma_1)(\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}+\mathbf{k}\cdot\mathbf{j})+3\gamma_1(\mathbf{k}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p})-(2\gamma+\gamma_1)(\mathbf{k}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{j}\cdot\mathbf{p})\\
+\gamma_2[\mathbf{k}\times\mathbf{p}]\cdot[\mathbf{p}\times[\mathbf{j}\times\mathbf{s}]]\Big\}+\gamma_2\,\mathrm{Re}\Big\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})\big(\mathbf{e}^*\cdot[\mathbf{s}\times\mathbf{p}]\big)+(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})\big(\mathbf{e}^*\cdot[\mathbf{j}\times\mathbf{p}]\big)\Big\}\\
\\
-4(\gamma+2\gamma_1)\big\{\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{j})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{s})\}+(\mathbf{p}\cdot\mathbf{j})(\mathbf{p}\cdot\mathbf{s})\big\}\\
+12\gamma_1(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p})\,\mathrm{Re}\big\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{j})\big\}+4(2\gamma+\gamma_1)(\mathbf{j}\cdot\mathbf{p})\,\mathrm{Re}\big\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{s})\big\}\Big\}. \quad (3.48)
\end{aligned}$$

Здесь $\mathbf{j}=\overline{M_0}\mathbf{a}$ – средний угловой момент ориентированного атома.

$$\sigma_0\equiv\frac{4}{9}\pi^2\alpha\omega,\qquad \sigma=\sigma_0(d_1+2d_2),\qquad \sigma\,\beta=2\sigma_0(d_2+2d_3),$$

$$\gamma=\frac{2}{3}\sigma_0(5d_2-d_1-4d_3),\qquad \gamma_1=\frac{2}{3}\sigma_0(2d_1-d_2-d_3),\qquad \gamma_2=-12\sigma_0\,d_4.$$

Полное сечение есть

$$\begin{aligned}
\sigma_{s_{\frac{1}{2}}}(\mathbf{j},\mathbf{s})=\frac{1}{2}\sigma(1+4\mathbf{j}\cdot\mathbf{s})+\frac{1}{2}\xi\big(\gamma\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}+\frac{1}{3}(\gamma-4\gamma_1)\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}+\frac{2}{3}\gamma_2\,\mathbf{k}\cdot[\mathbf{s}\times\mathbf{j}]\big)\\
-\frac{2}{3}(\gamma+2\gamma_1)\big(3\,\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{j})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{s})\}-\mathbf{j}\cdot\mathbf{s}\big). \quad (3.49)
\end{aligned}$$

Приведенные выше выражения обладают очевидными трансформацинными свойствами при $\mathbf{s}\to 0$ или $\mathbf{j}\to 0$. Хотя хорошо известно [49], что равенства (3.12), (3.14), (3.48) при $J_0=1/2$ дают одинаковую информацию об атомных параметрах, выражение (3.48) обладает некоторыми интересными особенностями. Для начала отметим, что корреляция между ориентациями атома и электрона описывается фактором $(1+4\mathbf{j}\cdot\mathbf{s})$ в $d\sigma/d\Omega_{\mathbf{p}}$. Этот фактор имеет кинематическую природу и в случае $S_{1/2}$ состояния его можно получить, пренебрегая спин-орбитальным взаимодействием. Таким образом, эффект «переноса поляризации», обсуждавшийся в разделе 3.2.1 не мал и отличен от нуля даже в пренебрежении эффектами тонкой структуры, когда параметры γ,$\gamma_{1,2}$ электронной поляризации исчезают. Далее, члены с ξ в (3.48) описывают циркулярный дихроизм, член с $\xi\gamma_2$ соответствует «интерференционному» ЦД, обсуждавшемуся в разделе 3.2.1. Поэтому, в отличие от случая $\mathbf{j}=0$ или $\mathbf{s}=0$, все параметры $\gamma,\gamma_{1,2}$ могут быть определены только из измерений дихроизма в случае поляризованных и электрона, и атома.

Результаты для $p_{1/2}$-состояния более сложны

$$
\begin{aligned}
d\sigma_{p_{\frac{1}{2}}}(\mathbf{j},\mathbf{s})/d\Omega_{\mathbf{p}} = \frac{1}{8\pi}\Big\{&\sigma\Big[1+\beta\frac{3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{p}|^2-1}{2}\Big](1-4\mathbf{j}\cdot\mathbf{s}) \\
&+\xi\Big[\gamma\,\mathbf{k}\cdot(\mathbf{s}-\mathbf{j})+\gamma_1\Big(3(\mathbf{k}\cdot\mathbf{p})\big(\mathbf{p}\cdot(\mathbf{s}-\mathbf{j})\big)-\mathbf{k}\cdot(\mathbf{s}-\mathbf{j})\Big) \\
&\quad+\gamma_2\Big((\mathbf{s}\cdot\mathbf{p})\big(\mathbf{k}\cdot[\mathbf{j}\times\mathbf{p}]\big)+(\mathbf{j}\cdot\mathbf{p})\big(\mathbf{k}\cdot[\mathbf{s}\times\mathbf{p}]\big)\Big)\Big] \\
&+\gamma_2\,\mathrm{Re}\Big\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})\big(\mathbf{e}^*\cdot[\mathbf{s}\times\mathbf{p}]\big)-(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})\big(\mathbf{e}^*\cdot[\mathbf{j}\times\mathbf{p}]\big)\Big\}+4(\gamma+2\gamma_1)\,\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{s})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{j})\} \\
&-12\gamma_1\,\mathrm{Re}\Big\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{j})(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p})+(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{s})(\mathbf{j}\cdot\mathbf{p})\Big\} \\
&+12(2\sigma-\gamma)\Big(|\mathbf{e}\cdot\mathbf{p}|^2(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{j}\cdot\mathbf{p})+\frac{1}{54}\mathbf{j}\cdot\mathbf{s}\Big)\Big\}. \qquad (3.50)
\end{aligned}
$$

Здесь

$$
\sigma=\sigma_0(d_1'+2d_2'),\quad \sigma\,\beta=2\sigma_0(d_2'+2d_3'),
$$

$$
\gamma=2\sigma_0(d_1'-d_2'),\quad \gamma_1=2\sigma_0(d_2'-d_3'),\quad \gamma_2=12\sigma_0\,d_4'.
$$

Угловое распределение (3.50) существенно отличается от (3.48). Это проявляется, в частности, в наличии в (3.50) члена с четырьмя векторами $\mathbf{p}$, появляющегося в результате вклада $d-$волны фотоэлектрона. Отличается также угловая зависимость «интерференционного» ЦД-члена: в случае состояния $s_{1/2}$ этот член пропадает при $\mathbf{j}\parallel\mathbf{s}$, а в случае состояния $p_{1/2}$ его вклад максимален при $\mathbf{j}\parallel\mathbf{s}$. Более того, в последнем случае в (3.50) исчезают все другие члены с ЦД и остается только «интерференционный» ЦД-член.

Полное сечение $\sigma_{p_{1/2}}(\mathbf{j},\mathbf{s})$ есть

$$
\sigma_{p_{1/2}}(\mathbf{j},\mathbf{s})=1/2\Big(\sigma+\xi\gamma\,\mathbf{k}\cdot(\mathbf{s}-\mathbf{j})\Big)+\frac{2}{9}\gamma\,\mathbf{j}\cdot\mathbf{s}+\frac{2}{5}(4\sigma+3\gamma)\Big(\mathrm{Re}\{(\mathbf{e}\cdot\mathbf{j})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{s})\}-\frac{11}{18}\mathbf{j}\cdot\mathbf{s}\Big).
$$

Интересно, что в отличие от $s_{1/2}-$состояния, здесь исчезает «интерференционный» ЦД. Более того, полное сечение в этом случае не содержит никаких интерференционных эффектов между $s-$ и $d-$волнами фотоэлектрона и описывается только двумя параметрами σ, γ. Этот эффект обусловлен правилами отбора для ионизации из $|\gamma_0 P1/2\rangle-$ состояния и пропадает для всех других состояний $|\gamma_0 L_0 J_0\rangle$.

В заключение отметим, что выражения (3.48), (3.50) вместе с (3.11), (3.4), (3.5) дают полное кинематические описание фотоионизации любого одноэлектронного атомного состояния $|\gamma_0 L_0 1/2\rangle$ с аккуратным учетом всех поляризационных эффектов. Эти результаты существенно важны для детального предсказания всех поляризационных особенностей фотоионизации на основе измерений для поляризованных либо только атома, либо только электрона.

3.3 Угловое распределение фотоэлектронов в двойной фотоионизации

3.3.1 Общие равенства

В этом разделе рассматривается угловое распределение фотоэлектронов в однофотонной двухэлектронной ионизации атома, усредненное по ориентациям атома с полным угловым моментом $\mathbf{j}_0$, без анализа эффектов спиновой поляризации фотоэлектронов и поляризационных состояний фотоиона с угловым моментом $\mathbf{j}_f$. Как и в разделе 3.2.1, используется электрическое дипольное приближение в калибровке длины.

Пусть $\mathbf{n}_1$ and $\mathbf{n}_2$ – единичные векторы вдоль направлений моментов фотоэлектронов $\mathbf{p}_1$ and $\mathbf{p}_2$ и пусть $\epsilon_1 = p_1^2/2$ – энергия вылетающего электрона в соответствии с соотношением $E_0+\omega = \epsilon_1+\epsilon_2+E_f$. Поляризационное состояние фотона будем описывать тензором $T_{pm}(\mathbf{e},\mathbf{e}^*)$ (3.6).

Феноменологическая структура дифференциального сечения d^3 имеет общий вид (3.9). В нашей задаче $\{\mathbf{n}_a\}$ – направления моментов $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$ вылетающих электронов. Из соображений симметрии ясно, что для $d^3\sigma$ возможны только следующие формы тензоров $A^{(\alpha)}_{pm}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$ в (3.9)

$$A_1 \sim [\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2],\ A_{2m} \sim \{\mathbf{n}_1 \otimes \mathbf{n}_2\}_{2m},\ A^{(1)}_{2m} \sim \{\mathbf{n}_1 \otimes \mathbf{n}_1\}_{2m},\ A^{(2)}_{2m} \sim \{\mathbf{n}_2 \otimes \mathbf{n}_2\}_{2m}.$$

Тензор ранга ноль A_0 – скалярная функция от $\cos\theta \equiv \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2$. Скалярные произведения этих тензоров и T_{pm} вычисляются тривиально, и сечение можно представить в следующем виде

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_{\mathbf{n}_1}\, d\Omega_{\mathbf{n}_2}\, d\epsilon_1} = \sigma_0 + \xi\sigma_1\, \mathbf{k}\cdot[\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2] + \sigma_2\{3\,\mathrm{Re}\,((\mathbf{e}\cdot\mathbf{n}_1)\,(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{n}_2)) - \mathbf{n}_1\cdot\mathbf{n}_2\} \\ + \sigma_2^{(1)}(3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{n}_1|^2 - 1) + \sigma_2^{(2)}(3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{n}_2|^2 - 1). \quad (3.51)$$

Итак, в общем случае сечение включает пять зависящих от θ параметров $\sigma = \sigma(p_1, p_2, \cos\theta)$ и один из них, σ_1, описывает циркулярный дихроизм. Из общих соображений можно получить для σ некоторые соотношения симметрии. В частности,

$$\sigma_2^{(1)}(p_1, p_2) = \sigma_2^{(2)}(p_2, p_1),\ \ \sigma_1(p_1, p_2) = -\sigma_1(p_2, p_1). \quad (3.52)$$

При симметричном разделении энергии, $p_1 = p_2$, мы имеем $\sigma_2^{(1)} = \sigma_2^{(2)}$ и $\sigma_1 = 0$. Таким образом, в этом случае циркулярный дихроизм отсутствует [23] и только три различных параметра σ отличны от нуля.

Если $J_0 = 0$ и угловой момент J_f фотоиона также равен нулю (например, оба электрона находились в s^2- оболочке) общий результат (3.51) упрощается, поскольку в этом случае амплитуда f имеет простой вид и сечение можно представить в виде (см. например [54], где аналогично рассматривалось тормозное излучение)

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_{\mathbf{n}_1}\, d\Omega_{\mathbf{n}_2}\, d\epsilon_1} = \frac{1}{4}\alpha\omega|f|^2,$$

где

$$f = f_1(p_1, p_2, \cos\theta)\,\mathbf{e}\cdot\mathbf{n}_1 - f_2(p_1, p_2, \cos\theta)\,\mathbf{e}\cdot\mathbf{n}_2, \tag{3.53}$$

и справедливо соотношение симметрии $f_2(p_1, p_2, \cos\theta) = -f_1(p_2, p_1, \cos\theta)$. Теперь сечение включает только четыре параметра σ и имеет вид (3.51) вместе с

$$\sigma_0 = \sigma_2^{(1)} + \sigma_2^{(2)} + \sigma_2 \cos\theta. \tag{3.54}$$

В этом случае мы имеем

$$\sigma_1 = \frac{1}{4}\alpha\omega\,\mathrm{Im}\left(f_1^*(p_1, p_2, \cos\theta)\; f_1(p_2, p_1, \cos\theta)\right)$$

и отсутствие дихроизма при $p_1 = p_2$ очевидно.

3.3.2 Угловая зависимость параметров σ

Для получения явного вида параметров σ, необходимо более детальное количественное рассмотрение, в котором главная роль принадлежит разложению двухэлектронного конечного состояния $\left|\Psi^{(-)}_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2}\right\rangle$ по биполярным гармоникам от векторов $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_2$, [23]

$$\left|\Psi^{(-)}_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2}\right\rangle = \sum_{lm}\sum_{l_1 l_2}\left|\Psi^{(-)}_{\epsilon_1\epsilon_2;l_1 l_2 lm}\right\rangle Y^{l_1 l_2}_{lm}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2).$$

Анализ, аналогичный проведенному в работах [24, 47], приводит к следующему общему выражению для сечения

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_{\mathbf{n}_1}\, d\Omega_{\mathbf{n}_2}\, d\epsilon_1} = 4\pi\sum_{p=0}^{2}\sum_{k,k'=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{\sqrt{2k+1}}B^p_{kk'}\left(Y^{kk'}_p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)\cdot T_p(\mathbf{e}, \mathbf{e}^*)\right). \tag{3.55}$$

Здесь $k+k'$ – только четное число и параметры $B^p_{kk'}$ зависят от схемы связи и включают двухэлектронные приведенные матричные элементы оператора дипольного момента $\mathbf{D}$. С учетом эффектов тонкой структуры они представлены в работе [47]. В более простом нерелятивистском случае мы имеем

$$B^p_{kk'} = \frac{\alpha\omega}{4} \sum_{JJ'll'l_1l_1'l_2l_2'} \frac{(-1)^{1+k+l_1'+l_2'+l'+J_0+J_f}}{2(2J_0+1)\sqrt{3(p+1)}} \Pi_{ll'JJ'l_1l_1'l_2l_2'pk}\, C^{k0}_{l_10l_1'0} C^{k'0}_{l_20l_2'0}$$

$$\times \left\{ \begin{array}{ccc} 1 & 1 & p \\ J' & J & J_0 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} l' & l & p \\ J & J' & J_f \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} l & l' & p \\ l_1 & l_1' & k \\ l_2 & l_2' & k' \end{array} \right\}$$

$$\times \left[\langle J_f(l_1l_2)l; J||\mathbf{D}||J_0\rangle \langle J_f(l_1'l_2')l' : J'||\mathbf{D}||J_0\rangle^* + (-1)^p \langle J_f(l_1l_2)l; J||\mathbf{D}||J_0\rangle^* \langle J_f(l_1'l_2')l' : J'||\mathbf{D}||J_0\rangle \right]. \quad (3.56)$$

Здесь l_1, l_2 – орбитальные моменты вылетающих электронов, которые связываются в полный момент J двух электронов и остаточного иона в соответствии со схемой $(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 = \mathbf{l}) + \mathbf{j}_f = \mathbf{j}$. Используя формулы (.1) - (.5) для БГ $Y^{kk'}_{pm}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$, легко вычислить скалярные произведения тензоров в (3.55). Таким образом, окончательное выражение для $\sigma^{(t)}_i$ в (3.51) можно представить в следующем виде

$$\sigma_0 = \sum_{k=0}^{\infty} B^0_{kk} \;\; P_k(\cos\theta), \quad \sigma_1 = \sum_{k=1}^{\infty} \sqrt{\frac{3}{k(k+1)}}\, \mathrm{Im}\, B^1_{kk} P^{(1)}_k(\cos\theta),$$

$$\sigma_2 = \sum_k \left\{ C^k_k \left(P^{(1)}_k(\cos\theta) + 2\cos\theta P^{(2)}_k(\cos\theta) \right) + 2 \sum_{k'=k\pm2} C^{k'}_k P^{(2)}_{(k+k')/2}(\cos\theta) \right\},$$

$$\sigma^{(1)}_2 = -\sum_k \Big(\sum_{k'=k,k\pm2} C^{k'}_k \Big)\; P^{(2)}_k(\cos\theta), \quad \sigma^{(2)}_2 = -\sum_k \sum_{k'=k,k\pm2} C^{k'}_k \; P^{(2)}_{k'}(\cos\theta). \quad (3.57)$$

Здесь

$$C^k_k = \sqrt{\frac{6}{(2k-1)k(k+1)(2k+3)}} B^2_{k,k},$$

$$C^{k'}_k \Big|_{k'=k\pm2} = \frac{1}{\sqrt{(2k+1)\mathrm{max}(k,k')(\mathrm{max}(k,k')-1)(2\mathrm{max}(k,k')-1)}} B^2_{k,k'}.$$

Итак, пять $\theta-$ зависящих параметров $\sigma^{(\alpha)}_i$ включают пять бесконечных наборов «радиальных» атомных факторов, а именно, $B^p_{k,k}$ с $p = 0, 1, 2$ и $B^2_{k,k\pm2}$.

Интегрируя сечение по направлениям одного вылетающего электрона, имеем

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_{\mathbf{n}_1} d\epsilon_1} = \frac{1}{4\pi} \frac{d\sigma}{d\epsilon_1} \left(1 + \beta' \frac{3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{n}_1|^2 - 1}{2} \right),$$

где

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon_1} = (4\pi)^2 B^0_{00}, \quad \beta' = -\sqrt{\frac{6}{5}} \frac{B^2_{20}}{B^0_{00}}.$$

Этот результат аналогичен равенству (3.10) для однократной ионизации.

Отметим, что соотношения симметрии (3.52) можно легко проверить, используя свойства симметрии параметров $B^p_{k,k'}$

$$\frac{(-1)^k}{\sqrt{2k+1}}B^p_{k,k'}(p_2,p_1)=(-1)^p\frac{(-1)^{k'}}{\sqrt{2k'+1}}B^p_{k'k}(p_1,p_2),$$

которые непосредственно следуют из свойств симметрии $3nj-$ коэффициентов в (3.56).

Чтобы продемонстрировать соотношения (3.53), (3.54) в случае $S-$ состояния, удобно использовать «обратное» разложение Клебша-Гордана для биполярных гармоник

$$\Big\{Y^{l_1l_2}_{l}(\mathbf{n}_1,\mathbf{n}_2)\otimes Y^{l_1'l_2'}_{l'}(\mathbf{n}_1,\mathbf{n}_2)\Big\}_{pm}$$
$$=\frac{1}{4\pi}\Pi_{ll'l_1l_1'l_2l_2'}\sum_{kk'}C^{k0}_{l_10l_1'0}C^{k'0}_{l_20l_2'0}\begin{Bmatrix} l & l' & p\\ l_1 & l_1' & k\\ l_2 & l_2' & k'\end{Bmatrix}\;Y^{kk'}_{pm}(\mathbf{n}_1,\mathbf{n}_2). \quad (3.58)$$

Учитывая это соотношение, правила отбора $l=l'=J=J'=1$ при $J_0=J_f=0$, и подставляя (3.56) в (3.55), получаем

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_{\mathbf{n}_1}\,d\Omega_{\mathbf{n}_2}\,d\epsilon_1}=\frac{4}{3}\pi^2\alpha\omega\Big|\sum_{l_1,l_2=l_1\pm1}\Big(\mathbf{e}\cdot Y^{l_1,l_2}_1(\mathbf{n}_1,\mathbf{n}_2)\Big)\langle 0(l_1,l_2)1;1||\mathbf{D}||0\rangle\Big|^2.$$

Используя теперь формулу (B.2), легко проверить соотношения (3.53), (3.54), и мы находим

$$f_1(p_1,p_2,\cos\theta)=\sum_{l_1=0}^{\infty}(-1)^{l_1}\Big(\sum_{l_2=l_1\pm1}\frac{\langle 0(l_1,l_2)1;1||\mathbf{D}||0\rangle}{\sqrt{\max(l_1,l_2)}}\Big)P^{(1)}_{l_1}(\cos\theta). \quad (3.59)$$

Представленный анализ случая $J_0=0$ формально тот же, что и в работе [54], где исследовалось тормозное излучение электрона на атоме в приближении потенциала. И наоборот, равенства (3.51), (3.57) (после подстановки $\xi\to-\xi$ в (3.51)) дают наиболее общий вид углового распределения рассеянного электрона при тормозном излучении на атоме с $J_0\neq0$. Угол θ в этом случае – угол рассеяния, и параметры $B^p_{kk'}$ – комбинации одноэлектронных приведенных дипольных матричных элементов свободно-свободных переходов электрона. Явный вид $B-$ факторов в (3.57) для дифференциального сечения тормозного излучения, $d^3\sigma/d\Omega_{\mathbf{n}_2}\,d\Omega_{\mathbf{k}}\,d\omega$, можно получить стандартными методами

$$B^p_{kk'}\Big|_{bs}=4(\alpha\omega)^3\sum_{l_il_i'l_fl_f'j_ij_i'j_fj_f'}\frac{(-1)^{p+l_i'+l_f+j_i'-j_f-J_0+J_f}(i)^{l_i+l_i'-l_f-l_f'}}{(2J_0+1)\sqrt{3(p+1)}}$$
$$\Pi_{j_ij_i'j_fj_f'l_il_i'l_fl_f'pk}C^{k0}_{l_i0l_i'0}C^{k'0}_{l_f0l_f'0}\begin{Bmatrix} l_i & l_i' & k\\ j_i' & j_i & J_0\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} l_f & l_f' & k'\\ j_f' & j_f & J_f\end{Bmatrix}$$
$$\begin{Bmatrix} j_f & j_f' & k'\\ j_i & j_i' & k\\ 1 & 1 & p\end{Bmatrix}\exp i[\delta_{l_i}(\epsilon_1)-\delta_{l_i'}(\epsilon_1)+\delta_{l_f}(\epsilon_2)-\delta_{l_f'}(\epsilon_2)]$$

$$\langle\epsilon_2,(l_fJ_f):j_f||\mathbf{D}||\epsilon_1,(l_iJ_0):j_i\rangle\langle\epsilon_2,(l'_fJ_f):j'_f||\mathbf{D}||\epsilon_1,(l'_iJ_0):j'_i\rangle^*,$$

где l_i, l_f – орбитальные моменты налетающего и рассеянного электронов, которые связываются с J_0, J_f в полный момент j_i, j_f системы электрон+атом. $\delta_l(\epsilon)$ – фазовый сдвиг. Здесь для простоты пренебрегается спин-орбитальным взаимодействием в непрерывном спектре. Отметим, что приведенные выше результаты справедливы также и в случае «поляризационного» тормозного излучения, когда фотон излучается электронами мишени. Ясно, что $B^p_{kk'}$– факторы в этом случае имеют более сложный вид. В частности, полную амплитуду тормозного излучения на атоме в в $S-$ состоянии [50] можно переписать в виде, аналогичном (3.53), и члены с ЦД могут быть явно выделены как для обычной так и для «поляризационной» или «интерференционной» частей сечения тормозного излучения. В заключение отметим, что параметр σ_1 в (3.51) T-нечетен. Поэтому ЦД-члены во всех случаях обусловлены антиэрмитовыми частями амплитуд рассеяния, и они исчезают в борновском приближении.

3.4 Релятивистская фотоионизация с учетом эффектов запаздывания

3.4.1 Общая структура сечения

Выражение для сечения фотоионизации с учетом эффектов запаздывания и поляризации начального атома и конечного фотоэлектрона можно представить в виде [3]:

$$\frac{d\Sigma}{d\omega} = \mathcal{C}\sum_{\mu\mu' J_f J'_f}\langle\mathbf{p}\,\mu\,|\,\vec{\alpha}\cdot\mathbf{e}\,e^{i\mathbf{kr}}\,|\,\gamma_i J_i M_i\rangle\langle J_i M_i|\rho^a|J_i M'_i\rangle$$
$$\times\langle\mathbf{p}\,\mu'\,|\,\vec{\alpha}\cdot\mathbf{e}\,e^{i\mathbf{kr}}\,|\,\gamma_i J_i M'_i\rangle^*\langle\frac{1}{2}\mu'\,|\,\rho^e\,|\,\frac{1}{2}\mu\rangle,$$

где $\mathcal{C}$ – постоянная, зависящая от нормировки волновой функции непрерывного спектра и т.п.; $\vec{\alpha}$ – матрицы Дирака; ρ^a, ρ^e – операторы матрицы плотности атома и фотоэлектрона, соответственно; $|\mathbf{p}\mu\rangle$ – волновая функция фотоэлектрона, для которой используем мультипольное разложение (для простоты предполагаем, что фотоион имеет нулевой полный момент)

$$|\mathbf{p}\,\mu\rangle = \sqrt{4\pi}\sum_{J_f M_f lm} Y^*_{lm}(\mathbf{p})\,C^{J_f M_f}_{lm\,\frac{1}{2}\mu}\,|\gamma_f J_f M_f\rangle,$$

здесь $\mathbf{p}$ – направление импульса фотоэлектрона; $\gamma_{i,f}$ – энергия и прочие, отличные от J, M квантовые числа системы в начальном и конечном состояниях.

Далее будем использовать стандартные мультипольные разложения векторного потенциала [4]

$$\mathbf{e}e^{i\mathbf{kr}} = 4\pi\sum_{JM\lambda} i^{J-\lambda}\left(\mathbf{e}\cdot\mathcal{Y}^{(\lambda)*}_{JM}(\mathbf{n})\right)\mathbf{a}^{(\lambda)}_{JM}(\omega;\mathbf{r}),$$

где $\mathcal{Y}^{(\lambda)*}_{JM}(\mathbf{n})$ – мультиполи магнитного ($\lambda = 0$) или электрического ($\lambda = 1$) типов. $\mathbf{a}^{\lambda}_{JM}(\omega; \mathbf{r})$ есть комбинация сферических функций Бесселя $j_l(\omega r)$ и векторных сферических гармоник $\mathbf{Y}^{l}_{JM}(\mathbf{r}/|\mathbf{r}|)$,

$$\mathbf{a}^{(0)}_{JM}(\omega; \mathbf{r}) = j_J(kr)\mathbf{Y}^{J}_{JM}(\frac{\mathbf{r}}{r}),$$

$$\mathbf{a}^{(1)}_{JM}(\omega; \mathbf{r}) = \sqrt{\frac{J+1}{2J+1}} j_{J-1}(kr)\mathbf{Y}^{J-1}_{JM}(\frac{\mathbf{r}}{r}) - \sqrt{\frac{J}{2J+1}} j_{J+1}(kr)\mathbf{Y}^{J+1}_{JM}(\frac{\mathbf{r}}{r}).$$

Теперь возможно применить теорему Вигнера-Эккарта, в результате чего получаем, например,

$$\langle \gamma_f J_f M_f | \, \vec{\alpha} \cdot \mathbf{e}\, e^{i\mathbf{kr}} \, | \gamma_i J_i M_i \rangle$$

$$= \frac{4\pi}{\sqrt{2J_i+1}} \sum_{JM\lambda} (-1)^{J+\lambda+1} i^{J-\lambda} C^{J_i M_i}_{JMJ_f M_f} \Big(\mathbf{e} \cdot \mathcal{Y}^{(\lambda)}_{J,M}(\mathbf{n})\Big) \, R^{J\lambda}_{J_f J_i}(\omega).$$

Здесь введено специальное обозначение

$$R^{J\lambda}_{J_f J_i}(\omega) = \langle \gamma_f J_f \| \, \vec{\alpha} \cdot \mathbf{a}^{(\lambda)}_J(\omega; \mathbf{r}) \, \| \gamma_i J_i \rangle$$

для приведенного матричного элемента, который может быть вычислен для каждого конкретного перехода стандартными методами техники углового момента.

Используя далее разложения матрицы плотности начального атомного состояния и поляризационного состояния фотоэлектрона (см. стр. 44), на неприводимые части, после довольно громоздких манипуляций с коэффициентами Клебша-Гордана, приходим к выражению для сечения процесса:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (4\pi)^{\frac{3}{2}} \sum_{J\lambda J'\lambda' kk' rsd} (-1)^k \, \alpha^{J\lambda \, J'\lambda'}_{kk',sdr}(\omega)$$
$$\times \{\{\{Y_{k'}(\mathbf{p}) \otimes \tilde{Y}_s(\mathbf{s})\}_d \otimes \tilde{Y}_r(\mathbf{j})\}_k \otimes T^{J\lambda \, J'\lambda'}_k(\mathbf{e},\mathbf{n})\}_0. \quad (3.60)$$

В (3.60) используются также $\mathbf{s}$ и $\mathbf{j}$ для обозначения направлений спинов фотоэлектрона и атома; $\mathbf{n}$ обозначает направление импульса фотона; $\mathbf{e}$ — единичный (комплексный) вектор поляризации фотона; $\tilde{Y}_s(\mathbf{s}) = \sqrt{2\pi/(2s+1)}\,\rho^e_{s0}\,Y_s(\mathbf{s})$ (и аналогично для $\tilde{Y}_r(\mathbf{j})$). $\rho^e_{s0}(\rho^a_{s0})$ есть поляризационные мультиполи фотоэлектрона (атома) [27]. При $s = 0$ мы имеем $\tilde{Y}_0(\mathbf{s}) = {}^1\!/_2$, при $s = 1$, $\tilde{Y}_1(\mathbf{s}) = \mathbf{s}$, где $\mathbf{s} = \rho^e_{10}\,\mathbf{n}_s/\sqrt{2}$ — средний спин фотоэлектрона.

Тензор

$$T^{J\lambda \, J'\lambda'}_{k\mu}(\mathbf{e},\mathbf{n}) = \{(\mathbf{e} \cdot \mathbf{Y}^{(\lambda)}_J(\mathbf{n})) \otimes (\mathbf{e}^* \cdot \mathbf{Y}^{(\lambda')}_{J'}(\mathbf{n}))\}_{k\mu},$$

описывает фотонную часть поляризационно-угловой зависимости, $\mathbf{Y}^{(\lambda)}_J(\mathbf{n})$ — векторная сферическая гармоника, зависящая от направления фотонного пучка.

Коэффициенты $\alpha^{J\lambda\,J'\lambda'}_{kk',sdr}(\omega)$ в (3.60) могут быть записаны так:

$$\alpha^{J\lambda\,J'\lambda'}_{kk',sdr}(\omega) = 8\pi\,\mathcal{C} \sum_{J_f J_{f'} l l'} (-1)^{1+s+r+d+k+J_f-J'_f}\, i^{l+l'+J+J'-\lambda-\lambda'}(2d+1)$$

$$\times\ \frac{\Pi_{rskll'J_fJ'_f}}{\Pi_{k'}}\, C^{k'0}_{l0\,l'0} \begin{Bmatrix} l & l' & k' \\ J_f & J'_f & d \\ {}^1\!/_2 & {}^1\!/_2 & s \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J & J' & k \\ J_f & J_{f'} & d \\ J_i & J'_i & r \end{Bmatrix} R^{J\lambda}_{J_fJ_i}(\omega)\, R^{J'\lambda'*}_{J'_fJ_i}(\omega), \qquad (3.61)$$

где $\mathcal{C}$ — нормировочный множитель, зависящий от выбора волновых функций непрерывного спектра и т. п.. Из закона сохранения четности следует, что число $l+l'+J+J'+\lambda+\lambda'$ всегда четно.

Равенство (3.60) является обобщением известного результата работы [49], полученного в дипольном приближении, учитывающим эффекты высшей мультипольности. В дипольном приближении $T_{k\mu}(\mathbf{e},\mathbf{n})$ сводится к тензору $\{\mathbf{e}\otimes\mathbf{e}^*\}_{k\mu}$.

3.4.2 Поляризационно-угловая структура сечения в терминах инвариантных атомных параметров

Мы рассмотрим два случая: (1) поляризованный атом с моментом $J_i = {}^1\!/_2$ и ненаблюдаемый спин фотоэлектрона и (2) неполяризованный атом с произвольным J_i и детектируемым спином фотоэлектрона. Удобно ввести более компактные параметры $\beta^{J\lambda\,J'\lambda'}_{kk',s}$ равные либо $1/\sqrt{2(2J_i+1)}\alpha^{J\lambda\,J'\lambda'}_{kk',sk0}$, для случая (2) (неполяризованный атом и поляризованный фотоэлектрон) или $\alpha^{J\lambda\,J'\lambda'}_{kk',0k's}$ для случая (1) (поляризованный атом с $J_i = {}^1\!/_2$ и неполяризованный фотоэлектрон). Из (3.60) ясно следует, что в обоих случаях угловая структура сечения одна и та же.

Для того, чтобы явно выделить в (3.60) сумму по фотонным мультиполям J, J', λ, λ' удобно использовать инвариантные представления для МКВ. После несколько громоздких преобразований получаем:

$$\sqrt{4\pi} \sum_{JJ'\lambda\lambda'} \beta^{J\lambda\,J'\lambda'}_{kk',s}(\omega) T^{J\lambda\,J'\lambda'}_{kq}(\mathbf{e},\mathbf{n})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2k+1}}\left(A^{(0)}_{kk',s} - \xi\, A^{(1)}_{kk',s}\right) Y_{kq}(\mathbf{n})$$

$$- A^{(2)}_{kk',s}\sqrt{2k-1}\,\{\{\mathbf{e}\otimes\mathbf{e}^*\}_2\otimes Y_{k-2}(\mathbf{n})\}_{kq}$$

$$+ A^{(3)}_{kk',s}\, i\,\sqrt{2k-1}\Big(\{\{[\mathbf{e}\times\mathbf{n}]\otimes\mathbf{e}^*\}_2\otimes Y_{k-2}(\mathbf{n})\}_{kq}$$

$$+ \{\{[\mathbf{e}^*\times\mathbf{n}]\otimes\mathbf{e}\}_2\otimes Y_{k-2}(\mathbf{n})\}_{kq}\Big), \qquad (3.62)$$

где коэффициенты $A^{(i)}_{kk',rs}$ имеют вид:

$$
\begin{aligned}
A^{(0)}_{kk',s} &= \frac{1+(-1)^{k+k'}}{4} \sum_{JJ'\lambda\lambda'} \Pi_{JJ'} \Big((-1)^{\lambda}\, C^{k0}_{J1\,J'-1} \\
&\qquad + (-1)^{\lambda+\lambda'} \sqrt{\frac{k(k-1)}{(k+1)(k+2)}}\, C^{k2}_{J1\,J1} \Big) \beta^{J\lambda\, J\lambda'}_{kk',s}(\omega) \\
A^{(1)}_{kk',s} &= \frac{1-(-1)^{k+k'}}{4} \sum_{JJ'\lambda\lambda'} (-1)^{\lambda}\, \Pi_{JJ'}\, C^{k0}_{J1\,J'-1}\, \beta^{J\lambda\, J'\lambda'}_{kk',s}(\omega) \\
A^{(2)}_{kk',s} &= \frac{1+(-1)^{k+k'}}{2} \sum_{JJ'\lambda\lambda'} \frac{(-1)^{\lambda+\lambda'}}{\sqrt{(k+1)(k+2)}}\, \Pi_{JJ'}\, C^{k2}_{J1\;J'1}\, \beta^{J\lambda\, J'\lambda'}_{kk',s}(\omega) \\
A^{(3)}_{kk',s} &= \frac{1-(-1)^{k+k'}}{4} \sum_{JJ'\lambda\lambda'} \frac{(-1)^{\lambda+\lambda'}}{\sqrt{(k+1)(k+2)}}\, \Pi_{JJ'}\, C^{k2}_{J1\;J'1}\, \beta^{J\lambda\, J'\lambda'}_{kk',s}(\omega).
\end{aligned}
$$

Подставляя полученные формулы в общее выражений (3.60), и используя затем «дифференциальную» технику (см. главу 2) приходим к окончательному выражению для поляризационной структуры сечения релятивистского фотоэффекта:

$$
\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} = a_1 + a_2\, |\mathbf{e}\cdot\mathbf{p}|^2 + a_3\, \xi\, (\mathbf{s}\cdot\mathbf{n}) + a_4\, \xi\, (\mathbf{s}\cdot\mathbf{p}) + a_5\, \mathrm{Re}(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}\cdot[\mathbf{s}\times\mathbf{p}]) \\
+ (\mathbf{s}\cdot[\mathbf{p}\times\mathbf{n}])\,(a_6 + a_7\, |\mathbf{e}\cdot\mathbf{p}|^2) \\
+ a_8\, \mathrm{Re}\big\{(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}\cdot[\mathbf{n}\times\mathbf{s}]) + (\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{s})(\mathbf{e}\cdot[\mathbf{n}\times\mathbf{p}])\big\} \\
+ a_9\, \mathrm{Re}(\mathbf{s}\cdot\mathbf{n})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}\cdot[\mathbf{n}\times\mathbf{p}]) + a_{10}\, \mathrm{Re}(\mathbf{s}\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{p})(\mathbf{e}\cdot[\mathbf{n}\times\mathbf{p}]). \qquad (3.63)
\end{aligned}
$$

Как видно, ЦД возможно наблюдать только в экспериментах с поляризованными атомами или с регистрацией спина фотоэлектронов. Коэффициенты a_i в (3.63) определены соотношениями: $(x = \cos\theta = (\mathbf{n}\cdot\mathbf{p}))$:

$$
\begin{aligned}
a_1 &= \sum_{k=0}^{\infty} \Big(P_k(x)\, A^{(0)}_{kk,0} - \frac{1}{\sqrt{k(k+1)}}\, P^{(1)}_k(x)\, A^{(2)}_{k+1\,k+1,0} \Big), \\
a_2 &= \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{k(k-1)}}\, P^{(2)}_k(x) A^{(2)}_{kk,0}, \\
a_3 &= \sum_{k=1} P^{(1)}_k(x) \sum_{k'=k\pm1} \frac{1}{\sqrt{\max(kk')}}\, A^{(1)}_{k'k,1}, \\
a_4 &= \sum_{k=1}^{\infty} P^{(1)}_k(x) \sum_{k'=k\pm1} \frac{1}{\sqrt{\max(kk')}}\, A^{(1)}_{kk',1}, \\
a_5 &= 2\,\mathrm{Im} \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{k(k-1)}}\, P^{(2)}_k(x)\, A^{(2)}_{kk,1},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
a_6 &= \operatorname{Im}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{k(k+1)}}\big(P_k^{(1)}(x)\,A^{(0)}_{kk,1}-P_k^{(2)}(x)\,A^{(2)}_{k+1\,k+1,1}\big),\\
a_7 &= \operatorname{Im}\sum_{k=3}^{\infty}P_k^{(1)}(x)\frac{1}{\sqrt{k(k-1)}}A^{(2)}_{kk,1},\\
a_8 &= -2\operatorname{Im}\sum_{k=2}^{\infty}P_k^{(2)}(x)\sum_{k'=k\pm1}\frac{1}{\sqrt{\max(kk')}}\,A^{(3)}_{k'k,1},\\
a_9 &= -2\operatorname{Im}\sum_{k=3}^{\infty}P_k^{(3)}(x)\sum_{k'=k\pm1}\frac{1}{\sqrt{\max(kk')}}\,A^{(3)}_{k'k,1},\\
a_{10} &= 2\operatorname{Im}\sum_{k=3}^{\infty}P_k^{(3)}(x)\sum_{k'=k\pm1}\frac{1}{\sqrt{\max(kk')}}\,A^{(3)}_{kk',1}
\end{aligned}
$$

Отметим, что в дипольном приближении отличны от нуля только коэффициенты a_{1-5}, которые не зависят от $\cos\theta$. Численные расчеты угловых распределений в релятивистском фотоэффекте в H-подобных ионах см., например, в [5], расчеты для некоторых атомов содержатся в работах [21, 32].

Эксперименты по релятивистскому фотоэффекту проводятся, как правило, с линейно поляризованным синхротронным излучением [46], причем это излучение поляризовано частично, что усложняет интерпретацию экспериментальных данных. Формула (3.63) справедлива для произвольных поляризаций фотона и ее использование могло бы значительно облегчить анализ эффектов фотонной поляризации.

В заключение, приведем выражение для сечения, просуммированного по поляризациям атома и фотоэлектрона, и проинтегрированного по направлениям импульса фотоэлектрона:

$$
\sigma = 2\pi\mathcal{C}\sum_{J\lambda}(-1)^{J+\lambda+1}\sqrt{\frac{2J+1}{2(2J_i+1)}}\,\alpha^{J\lambda\,J\lambda}_{00,000} \tag{3.64}
$$

Глава 4

Эффекты фотонной поляризации и угловые распределения в релятивистских двухфотонных связанно-связанных переходах

В настоящей главе обсуждаются поляризационные эффекты в двухфотонных связанно-связанных переходах. Для определенности рассматривается главным образом рассеяние фотонов (упругое или неупругое) связанными атомными электронами, хотя все результаты остаются справедливыми после тривиальных преобразований и для других двухфотонных процессов, таких как двухфотонное возбуждение или угловое распределение излучаемых фотонов в двухфотонном распаде возбужденных атомных уровней. Атомы мишени предполагаются свободно ориентирующимися, так что сечение $d\sigma/d\Omega$ усредняется по магнитным квантовым числам M_i начального атомного состояния $|i\rangle \equiv |\gamma_i J_i M_i\rangle$ и суммируется по проекциям M_f конечного состояния $|f\rangle \equiv |\gamma_f J_f M_f\rangle$. J_i и J_f есть полные угловые моменты атома-мишени. $\gamma_{i,f}$ – другие квантовые числа (энергии $E_{i,f}$ и т.п.). Ниже используется релятивистское приближение для описания атомных электронов с точным учетом всех мультиполей электрон-фотонного взаимодействия.

Некоторые особенности поляризационных эффектов для связанно-связанных переходов обсуждаются в разделе 4.1. В разделе 4.2 на основе общих соображений симметрии приведена общая структура двухфотонных сечений. Далее, в разделе 4.3 с помощью техники неприводимых тензоров получены выражения для θ-зависящих параметров, определяющих поляризационную зависимость сечений. Частотная и угловая зависимость поляризационных параметров в рэлеевском рассеянии на замкнутых электронных оболочках обсуждается в разделе 4.3.2. В разделе 4.5 представлены инвариантные атомные параметры в одноэлектронном приближении в виде комбинаций радиальных матричных элементов, которые могут быть использованы для численных расчетов с конкретными атомами. Раздел 4.5 содержит также некоторые численные результаты для водородоподобных ионов.

4.1 Общий анализ циркулярного дихроизма для сечений двухфотонных переходов

В отличие от случая свободного электрона, поляризационные эффекты в рассеянии жестких фотонов на связанном электроне более разнообразны. Для большей ясности будем использовать различные способы описания поляризационных состояний фотонов. Пусть $\mathbf{e}_i$, $\mathbf{k}_i = \mathbf{n}_i\omega_i/c$ есть единичные (комплексные) векторы поляризации, волновые векторы и частоты начального ($i=1$) и рассеянного ($i=2$) фотонов: $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i^* = 1$, $\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_i = 1$, $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{n}_i = 0$. Ниже поляризационные состояния фотонов будут описываться как в терминах степени линейной (l) и циркулярной (ξ) поляризации,

$$l = \mathbf{e} \cdot \mathbf{e} = \mathbf{e}^* \cdot \mathbf{e}^*, \quad \xi = i\mathbf{n} \cdot [\mathbf{e}^* \times \mathbf{e}], \tag{4.1}$$

так и стандартными параметрами Стокса ξ_1, ξ_2, ξ_3 (причем $\xi \equiv \xi_2$, $l = \sqrt{{\xi_1}^2 + {\xi_3}^2}$), возникающими при использовании стандартной матрицы плотности $\rho^{\gamma}_{\alpha\beta}$. Параметры Стокса падающих и рассеянных фотонов обозначаются как $\xi_1^{(i)}$, $\xi_2^{(i)}$, $\xi_3^{(i)}$, $i = 1, 2$ (более точно, $\xi_\alpha^{(2)}$ есть параметры Стокса фотона, зарегистрированного детектором, но не рассеянного фотона, как такового). Аналогично [3], они определены по отношению к двум координатным системам (лабораторной и системе, связанной с детектором), x_1, y_1, z_1 и x_2, y_2, z_2, где оси z направлены вдоль волновых векторов $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$, оси x совпадают и направлены перпендикулярно плоскости рассеяния, т. е. $x \parallel [\mathbf{k}_1 \times \mathbf{k}_2]$, и оси y_1, y_2 лежат в плоскости рассеяния. Для полностью поляризованного фотона, $\xi_1 = l\sin 2\varphi$ и $\xi_2 = l\cos 2\varphi$, где φ – угол между осью x и большой полуосью эллипса поляризации. Таким образом, l есть степень максимальной линейной поляризации. Отметим, что для частично поляризованного фотонного пучка мы имеем $l^2 + \xi^2 = \mathcal{P}$, где $\mathcal{P}$ есть степень поляризации.

Одним из наиболее интересных дипольно-запрещенных эффектов в двухфотонных переходах является циркулярный дихроизм (ЦД), который состоит в различии сечений

$$\Delta = \frac{d\sigma(\xi^{(1)}, \xi^{(2)})}{d\Omega} - \frac{d\sigma(-\xi^{(1)}, -\xi^{(2)})}{d\Omega} \tag{4.2}$$

относительно одновременной замены знаков степеней циркулярной поляризации обеих (т. е., налетающего и рассеянного) фотонов, или, что то же (см. (4.1)), относительно замены

$$\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \Rightarrow \mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*. \tag{4.3}$$

Наличие ЦД приводит, в частности, к возникновению эллиптической поляризации рассеянных фотонов в случае чистой линейной поляризации падающего фотонного пучка. Этот эффект аналогичен хорошо известному классическому электродинамическому эффекту – возникновению эллиптической поляризации фотона при отражении линейно поляризованного излучения от поверхности поглощающей среды (металла) [43]. По всей видимости, такой эффект в рассеянии фотонов хаотически ориентированными мишенями не наблюдался до сих пор экспериментально. Отметим, что аналогичный эффект ЦД в однофотонной двухэлектронной ионизации неполяризованных атомов, т.е. разница сечений для право- и левополяризованных фотонов, впервые наблюдался в недавнем эксперименте [69].

Очевидно, для оптических фотонов в электрическом дипольном приближении ЦД не возможен, поскольку известная формула Плачека для сечения дипольного рассеяния (см., например, [3])

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{k}_2}} = \frac{r_0^2}{3}\Big[G^s|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2{}^*|^2 + \frac{1}{2}G^a\big(1-|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2\big) + \frac{3}{10}G^t\big(1+|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2-\frac{2}{3}|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2{}^*|^2\big)\Big] \quad (4.4)$$

инвариантна по отношению к замене (4.3). (r_0 — классический радиус электрона). Таким образом, для свободных (неполяризованных) атомов ЦД является дипольно-запрещенным эффектом. Поэтому для экспериментального наблюдения ЦД предпочтительнее использовать источники рентгеновского или гамма-излучения, а для теоретического рассмотрения эффектов ЦД требуется релятивистская теория. В этой связи надо отметить, что поляризационно-угловая зависимость формулы Клейна-Нишины-Тамма [3] для рассеяния фотонов свободным неполяризованным электроном в релятивистской теории без дипольного приближения, может быть параметризована тремя параметрами f, g, h, не зависящими от θ (θ есть угол рассеяния; $\cos\theta = \mathbf{n}_1\cdot\mathbf{n}_2$)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{k}_2}} = \frac{7r_0^2}{3}\Big\{\frac{1}{3}f + h\xi_2^{(1)}\xi_2^{(2)}\cos\theta + \frac{1}{10}g\big[2\xi_1^{(1)}\xi_1^{(2)}\cos\theta + (1+\xi_3^{(1)})(1+\xi_3^{(2)}) + (1-\xi_3^{(1)})(1-\xi_3^{(2)})\cos^2\theta\big]\Big\}. \quad (4.5)$$

Используя равенство (4.19) (см. ниже) это выражение можно также переписать в виде (4.4) с коэффициентами, связанными соотношениями

$$G^s \quad\to\quad f+2g+4h, \quad G^a \quad\to\quad 3f-g+5h, \quad G^t \quad\to\quad 5f+3g-15h.$$

Отсутствие ЦД в этом случае является следствием эрмитовости амплитуды рассеяния во втором порядке квантовоэлектродинамической теории возмущений, использованной при выводе (4.5). Эффекты, подобные ЦД, для свободного электрона возникают только при учете высших радиационных поправок к формуле Клейна-Нишины-Тамма [16]. Малость этих эффектов очевидна.

Необходимые условия появления ЦД и его главные особенности для случая двухфотонных связанно-связанных переходов могут быть выведены на основе общих соображений пространственной и временной симметрии:

(а) ЦД обусловлен наличием в задаче аксиального Т-нечетного вектора

$$\mathbf{D} \equiv \xi \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} = i[\mathbf{e}^* \times \mathbf{e}]$$

присущего фотону с отличной от нуля степенью циркулярной поляризации $-1 \leq \xi \leq 1$. Очевидно, что дихроизм отличен от нуля, если $d\sigma/d\Omega$ включает члены линейные относительно степеней циркулярной поляризации налетающего ($\xi^{(1)}$) или рассеянного ($\xi^{(2)}$) фотонов. Таким образом, векторы $\mathbf{D}^{(1)}$ или $\mathbf{D}^{(2)}$ должны входить в сечение и, поскольку амплитуда перехода линейна по $\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}_2$, «билинейная по $\mathbf{e}_1$ ($\mathbf{e}_2$)» величина $\xi^{(1)}$ ($\xi^{(2)}$) может появляться в сечении $d\sigma/d\Omega$ только в результате интерференции различных (парциальных) членов полной амплитуды. Поэтому дихроизм в любом случае имеет интерференционную природу.

(б) Аксиальный вектор $\mathbf{D}$ может входить в сечение $d\sigma/d\Omega$ только в виде скалярного произведения с другим аксиальным вектором. Этот новый вектор должен быть составлен из других векторов задачи. По этой причине, для произвольно ориентированных мишеней в дипольном приближении дихроизм отсутствует, поэтому ЦД является недипольным эффектом. В этом случае дополнительными векторами являются $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_2$.

(в) Т-нечетный (меняющий знак при обращении времени) вектор $\mathbf{D}$ может входить в Т-четный скаляр $d\sigma/d\Omega$ только в виде произведения с другой T-нечетной величиной Г. В общем случае, роль параметра Г играет мнимая часть парциальной амплитуды рассеяния. Как следует из общего соотношения унитарности для S-матрицы [3], во всех случаях антиэрмитова часть амплитуды конкретного физического процесса, связана с амплитудами реальных физических процессов, отличных от данного. Мы будем называть такие процессы «диссипативными каналами», поскольку они приводят, в частности, к диссипации энергии фотонного пучка, рассеянного атомной средой. В этой связи, ЦД есть диссипативно-индуцированный эффект, обусловленный необратимой (Т-нечетной) природой процессов диссипации. Отмеченный выше эффект возникновения эллиптической поляризации при отражении линейно поляризованного света от поверхности металла связан также с наличием мнимой (диссипативной) части комплексной диэлектрической восприимчивости металла [43]. Таким образом, физическая природа и ЦД в двухфотонных связанно-связанных переходах, и отмеченного выше эффекта появления эллиптичности отраженного от поверхности металла света, одна и та же. Два наиболее важных диссипативных канала есть возбуждение реальных промежуточных резонансных уровней в резонансном рассеянии или двухфотонное возбуждение (в этом случае ширина, Γ_r, резонансного уровня является параметром Г) и фотоэффект, если энергия налетающего фотона достаточна для ионизации атома.

(г) Из псевдоскалярных величин $\xi^{(1)}$, $\xi^{(2)}$ можно составить только две Т-нечетные комбинации $I_{1,2}$ векторов $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_1^*$, $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_2^*$, $\mathbf{n}_2$,

$$I_1 = \xi^{(1)} \ \mathrm{Re}\,\{(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{n}_1)(\mathbf{e}_2^* \cdot [\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2])\} = \xi^{(1)} \ l^{(2)} \ (\boldsymbol{\epsilon}_2 \cdot \mathbf{n}_1)(\boldsymbol{\epsilon}_2 \cdot [\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2]), \tag{4.6}$$

$$I_2 = \xi^{(2)} \ \mathrm{Re}\,\{(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_2)(\mathbf{e}_1^* \cdot [\mathbf{n}_2 \times \mathbf{n}_1])\} = l^{(1)} \ \xi^{(2)} \ (\boldsymbol{\epsilon}_1 \cdot \mathbf{n}_2)(\boldsymbol{\epsilon}_1 \cdot [\mathbf{n}_2 \times \mathbf{n}_1]), \tag{4.7}$$

которые могут входить в $d\sigma/d\Omega$ в виде произведения с соответствующими Т-нечетными «диссипативными» параметрами $\Gamma_{1,2}$. Эти выражения можно также переписать в терминах параметров Стокса

$$2I_1 = \xi_2^{(1)}\xi_1^{(2)} \sin^2\theta, \qquad 2I_2 = \xi_1^{(1)}\xi_2^{(2)} \sin^2\theta. \tag{4.8}$$

Здесь $\xi_2^{(i)} \equiv \xi^{(i)}$. Параметр $-1 \leq \xi_1^{(i)} \leq +1$ определяет степень линейной поляризации i-го фотона с углом $\pm\frac{\pi}{4}$ по отношению к плоскости рассеяния.

Выражения (4.7), (4.8) определяют циркулярный дихроизм для произвольного двухфотонного перехода между связанными состояниями произвольно ориентированной мишени как в релятивистском, так и в нерелятивистском приближениях. Член с I_2 в $d\sigma$ описывает возникновение циркулярной поляризации в рассеянии линейно поляризованного фотона, и I_1 описывает взаимный эффект. ЦД исчезает, если оба фотона 100% циркулярно поляризованы. С другой стороны, эффект максимален когда один из фотонов циркулярно поляризован, а другой – линейно поляризован. Предположим, для определенности, что падающий фотон линейно поляризован ($\mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_1^*$) под углом β к плоскости рассеяния. Тогда рассеянное излучение содержит фотоны с циркулярной поляризацией. Число таких фотонов определяется членом с I_2, и число левополяризованных ($\xi^{(2)} = 1$) и правополяризованных ($\xi^{(2)} = -1$) фотонов, рассеянных в том же направлении, различно. Величины $I_{1,2}$ имеют максимум при рассеянии на прямой угол и $\beta = \pi/4$ и пропадают в полном сечении, проинтегрированном по углам рассеянного фотона.

По всей видимости, впервые возможность ЦД-подобных поляризационных аномалий в дипольно-запрещенном рассеянии света была впервые отмечена в 1980 [61]. Для оптических частот ω_1, ω_2 ЦД в дипольном и дипольно-запрещенном рассеянии света газами был изучен в деталях в [8], где были рассмотрены различные механизмы диссипации: радиационные поправки, надпороговое рассеяние ($\hbar\omega_1 > |E_i|$) и дипольно-разрешенное рассеяние с резонансом на промежуточном дипольно-запрещенном переходе. Последний случай, вероятно, наиболее предпочтителен для экспериментального наблюдения. Так, для $S-S$ рассеяния с квадрупольным резонансом на промежуточном $D-$уровне, разность (4.2) имеет вид [8]

$$\Delta \sim \frac{\Gamma_r}{\delta^2 + \Gamma_r^2/4}(I_1 + I_2). \tag{4.9}$$

Где $\delta = E_i + \hbar\omega_1 - E_r$ есть расстройка резонанса, Γ_r — ширина резонансного уровня. При резонансе все члены в $d\sigma/d\Omega$ имеют сравнимую величину и ЦД может быть легко измерен. Такие измерения могут быть эффективны для определения ширин резонансных уровней с

Γ_r, величин и относительных фаз атомных матричных элементов. Некоторые особенности ЦД в резонансном двухфотонном возбуждении обсуждаются в [60]. Во всех цитированных выше работах использовалось нерелятивистское приближение с учетом эффектов запаздывания только в первом неисчезающем порядке. Релятивистский анализ индуцированного фотоионизацией ЦД в рассеянии жестких фотонов водородоподобными ионами был проведен впервые в 1987 году [9] (численно), позже были получены некоторые аналитические результаты [56] для простейшего случая атомов с заполненными электронными оболочками ($J_i = J_f = 0$). Еще раньше, в работе [66], было также отмечено что для рэлеевского рассеяния с $J_i = J_f = 0$, сечение содержит члены, описывающие ЦД, однако детального анализа этого эффекта проведено не было.

Отметим, что в работе [65] обсуждается другой тип дихроизма в рассеянии фотонов, так называемый “ design-induced” дихроизм, который состоит в различии сечений для противоположных спиральностей одного из фотонов при фиксированной ненулевой степени циркулярной поляризации другого фотона. Этот дихроизм имеет чисто геометрическую природу и пропорционален разности

$$|\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2|^2 - |\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2^*|^2 = \xi_2^{(1)} \xi_2^{(2)} \cos\theta.$$

Очевидно, что такой сорт ЦД связан с коэффициентами конверсии для рассеяния циркулярно поляризованного света с детектированием двух противоположно циркулярно поляризованных компонент рассеянного света [3]. Таким образом, этот ЦД отличен от нуля уже в случае обычного дипольного рассеяния (4.4) и поэтому не дает никакой новой информации о динамике рассеяния по сравнению с информацией от параметров $G^{s,a,t}$.

4.2 Общий анализ поляризационной зависимости сечений двухфотонных переходов

В основе релятивистского рассмотрения двухфотонных переходов лежит квантовая электродинамика связанных состояний. В низшем неисчезающем порядке по постоянной тонкой структуры α амплитуда рассеяния может быть представлена в виде (используются естественные единицы: $\hbar = c = 1$)

$$U_{fi} = \alpha \sum_n\!\!\!\!\!\!\!\int \left\{ \frac{\langle f|\, V_2^* \,|n\rangle \,\langle n|\, V_1 \,|i\rangle}{E_i + \omega_1 - E_n} + \frac{\langle f|\, V_1 \,|n\rangle \,\langle n|\, V_2^* \,|i\rangle}{E_i - \omega_2 - E_n} \right\}, \tag{4.10}$$

$|n\rangle \equiv |\gamma_n J_n M_n\rangle$ есть виртуальные атомные состояния, образующие полный набор связанных состояний и положительных и отрицательных состояний непрерывного спектра (решений уравнения Дирака) во внешнем поле атомного потенциала. Операторы электрон-фотонного взаимодействия есть

$$V_1 = \mathbf{e}_1 \cdot \vec{\alpha} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}}, \quad V_2^* = \mathbf{e}_2^* \cdot \vec{\alpha} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}}, \tag{4.11}$$

где $\vec{\alpha}$ – матрицы Дирака. Для краткости мы используем «одноэлектронную» форму для V_1, V_2^*, без суммирования по всем атомным электронам. Окончательные результаты для поляризационной зависимости не зависят от числа электронов, так как только инвариантные атомные параметры (см. ниже) содержат всю информацию об атомной структуре. Дифференциальное сечение рассеяния фотонов произвольно ориентированной мишенью имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{k}_2}} = \frac{\omega_2}{\omega_1}\frac{1}{2J_i+1}\sum_{M_i,M_f}|U_{fi}|^2 \tag{4.12}$$

Хотя мы рассматриваем здесь рассеяние фотонов на атомах, амплитуды других двухфотонных переходов (двухфотонное возбуждение или распад) также принимают вид (4.10) после подстановок $V_2^* \to V_2$, $\omega_2 \to -\omega_2$ или $V_1 \to V_1^*$, $\omega_1 \to -\omega_1$.

4.2.1 Феноменологическое рассмотрение случая произвольных J_i, J_f

Общая структура поляризационной зависимости сечений двухфотонных переходов для произвольно ориентированных мишеней может быть получена на основе феноменологического рассмотрения путем подсчета числа линейно независимых комбинаций векторов задачи. Действительно, для произвольно ориентированной квантовой системы сечение содержит только комбинации векторов $\mathbf{e}_i$, $\mathbf{e}_i^*$ и $\mathbf{n}_i$ $(i = 1,2)$, где $d\sigma/d\Omega$ есть линейная функция каждого вектора $\mathbf{e}_i$ и $\mathbf{e}_i^*$. Далее, суммарное количество векторов $\mathbf{n}_{1,2}$ четно в силу закона сохранения четности. Используя соотношения ортогональности $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{n}_i = 0$ мы можем составить только 6 действительных комбинаций

$$(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_1^*)(\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{e}_2^*) = 1, \quad |\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*|^2, \quad |\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2,$$
$$|\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2, \quad |\mathbf{n}_2\cdot\mathbf{e}_1|^2, \quad |\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2|\mathbf{n}_2\cdot\mathbf{e}_1|^2,$$

и две комплексные комбинации

$$E_1 = (\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*)(\mathbf{e}_1^*\cdot\mathbf{n}_2)(\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{n}_1), \qquad E_2 = (\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2)(\mathbf{e}_1^*\cdot\mathbf{n}_2)(\mathbf{e}_2^*\cdot\mathbf{n}_1), \tag{4.13}$$

которые могут входить в сечение с коэффициентами, зависящими только от $\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{n}_2 = \cos\theta$. Действительные части $E_{1,2}$ линейно зависимы и могут быть исключены из сечения с помощью соотношений

$$2\cos\theta\,\mathrm{Re}\,E_1 = \sin^2\theta(1-|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*|^2) + |\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{n}_2|^2|\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{n}_1|^2 - |\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{n}_1|^2 - |\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{n}_2|^2, \tag{4.14}$$

$$2\cos\theta\,\mathrm{Re}\,E_2 = \sin^2\theta(1-|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2) + |\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{n}_2|^2|\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{n}_1|^2 - |\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{n}_1|^2 - |\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{n}_2|^2, \tag{4.15}$$

которые могут быть проверены прямыми векторными вычислениями. Далее, вместо $\operatorname{Im} E_{1,2}$ более удобно использовать комбинации I_1, I_2, обсуждаемые в разделе 4.1.

$$I_1 = \operatorname{Im}(E_2 + E_1),$$

$$I_2 = \operatorname{Im}(E_2 - E_1).$$

При выводе выражений (4.7) для $I_{1,2}$ из (4.13) была использованы формулы (3.4), (3.5) для скалярных произведений, содержащих векторы поляризации фотонов.

Таким образом, общая форма сечения упругого или неупругого рассеяния, а также любого связанно-связанного перехода (с другими нормировочными множителями), может быть представлена в виде

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{k}_2}} = \frac{{r_0}^2}{3}\frac{\omega_2}{\omega_1}\Big(a_1|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*|^2 + \frac{1}{2}a_2(1-|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2) + \frac{3}{10}a_3(1+|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2 - \frac{2}{3}|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*|^2)$$
$$+ a_4|\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2 + a_5|\mathbf{n}_2\cdot\mathbf{e}_1|^2 + a_6|\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2|\mathbf{n}_2\cdot\mathbf{e}_1|^2 + a_7\, I_1 + a_8\, I_2\Big). \tag{4.16}$$

Здесь $a_i = a_i(\cos\theta)$. Сечение $d\bar{\sigma}/d\Omega_{\mathbf{k}_2}$ для неполяризованных фотонов падающего пучка, просуммированное по поляризациям рассеянного фотона, есть

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{\mathbf{k}_2}} = \frac{{r_0}^2}{3}\frac{\omega_2}{\omega_1}f_0, \tag{4.17}$$

где

$$f_0 = \frac{1}{2}a_1(1+\cos^2\theta) + \frac{1}{4}a_2(2+\sin^2\theta) + \frac{1}{20}a_3(13+\cos^2\theta)$$
$$+ (a_4+a_5)\sin^2\theta + \frac{1}{2}a_6\sin^4\theta.$$

Как уже упоминалось в разделе 4.1, наиболее интересные поляризационные эффекты обусловлены членами с $I_{1,2}$ в (4.16). Поскольку $I_{1,2}$ меняют знак при обращении времени для фотонных переменных, т.е. при

$$\mathbf{k}_i, \mathbf{e}_i \to -\mathbf{k}_i, \mathbf{e}_i^*$$

для обоих фотонов, разность сечений при этой трансформации описывает эффекты нарушения Т-четности в двухфотонных переходах, которые аналогичны оптическим эффектам несохранения четности, обусловленным нейтральными токами и т.п. (см., например, [17]). В нашем случае, однако, эти особенности имеют другую физическую природу. В действительности, сечение (4.16) остается инвариантным при обращении времени, поскольку коэффициенты $a_{7,8}$ возникают в результате интерференции действительной и мнимой частей амплитуды рассеяния и также меняют знак при обращении времени, компенсируя таким образом Т-нечетные свойства $I_{1,2}$. Так, эффекты ЦД в двухфотонных переходах являются диссипативно-индуцированными, как и обсуждалось в разделе 4.1. Как следует из явного вида $I_{1,2}$, ЦД отличен от нуля только для неколлинеарных фотонов и может наблюдаться как разность сечений для право- или левополяризованного фотона $\mathbf{e}_1$ или $\mathbf{e}_2$, при фиксированной линейной поляризации другого фотона.

Равенство (4.16) справедливо также для произвольных двухфотонных переходов между связанными состояниями квантовой системы (атома, молекулы, ядра) с определенным значением полного углового момента. Оно упрощается в некоторых специальных случаях.

Для упругого рассеяния ($\omega_1 = \omega_2$), симметрия при обращении времени, т. е. инвариантность сечения при замене (см. параграф 87 в [3])

$$\mathbf{k}_{1,2} \to -\mathbf{k}_{2,1}, \qquad \mathbf{e}_{1,2} \to \mathbf{e}^*_{2,1} \tag{4.18}$$

требует равенства коэффициентов при $|\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{e}_2|^2$ и $|\mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{e}_1|^2$, $a_4 = a_5$. Далее, коэффициент при $\operatorname{Im} E_2$, который меняет знак при преобразовании (4.18), пропадает. Таким образом, $a_7 = -a_8$. Так что для упругого рассеяния мы имеем только 6 отличных от нуля параметров вместо 8 параметров в общем случае.

Очевидно, общие результаты упрощаются при $\theta = 0$ и π. Эти случаи соответствуют рассеянию вперед или назад или двухфотонному возбуждению двумя коллинеарными лазерными пучками. Поляризационная структура при этом аналогична ($E1 - E1$)-случаю и описывается только тремя параметрами $a_{1,2,3}$. Далее, для тождественных фотонов, т.е. при двухфотонном возбуждении одним лазерным пучком, сечение имеет простейший вид $\sim (\alpha_1 + \alpha_2\, l^2)$, где $\alpha_{1,2}$ тривиально переписываются через $a_i^{(0)}$.

В электрическом дипольном приближении $d\sigma/d\Omega_{\mathbf{k}_2}$ не зависит от $\mathbf{k}_i$ и, в соответствии с (4.4), включает только 3 не зависящих от θ параметров $a_{1,2,3}$, которые совпадают с $(\omega_1/\omega_2)G^{s,a,t}$ в нерелятивистском пределе. Явный вид зависимости от θ коэффициентов a_i, с учетом недипольных эффектов в первом неисчезающем порядке, был детально проанализирован в [8] как для дипольно-разрешенного, так и для дипольно-запрещенного (между состояниями $|i\rangle$, $|f\rangle$ с противоположными четностями) рассеяния.

Общий результат (4.16) может быть представлен также в терминах параметров Стокса падающего, $\{\xi_1^{(1)}, \xi_2^{(1)}, \xi_3^{(1)}\}$, и рассеянного (детектированного), $\{\xi_1^{(2)}, \xi_2^{(2)}, \xi_3^{(2)}\}$, фотонов, как это традиционно используется в квантовоэлектродинамической теории поляризационных эффектов [3]. Используя (4.8) и вспомогательные тождества [8]

$$|\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{e}_k|^2 = \frac{1}{2}(1 - \xi_3^{(k)})\sin^2\theta,$$

$$4|\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2|^2 = (1 + \xi_3^{(1)})(1 + \xi_3^{(2)}) + (1 - \xi_3^{(1)})(1 - \xi_3^{(2)})\cos^2\theta + 2(\xi_1^{(1)}\xi_1^{(2)} + \xi_2^{(1)}\xi_2^{(2)})\cos\theta, \tag{4.19}$$

$$\operatorname{Re} E_{1,2} = -\frac{1}{4}\left[\xi_1^{(1)}\xi_1^{(2)} \mp \xi_2^{(1)}\xi_2^{(2)} + (1-\xi_3^{(1)})(1-\xi_3^{(2)})\cos\theta\right]\sin^2\theta,$$

мы находим

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{k}_2}} = \frac{r_0^2}{6}\frac{\omega_2}{\omega_1}\Big\{f_0 + f_{30}\xi_3^{(1)} + f_{03}\xi_3^{(2)} + f_{11}\xi_1^{(1)}\xi_1^{(2)} + f_{22}\xi_2^{(1)}\xi_2^{(2)} + f_{33}\xi_3^{(1)}\xi_3^{(2)} + f_{12}\xi_1^{(1)}\xi_2^{(2)} + f_{21}\xi_2^{(1)}\xi_1^{(2)})\Big\}. \quad (4.20)$$

Здесь f_0 определено равенством (4.17), а остальные параметры равны

$$\tilde{f} == a_1 - \frac{1}{2}a_2 + \frac{1}{10}a_3, \quad f_{11} = \tilde{f}\cos\theta, \cos\theta, \quad (4.21)$$

$$f_{22} = (a_1 + \frac{1}{2}a_2 - \frac{1}{2}a_3),$$

$$2f_{30} = (\tilde{f} - 2a_4 + a_6\sin^2\theta)\sin^2\theta, \quad 2f_{03} = (\tilde{f} - 2a_5 + a_6\sin^2\theta)\sin^2\theta,$$

$$2f_{33} = \tilde{f}(1+\cos^2\theta) + a_6\sin^4\theta, \quad f_{12} = a_8\sin^2\theta, \quad f_{21} = a_7\sin^2\theta.$$

Очевидно, что число независимых атомных параметров f в (4.20) то же что и в (4.16) и для упругого рассеяния мы имеем $f_{30} = f_{03}$, $f_{21} = -f_{12}$.

Выражение (4.20) имеет структуру, аналогичную поляризационной структуре хорошо известной формулы Клейна-Нишины для рассеяния жестких фотонов неполяризованным свободным электроном [3]. Для свободного электрона $f_{30} = f_{03}$, и вследствие инвариантности по отношению к замене (4.18) ЦД исчезает ($f_{21} = f_{12} = 0$); все параметры f_{ij} имеют простейшую зависимость от угла рассеяния θ. По этой причине, используя явный вид для f_0, f_{ij} [3], выражение (4.20) может быть переписано в виде (4.5) с явно выделенной зависимостью от θ. В случае рассеяния на связанным электроне, зависимость атомных параметров от θ усложняется и существенно зависит от величины полного углового момента J_i, J_f.

4.2.2 Сечение для атомов с заполненными оболочками

Общий анализ упрощается для переходов с $J_i = J_f = 0$, поскольку в этом случае амплитуда (4.10) является скаляром (т.к. не зависит от проекций M_i, M_f) и имеет поляризационную структуру

$$U_{fi}^{(0)} = \alpha\Big[\chi_1(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*) + \chi_2(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{n}_2)(\mathbf{e}_2^*\cdot\mathbf{n}_1)\Big], \quad (4.22)$$

где $\chi_{1,2}(\cos\theta)$ — две инвариантные атомные амплитуды, которые являются четными функциями θ. Используя равенство

$$2\operatorname{Im}\Big[(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*)(\mathbf{e}_1^*\cdot\mathbf{n}_2)(\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{n}_1)\Big] \equiv 2\operatorname{Im} E_1 = I_1 - I_2,$$

сечение можно представить в виде

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\Big|_{J_i=J_f=0} = r_0^2 \frac{\omega_2}{\omega_1}\Big[|\chi_1|^2|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*|^2 + |\chi_2|^2|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{n}_2|^2|\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{n}_1|^2$$

$$+ 2\,\mathrm{Re}(\chi_1\chi_2^*)\,\mathrm{Re}\,E_1 + \mathrm{Im}(\chi_1\chi_2^*)(I_2 - I_1)\Big]. \qquad (4.23)$$

Последний член в этом выражении содержит интерференцию действительной и мнимой частей амплитуд $\chi_{1,2}$ и описывает ЦД в соответствии с изложенными выше соображениями. С помощью равенства (4.14) для $\mathrm{Re}\,E_1$, равенство (4.23) можно переписать в терминах векторных комбинаций, определенных в (4.16), однако (4.23) является более компактной формой записи сечения. Из равенства (4.23) видно, что поляризационные эксперименты дают возможность измерять как модули амплитуд $\chi_{1,2}$, так и их фазы. Отметим, что при $\theta = 0, \pi$ только один атомный параметр, $|\chi_1|^2$, дает вклад в сечение.

Используя (4.8), (4.19), можно переписать результаты в терминах параметров Стокса

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\Big|_{J_i=J_f=0} = d_1(1+\xi_3^{(1)}\xi_3^{(2)}) + d_2(\xi_3^{(1)} + \xi_3^{(2)})$$

$$+ d_3(\xi_1^{(1)}\xi_1^{(2)} + \xi_2^{(1)}\xi_2^{(2)}) + d_4(\xi_1^{(1)}\xi_2^{(2)} - \xi_2^{(1)}\xi_1^{(2)}). \quad (4.24)$$

Таким образом, при заполненных оболочках только 4 параметра f_i в (4.20) отличны от нуля, поскольку в этом случае

$$f_0 = f_{33}, \qquad f_{11} = f_{22},$$

а также $f_{03} = f_{30}$, $f_{12} = -f_{21}$, которые в общем случае справедливы только для упругого рассеяния.

Коэффициенты d_i в терминах $\chi_{1,2}$ зависят от θ и имеют более простой вид при другой параметризации амплитуды $U_{fi}^{(0)}$ в (4.22). Как обсуждалось в работах [48, 66] по рэлеевскому рассеянию на атомах с заполненными оболочками, параметры d_i в (4.24) выражаются проще в записи через амплитуды «линейной поляризации» ($A_{||,\perp}$) или «циркулярной поляризации» (no spin-flip and spin-flip), A_{NSF} и A_{SF}. Отметим, что в работах [48, 66] использовалось другое обозначение ζ_i и определение параметров Стокса, а именно $\xi_1 = \zeta_2$, $\xi_2 = -\zeta_3$, $\xi_3 = -\zeta_1$. $A_{||,\perp}$ есть амплитуды рассеяния с линейными поляризациями, параллельными или перпендикулярными плоскости рассеяния, их связь с $\chi_{1,2}$ имеет вид

$$A_{||} = \alpha(\chi_1\,\cos\theta - \chi_2\sin^2\theta), \qquad A_\perp = \alpha\chi_1. \qquad (4.25)$$

$A_{NSF,SF}$ — амплитуды рассеяния для циркулярных падающего и рассеянного фотонов с одной и той же ($A_{NSF}\equiv A_+$) и противоположной ($A_{SF}\equiv A_-$) спиральностями. Они связаны с $A_{||,\perp}$ соотношениями

$$A_\pm = \frac{1}{2}\left(A_{||} \pm A_\perp\right). \qquad (4.26)$$

Хотя при произвольных поляризациях $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$ параметризация амплитуды $U_{fi}^{(0)}$ в терминах A более сложна, чем в (4.22), например, используя $A_\pm$ мы имеем

$$U_{fi}^{(0)} = \frac{\alpha}{\sin^2\theta}\Big\{A_{NSF}\left[(\mathbf{e}_1^+\cdot\mathbf{n}_2)(\mathbf{e}_2^{*-}\cdot\mathbf{n}_1) + (\mathbf{e}_1^-\cdot\mathbf{n}_2)(\mathbf{e}_2^{*+}\cdot\mathbf{n}_1)\right]$$
$$- A_{SF}\left[(\mathbf{e}_1^+\cdot\mathbf{n}_2)(\mathbf{e}_2^{*+}\cdot\mathbf{n}_1) + (\mathbf{e}_1^-\cdot\mathbf{n}_2)(\mathbf{e}_2^{*-}\cdot\mathbf{n}_1)\right]\Big\}, \tag{4.27}$$

где $\mathbf{e}^\pm = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e} \pm i[\mathbf{n}\times\mathbf{e}])$, однако амплитуды A удобны для параметризации коэффициентов d_i для «представления Стокса» (4.24) сечения [48],

$$d_1 = \frac{1}{6}{r_0}^2 f_0 = \frac{1}{4}(|A_\perp|^2 + |A_{||}|^2) = \frac{1}{8}(|A_+|^2 + |A_-|^2), \tag{4.28}$$

$$d_2 = \frac{1}{6}{r_0}^2 f_{03} = \frac{1}{4}(|A_\perp|^2 - |A_{||}|^2) = -\frac{1}{4}\,\mathrm{Re}(A_+A_-^*), \tag{4.29}$$

$$d_3 = \frac{1}{6}{r_0}^2 f_{11} = \frac{1}{2}\,\mathrm{Re}(A_{||}A_\perp^*) = \frac{1}{8}(|A_+|^2 - |A_-|^2), \tag{4.30}$$

$$d_4 = \frac{1}{6}{r_0}^2 f_{12} = \frac{1}{2}\,\mathrm{Im}(A_{||}A_\perp^*) = -\frac{1}{4}\,\mathrm{Im}(A_+A_-^*). \tag{4.31}$$

Отметим, что в разделе 4.3.2 будет показано, что явные выражения для $A_\pm$ в терминах радиальных матричных элементов имеет более компактную и симметричную форму.

4.3 Разделение геометрических и динамических факторов в двухфотонных сечениях

4.3.1 Разложение двухфотонных амплитуд на неприводимые части

Отделение динамических и геометрических факторов в амплитуде (4.10) и вывод явных выражений для независящих от поляризации атомных факторов a_i (или f_{ij}), проводится с использованием стандартного мультипольного разложения векторного потенциала и теоремы Вигнера-Эккарта [4] (аналогично рассмотрению в разделе 3.4, стр.60).

Сумма в (4.10) по проекциям M_n проводится с помощью соотношения [4]

$$\sum_{M_n} C^{J_iM_i}_{JM\;J_nM_n} C^{J_nM_n}_{J'M'\;J_fM_f}$$

$$= \sum_{pm} (-1)^{J_i+J_f+J+J'}\sqrt{(2p+1)(2J_n+1)}\,C^{pm}_{JM\;J'M'} C^{J_iM_i}_{pm\;J_fM_f} \begin{Bmatrix} J' & J & p \\ J_i & J_f & J_n \end{Bmatrix}.$$

Формально, амплитуда U_{fi} в (4.10) является прямым тензорным произведением неприводимых тензоров рангов J_i и J_f с проекциями M_i и M_f. Используя методы алгебры неприводимых тензоров, это произведение можно представить как суперпозицию неприводимых тензорных амплитуд U_{pm} с рангами p от $|J_i - J_f|$ до $(J_i + J_f)$ (мы предполагаем одинаковые четности,

$\pi_i = \pi_f$, состояний $|i\rangle$ и $|f\rangle$, при этом комбинация $(J+J'+\lambda+\lambda')$ есть четное целое, в противном случае ($\pi_i = -\pi_f$) есть нечетное число)

$$U_{fi} = \sum_{pm} \sqrt{2p+1} C^{J_i M_i}_{pm\, J_f M_f} U_{pm}, \tag{4.32}$$

$$U_{pm} = \alpha \sum_{J=1}^{\infty} \sum_{J'=|J-p|}^{J+p} \sum_{\lambda,\lambda'} \alpha^{\lambda\lambda'}_{pJJ'}(\omega_1, \omega_2) T^{J\lambda;J'\lambda'}_{pm}. \tag{4.33}$$

Инвариантные атомные факторы, не зависящие от углов и поляризаций равны

$$\begin{aligned}
\alpha^{\lambda\lambda'}_{pJJ'}(\omega_1, \omega_2) &= 4\pi i^{J-J'+\lambda-\lambda'} (-1)^{J_i+J_f} \sqrt{\frac{2p+1}{2J_i+1}} \\
&\times \sum_{J_n} \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{E_n} \left(\begin{Bmatrix} J' & J & p \\ J_i & J_f & J_n \end{Bmatrix} \frac{R^{J'\lambda'}_{J_f J_n}(\omega_2) R^{J\lambda}_{J_n J_i}(\omega_1)}{E_i + \omega_1 - E_n} \right. \\
&\left. + (-1)^{p+J-J'} \begin{Bmatrix} J & J' & p \\ J_i & J_f & J_n \end{Bmatrix} \frac{R^{J\lambda}_{J_f J_n}(\omega_1) R^{J'\lambda'}_{J_n J_i}(\omega_2)}{E_i - \omega_2 - E_n} \right).
\end{aligned} \tag{4.34}$$

Для упругого рассеяния ($\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$, $|i\rangle = |f\rangle$) эти параметры удовлетворяют важному соотношению симметрии

$$\alpha^{\lambda\lambda'}_{pJJ'}(\omega, \omega) = (-1)^{\lambda+\lambda'} \alpha^{\lambda'\lambda}_{pJ'J}(\omega, \omega), \tag{4.35}$$

а для случая $J = J'$ (т.е когда $p = 0$) и $\lambda = \lambda'$, они пропорциональны мультипольным динамическим поляризуемостям электрического ($\lambda = 1$) или магнитного ($\lambda = 0$) типов.

Эффекты фотонной поляризации и угловая зависимость амплитуды определяются неприводимыми тензорами T_{pm} («кинематическими факторами»)

$$T^{J\lambda;J'\lambda'}_{pm} = 4\pi \left\{ \left(\mathbf{e}_1 \cdot \mathcal{Y}^{(\lambda)}_J(\mathbf{n}_1) \right) \otimes \left(\mathbf{e}^*_2 \cdot \mathcal{Y}^{(\lambda')}_{J'}(\mathbf{n}_2) \right) \right\}_{pm}. \tag{4.36}$$

Неприводимые амплитуды U_{pm} с различными p не интерферируют, так что сечение есть сумма «парциальных сечений» с фиксированными p

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{k}_2}} = \frac{\omega_2}{\omega_1} \sum_{p=|J_i-J_f|}^{J_i+J_f} \sum_m |U_{pm}|^2. \tag{4.37}$$

Результаты (4.33) - (4.36) представляют обобщение хорошо известного разложения нерелятивистской дипольно-дипольной ($E1 - E1$) двухфотонной амплитуды на неприводимые части [3], на случай произвольной мультипольности. Для ($E1 - E1$) перехода, т.е. при $J = J' = 1$, $\lambda = \lambda' = 1$, тензор T_{pm} тривиально сводится к $\{\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}^*_2\}_{pm}$ с $p = 0, 1, 2$. Таким образом, в этом случае (4.37) приводит к разложению сечения при произвольных J_i, J_f на скалярную ($p = 0$), антисимметричную ($p = 1$) и симметричную части ($p = 2$) с правилами отбора $\Delta J = |J_i - J_f| \leq 2$. После использования длинноволнового приближения для сферических функций Бесселя в определении $a^{(1)}_{J=1,M}(\omega; \mathbf{r})$, это разложение сводится к нерелятивистскому результату (4.4). В «мультипольном» случае не существует специальных правил отбора для моментов J_i, J_f и для индексов p, так что p пробегает все значения в интервале $|J_i - J_f| \le p \le (J_i + J_f)$. Далее, в парциальную амплитуду U_{pm} при фиксированном p дают вклад высшие мультипольности как $EJ - EJ'$ и $MJ - MJ'$ переходов (члены с $\lambda = \lambda' = 1$ или 0), так и интерферирующих переходов $EJ - MJ'$ (члены с $\lambda \ne \lambda'$).

Поскольку вычисление в явном виде тензоров $T_{pm}^{J,\lambda;J',\lambda'}$ при произвольных p практически невозможно, ниже приведены вычисления только для простейшего и наиболее важного случая скалярной и антисимметричной (псевдовекторной) амплитуд U_{pm} с $p = 0, 1$. При произвольных значениях p мы дальше используем более абстрактный подход (см. раздел 4.4).

4.3.2 Скалярная амплитуда и сечения для атомов с заполненными оболочками ($J_i = J_f = 0$)

При $p = 0$ параметры α в (4.34) отличны от нуля только если $J_i = J_f$, при этом мы имеем

$$\alpha_{pJJ'}^{\lambda\lambda'}\Big|_{p=0} = \delta_{\lambda,\lambda'}\delta_{J,J'}\delta_{J_i,J_f}\,\alpha_J^{\lambda}. \tag{4.38}$$

Таким образом, как и в нерелятивистском рассеянии, скалярная часть сечения отлична от нуля только для переходов между состояниями с равными значениями углового момента и его проекции. Отметим, что при $|i\rangle \equiv |f\rangle$ скалярное рассеяние определяет сечение когерентного рассеяния.

Используя равенства (Г.2) и теорему сложения для сферических функций, после простых манипуляций с тензорами (некоторые детали см. в [57] и в Приложении для случая $p = 1$), скаляры $T_{p=0}^{J\lambda;J\lambda} \equiv T_0^{J\lambda}$ могут быть представлены в форме

$$T_0^{J,\lambda=1} = \frac{(-1)^J\sqrt{2J+1}}{J(J+1)}(\mathbf{e}_1\cdot\nabla_{\mathbf{n}_1})(\mathbf{e}_2^*\cdot\nabla_{\mathbf{n}_2})P_J(\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{n}_2),$$

$$T_0^{J,\lambda=0} = -\frac{(-1)^J\sqrt{2J+1}}{J(J+1)}(\mathbf{e}_1\cdot[\mathbf{n}_1\times\nabla_{\mathbf{n}_1}])(\mathbf{e}_1^*\cdot[\mathbf{n}_2\times\nabla_{\mathbf{n}_2}])P_J(\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{n}_2),$$

где $\nabla_{\mathbf{n}}$ есть операторы градиента и P_J — полиномы Лежандра от $\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{n}_2 = \cos\theta$. После прямого дифференцирования эти выражения принимают вид

$$T_0^{J,\lambda=1} = (-1)^J\frac{\sqrt{2J+1}}{J(J+1)}\Big[(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*)P_J^{(1)}(x) + (\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{n}_2)(\mathbf{e}_2\cdot^*\mathbf{n}_1)P_J^{(2)}(x)\Big], \tag{4.39}$$

$$\begin{aligned} T_0^{J,\lambda=0} = (-1)^{J+1}\frac{\sqrt{2J+1}}{J(J+1)}\Big[&\frac{1}{2}(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*)\left(J(J+1)P_J(x) - \sin^2\theta P_J^{(2)}(x)\right) \\ &-(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{n}_2)(\mathbf{e}_2^*\cdot\mathbf{n}_1)\left(P_J^{(1)}(x) - xP_J^{(2)}(x)\right)\Big]. \end{aligned}$$

Здесь $P_J^{(n)}(x) = d^nP_J(x)/dx^n,\ x = \cos\theta$; $P_J^n(\theta) = (-\sin\theta)^nP_J^{(n)}(x)$ — присоединенные полиномы Лежандра.

В результате скалярная амплитуда $U_{p=0} \equiv U_{fi}^{(0)}$ может быть представлена в виде (4.23) со следующими выражениями для инвариантных амплитуд

$$\chi_1(\cos\theta) = \sum_{J=1}^{\infty}(-1)^J \frac{\sqrt{2J+1}}{J(J+1)}\Big[\alpha_J^0(\sin^2\theta P_J^{(2)}(x) - xP_J^{(1)}(x)) + \alpha_J^1 P_J^{(1)}(x)\Big],$$

$$\chi_2(\cos\theta) = \sum_{J=1}^{\infty}(-1)^J \frac{\sqrt{2J+1}}{J(J+1)}\Big[\alpha_J^0(P_J^{(1)}(x) + xP_J^{(2)}(x)) + \alpha_J^1 P_J^{(2)}(x)\Big]. \qquad (4.40)$$

Как видно, $\chi_{1,2}$ есть сумма электрических и магнитных вкладов. Наиболее простая связь электрической и магнитной частей амплитуды рассеяния существует для «амплитуд циркулярной поляризации»

$$A_{NSF} \equiv A_+ = \cos^2\frac{\theta}{2}\sum_{J=1}^{\infty}(-1)^J \frac{\sqrt{2J+1}}{J(J+1)}(\alpha_J^1 - \alpha_J^0) \times \left[P_J^{(1)}(x) - 2\sin^2\frac{\theta}{2}P_J^{(2)}(x)\right], \quad (4.41)$$

$$A_{SF} \equiv A_- = -\sin^2\frac{\theta}{2}\sum_{J=1}^{\infty}(-1)^J \frac{\sqrt{2J+1}}{J(J+1)}(\alpha_J^1 + \alpha_J^0) \times \left[P_J^{(1)}(x) + 2\cos^2\frac{\theta}{2}P_J^{(2)}(x)\right]. \quad (4.42)$$

Сечение скалярного рассеяния $\frac{d\sigma}{d\Omega}\Big|_{scal.}$, имеет вид (4.23), (4.24). Для переходов с $J_i = J_f = 0$ полная амплитуда U_{fi} включает только скалярную часть, так что изложенные выше результаты полностью определяют сечения $J_i = 0 - J_f = 0$ переходов для любого атома или иона с заполненными электронными оболочками [56]. Отметим, что параметры α_J^0, α_J^1 в (4.40) в этом случае определяются равенствами (4.34), (4.38) с $J_i = J_f = 0$ и имеют простейший вид. Далее, из явного вида выражений для параметров $A_\pm$ видно, что только один из них отличен от нуля при $\theta = 0$ или π. Таким образом, мы имеем

$$d_1(0) = d_3(0), \quad d_1(\pi) = -d_3(\pi), \qquad d_2 = d_4 = 0.$$

Наконец, в $E1$ приближении d_1 не зависит от θ, поэтому разница между $d_1(0)$ и $d_1(\pi)$ обусловлена эффектами недипольности.

4.3.3 Антисимметричная амплитуда и сечения переходов с $J_i = J_f = 1/2$

Антисимметричная амплитуда U_{1m} является псевдовектором, поскольку содержит 6 аксиальных тензоров $T_{1m}^{J\lambda\, J'\lambda'}$ ранга 1 с $J = J', \lambda = \lambda'$ или $J = J' \pm 1, \lambda \neq \lambda'$, т.е. $\lambda = 0, \lambda' = 1$ или $\lambda = 1, \lambda' = 0$. Эти тензоры имеют более сложную структуру, чем скаляры $T_0^{J\lambda}$ в (4.39), однако, также могут быть вычислены с использованием тех же методов тензорного исчисления. Пример такого вычисления см. в приложении Г.

После вычисления T_{1m} и некоторых преобразований, явная форма амплитуды $U_{1m} \equiv U_{fi}^{(1)}$ может быть представлена в виде

$$U_{fi}^{(1)} = i\alpha\sqrt{3}\Big\{\phi_0[\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2^*]_m + \big(\phi_1(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2^*) + \phi_2(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_2)(\mathbf{e}_2^* \cdot \mathbf{n}_1)\big)[\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2]_m$$
$$+ \phi_3(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_2)[\mathbf{e}_2^* \times \mathbf{n}_2]_m + \phi_4(\mathbf{e}_2^* \cdot \mathbf{n}_1)[\mathbf{e}_1 \times \mathbf{n}_1]_m$$
$$+ \phi_5(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_2)[\mathbf{e}_2^* \times \mathbf{n}_1]_m + \phi_6(\mathbf{e}_2^* \cdot \mathbf{n}_1)[\mathbf{e}_1 \times \mathbf{n}_2]_m\Big\}. \quad (4.43)$$

Как видно, амплитуда содержит 6 различных аксиальных векторов типа $[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]_m$, которые можно было построить и из соображений симметрии, а также 7 факторов ϕ_i, зависящих от θ. Эти факторы можно представить как комбинацию параметров $f_\lambda(\cos\theta)$, $g_\lambda(\cos\theta)$, $h_\lambda(\cos\theta)$ с $\lambda = 0, 1$ и их производных по переменной $x = \cos\theta$ (например $f'_\lambda = df_\lambda/dx$, и т.д.):

$$\phi_0 = \cos\theta[f_0 - g_1 + h_1] - f_1 - g_0 + h_0, \quad (4.44)$$

$$\phi_1 = f_0 + 3\cos\theta f'_0 - \sin^2\theta f''_0 - f'_1 + g_1 - h_1,$$

$$\phi_2 = -3f'_0 - \cos\theta f''_0 - f''_1 + g'_1 - h'_1,$$

$$\phi_3 = f'_0 - g'_1 + 2h_0 + \cos\theta h'_0,$$

$$\phi_4 = -f'_0 + 2g_0 + \cos\theta g'_0 - h'_1,$$

$$\phi_5 = f_0 + f'_1 + g_1 + \cos\theta g'_1 - h'_0 + h_1,$$

$$\phi_6 = -f_0 - f'_1 - g'_0 + g_1 + h_1 + \cos\theta h'_1.$$

Для упругого рассеяния мы имеем $h_\lambda = -g_\lambda, \quad \phi_3 = -\phi_4, \quad \phi_5 = -\phi_6$.

Зависящие от θ параметры f_λ, g_λ, h_λ являются рядами производных полиномов Лежандра,

$$f_\lambda(\cos\theta) = \sum_{J=1}^{\infty}(-1)^J \frac{\sqrt{2J+1}}{[J(J+1)]^{3/2}} P_J^{(1)}(\cos\theta)\alpha_{1JJ}^{\lambda\,\lambda}(\omega,\omega'), \quad (4.45)$$

$$g_\lambda(\cos\theta) = \sum_{J=2}^{\infty}\sum_{J'=J\pm1}(-1)^{J+\lambda}\frac{P_J^{(2)}(\cos\theta)}{\sqrt{J_{\max}JJ'(J+1)(J'+1)}}\alpha_{1JJ'}^{\lambda\,1-\lambda}(\omega,\omega'),$$

$$h_\lambda(\cos\theta) = \sum_{J=2}^{\infty}\sum_{J'=J\pm1}(-1)^{J+\lambda}\frac{P_J^{(2)}(\cos\theta)}{\sqrt{J_{\max}JJ'(J+1)(J'+1)}}\alpha_{1J'J}^{1-\lambda\,\lambda}(\omega,\omega').$$

Сечение антисимметричного рассеяния может быть выписано с учетом (4.37), однако, мы сразу скомбинируем его со скалярной частью сечения и приведем явный вид коэффициентов a_i в (4.16) для этого случая,

$$a_1 = \frac{1}{6}\sin^2\theta\,\mathrm{Re}(5X_1 - X_0) + |\phi_1|^2\sin^2\theta + \frac{3}{2}|\chi_1|^2; \quad (4.46)$$

$$a_7 = \mathrm{Im}\,X_0\cos\theta; \quad a_8 = -\mathrm{Im}\,X_1\cos\theta$$

$$2a_2 = -\operatorname{Re} X_1 \sin^2\theta + 2|\phi_0|^2;\ a_3 = \frac{5}{3}\operatorname{Re}(X_1 + 2X_0)\sin^2\theta;$$

$$a_4 = |\phi_4|^2 + |\phi_6|^2 + 2\operatorname{Re}\Big(\phi_4^*\phi_0 + \phi_4^*\phi_6\cos\theta - \frac{1}{2}X_0\Big);$$

$$a_5 = |\phi_3|^2 + |\phi_5|^2 - 2\operatorname{Re}\Big(\phi_3^*\phi_0 - \phi_3^*\phi_5\cos\theta + \frac{1}{2}X_0\Big);$$

$$a_6 = \frac{3}{2}|\chi_2|^2 + |\phi_2|^2\sin^2\theta - |\phi_5|^2 - |\phi_6|^2$$

$$+2\operatorname{Re}\Big(\frac{1}{2}X_0 - \phi_4^*\phi_3 + \phi_2^*\big(\phi_3 - \phi_4 - \phi_5 + \phi_5\cos\theta - \phi_6\cos\theta\big)\Big);$$

Здесь

$$X_i = \frac{1}{\cos\theta}\Big\{\frac{3}{2}\chi_1\chi_2^* + \phi_1\left(\sin^2\theta\phi_2^* + \phi_3^* - \phi_4^* - \phi_0^* + \cos\theta\phi_5^* - \cos\theta\phi_6^*\right) + \tag{4.47}$$

$$+(-1)^i\left\{\phi_4\left(\cos\theta\phi_3^* + \phi_6^*\right) + \phi_5\phi_5^* + \phi_6\left(\phi_3^* - \phi_0^* + \cos\theta\phi_5^*\right)\right\}\Big\}. \quad i = 0, 1$$

Для переходов с $J_i = J_f = 1/2$ полная амплитуда есть

$$U_{fi} = U_{fi}^{(0)} + \sqrt{3}C_{1m\frac{1}{2}M_f}^{\frac{1}{2}M_i}U_{fi}^{(1)},$$

так что приведенное выше выражение (4.46) дает окончательную форму параметров a_i в сечении (4.16) для $J_i = 1/2$ — $J_f = 1/2$-переходов. Явный вид $\chi_{1,2}$ и f_λ, g_λ, h_λ для этого перехода в случае одноэлектронного атома в терминах радиальных матричных элементов см. в разделе 4.5.1.

4.4 Параметры сечений для произвольных моментов J_i, J_f

При произвольных p более удобно представлять $|U_{fi}|^2$ в виде:

$$|U_{fi}|^2 = (4\pi)^2\sum\beta_{J'\lambda'K'\nu',n}^{J\lambda K\nu}\left(\{(\mathbf{e}_1\cdot\mathcal{Y}_J^{(\lambda)}(\mathbf{n}_1))\otimes(\mathbf{e}_1^*\cdot\mathcal{Y}_K^{(\nu)}(\mathbf{n}_1))\}_n\right.$$
$$\left.\cdot\{(\mathbf{e}_2^*\cdot\mathcal{Y}_{J'}^{(\lambda')}(\mathbf{n}_2))\otimes(\mathbf{e}_2\cdot\mathcal{Y}_{K'}^{(\nu')}(\mathbf{n}_2))\}_n\right), \tag{4.48}$$

где суммирования проводятся по индексам $J, J', K, K', \lambda, \lambda', \nu, \nu', n$. Коэффициенты $\beta_{J'\lambda'K'\nu',n}^{J\lambda K\nu}$ равны

$$\beta_{J'\lambda'K'\nu',n}^{J\lambda K\nu} = \alpha^2\sum_p(-1)^{K+K'+\lambda'+\nu'+p}(2p+1)\begin{Bmatrix} J & J' & p \\ K' & K & n\end{Bmatrix}$$
$$\times\,\alpha_{pJJ'}^{\lambda\lambda'}(\omega_1,\omega_2)\,\alpha_{pKK'}^{\nu\nu'*}(\omega_1,\omega_2). \tag{4.49}$$

Из этого соотношения видно, что индекс p является «свободным», т.е он не входит в радиальные матричные элементы в (4.34), поэтому суммирование по p может быть проведено после подстановки (4.49) в (4.34), однако, для простоты, мы не делаем этого.

Вследствие закона сохранения четности, получаем, что комбинация $J + J' + K + K' + \lambda + \lambda' + \nu + \nu'$ — четное число. Из (4.49) следует, что коэффициенты β удовлетворяют соотношению симметрии:

$$\beta^{J\lambda\,K\nu *}_{J'\lambda'\,K'\nu',n} = (-1)^{\lambda+\lambda'+\nu+\nu'}\,\beta^{J'\lambda'\,K'\nu'}_{J\lambda\,K\nu,n}\,. \tag{4.50}$$

Введем специальное обозначение для тензора в (4.48):

$$T^{J\lambda\,K\nu}_{nq} = \{(\mathbf{e}_1\cdot\mathcal{Y}^{(\lambda)}_J(\mathbf{n}_1))\otimes(\mathbf{e}^*_1\cdot\mathcal{Y}^{(\nu)}_K(\mathbf{n}_1))\}_{nq}.$$

Следующий шаг – представить тензор $T^{J\lambda\,K\nu}_{nq}$ как комбинацию тензорных произведений одной сферической функции $Y_{lm}(\mathbf{n}_1)$ с векторами фотонной поляризации $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}^*_1$. Повторяя рассмотрение, проведенное в разделе 3.4, получаем:

$$\begin{aligned}
T^{J\lambda\,K\nu}_{nq} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}}\Big(A^{(0)}_n\ - i\,A^{(1)}_n\,([\mathbf{e}_1\times\mathbf{e}^*_1]\cdot\mathbf{n}_1)\Big)\,Y_{nq}(\mathbf{n}_1)&\\
+\,A^{(2)}_n\,\sqrt{2n-1}\,\{\{\mathbf{e}_1\otimes\mathbf{e}^*_1\}_2\otimes Y_{n-2}(\mathbf{n}_1)\}_{nq}&\\
+\,A^{(3)}_n\,i\,\sqrt{2n-1}\,\big(\{\{[\mathbf{e}_1\times\mathbf{n}_1]\otimes\mathbf{e}^*_1\}_2\otimes Y_{n-2}(\mathbf{n}_1)\}_{nq}&\\
+\,\{\{[\mathbf{e}^*_1\times\mathbf{n}_1]\otimes\mathbf{e}_1\}_2\otimes Y_{n-2}(\mathbf{n}_1)\}_{nq}\Big),&
\end{aligned} \tag{4.51}$$

где коэффициенты $A^{(i)}_n = A^{(i)}_n(J\lambda\,K\nu)$ имеют вид:

$$\begin{aligned}
A^{(0)}_n(J\lambda\,K\nu) &= \frac{1+(-1)^{\lambda_p}}{4}\,\Pi_{JK}\,\Big((-1)^{\lambda}C^{n0}_{J1\,K-1}\\
&\quad+(-1)^{\lambda+\nu}\sqrt{\frac{n(n-1)}{(n+1)(n+2)}}\,C^{n2}_{J1\,K1}\Big)\\
A^{(1)}_n(J\lambda\,K\nu) &= \frac{1-(-1)^{\lambda_p}}{4}\,(-1)^{\lambda}\,\Pi_{JK}\,C^{n0}_{J1\,K-1}\\
A^{(2)}_n(J\lambda\,K\nu) &= \frac{1+(-1)^{\lambda_p}}{2}\,\frac{(-1)^{\lambda+\nu}}{\sqrt{(n+1)(n+2)}}\,\Pi_{JK}\,C^{n2}_{J1\,K1}\\
A^{(3)}_n(J\lambda\,K\nu) &= \frac{1-(-1)^{\lambda_p}}{4}\,\frac{(-1)^{\lambda+\nu}}{\sqrt{(n+1)(n+2)}}\,\Pi_{JK}\,C^{n2}_{J1\,K1},
\end{aligned} \tag{4.52}$$

здесь параметр $\lambda_p = J + K + \lambda + \nu$ определяет четность тензора $R^{J\lambda\,K\nu}_{nq}$ относительно пространственных отражений. Отметим свойство симметрии коэффициентов A

$$A^{(k)}_n(J\lambda\,K\nu) = (-1)^{\lambda+\nu+\phi}\,A^{(k)}_n(K\nu\,J\lambda), \tag{4.53}$$

где $\phi = 1$ при $k = 3$, в противном случае $\phi = 0$, и этот дополнительный фазовый фактор является причиной эффектов ЦД. Равенство (4.53) следует из определения (4.52) с учетом свойств симметрии коэффициентов Клебша-Гордана. Ниже мы будем использовать также обозначение $A^{(k)}_n(J'\lambda'\,K'\nu') \equiv A'^{(k)}_n$.

Далее, для вычисления тензорного произведения в (4.48) мы будем использовать результаты главы 2. Например, член с $A^{(2)}_n$ в (4.51) можно представить в виде:

$$\{\{\mathbf{e}_1\otimes\mathbf{e}^*_1\}_2\otimes Y_{n-2}(\mathbf{n}_1)\}_{nq} = \frac{|\mathbf{e}_1\cdot\nabla_1|^2}{\sqrt{n(n-1)(2n-1)(2n+1)}}\ \ r^n_1\,Y_{nq}(\mathbf{r}_1/r_1)\big|_{\mathbf{r}_1=\mathbf{n}_1}\,,$$

где $\nabla_1 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,\mathbf{r}_1}$.

Теперь можно записать $|U_{fi}|^2$ так

$$
\begin{aligned}
|U_{fi}|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \Big(B_n^{(1)} + B_n^{(2)}\,|\mathbf{e}_1 \cdot \nabla_1|^2 \cdot |\mathbf{e}_2 \cdot \nabla_2|^2 \\
+ B_n^{(3)}\left(2\,\mathrm{Re}([\mathbf{e}_1^* \times \mathbf{r}_1] \cdot \nabla_1)(\mathbf{e}_1^* \cdot \nabla_1)\right)\left(2\,\mathrm{Re}([\mathbf{e}_2^* \times \mathbf{r}_2] \cdot \nabla_2)(\mathbf{e}_2^* \cdot \nabla_2)\right) \\
+ B_n^{(4)}\,|\mathbf{e}_2 \cdot \nabla_2|^2 + B_n^{(5)}\,|\mathbf{e}_1 \cdot \nabla_1|^2 + B_n^{(6)}\,([\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_1^*] \cdot \mathbf{r}_1)([\mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_2^*] \cdot \mathbf{r}_2) \\
+ B_n^{(7)}\,([\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_1^*] \cdot \mathbf{r}_1)\left(2\,\mathrm{Re}([\mathbf{e}_2 \times \mathbf{r}_2] \cdot \nabla_2)(\mathbf{e}_2^* \cdot \nabla_2)\right) \\
+ B_n^{(8)}\,([\mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_2^*] \cdot \mathbf{r}_2)\left(2\,\mathrm{Re}([\mathbf{e}_1 \times \mathbf{r}_1] \cdot \nabla_1)(\mathbf{e}_1^* \cdot \nabla_1)\right) \Big)\, r_1^n r_2^n\; P_n(\cos\theta)\big|_{\mathbf{r}_1=\mathbf{n}_1,\,\mathbf{r}_2=\mathbf{n}_2}
\end{aligned}
\tag{4.54}
$$

здесь $\cos\theta = \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 / r_1 r_2$, и $P_n(\cos\theta)$ есть полиномы Лежандра. Коэффициенты $B_n^{(k)}$ имеют вид

$$B_n^{(1)} = \sum \beta^{J\lambda\,K\nu}_{J'\lambda'\,K'\nu',n}\, A_n^{(0)} {A'}_n^{(0)} \tag{4.55}$$

$$B_n^{(2)} = \frac{1}{n(n-1)} \sum \beta^{J\lambda\,K\nu}_{J'\lambda'\,K'\nu',n}\, A_n^{(2)} {A'}_n^{(2)} \tag{4.56}$$

$$B_n^{(3)} = -\frac{1}{n(n-1)} \sum \beta^{J\lambda\,K\nu}_{J'\lambda'\,K'\nu',n}\, A_n^{(3)} {A'}_n^{(3)} \tag{4.57}$$

$$B_n^{(4)} = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} \sum \beta^{J\lambda\,K\nu}_{J'\lambda'\,K'\nu',n}\, A_n^{(0)} {A'}_n^{(2)} \tag{4.58}$$

$$B_n^{(5)} = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} \sum \beta^{J\lambda\,K\nu}_{J'\lambda'\,K'\nu',n}\, A_n^{(3)} {A'}_n^{(3)} \tag{4.59}$$

$$B_n^{(6)} = \sum \beta^{J\lambda\,K\nu}_{J'\lambda'\,K'\nu',n}\, A_n^{(1)} {A'}_n^{(1)} \tag{4.60}$$

$$B_n^{(7)} = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} \sum \beta^{J\lambda\,K\nu}_{J'\lambda'\,K'\nu',n}\, A_n^{(1)} {A'}_n^{(3)} \tag{4.61}$$

$$B_n^{(8)} = -\frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} \sum \beta^{J\lambda\,K\nu}_{J'\lambda'\,K'\nu',n}\, A_n^{(3)} {A'}_n^{(1)}, \tag{4.62}$$

где суммирования проводятся по всем индексам в $\beta^{J\lambda\,K\nu}_{J'\lambda'\,K'\nu',n}$ (за исключением n). Отметим, что произведения вида $A_n^{(\alpha)} {A'}_n^{(\beta)}$ с различной четностью α и β (например, $A_n^{(1)} {A'}_n^{(2)}$) не входят в определение коэффициентов B_n из-за наличия фазовых факторов в определениях (4.52). Из соотношений (4.54), (4.53) следует, что коэффициенты $B_n^{(i)}$ при $i = 1, 2 \ldots 6$ являются вещественными, а при $i = 7, 8$ — чисто мнимыми величинами. Это означает, как и было указано выше, что имеющие интерференционную природу коэффициенты $B_n^{(7,8)}$, определяют величину эффектов ЦД.

Действие операторов ∇ на полиномы Лежандра вычисляется с использованием соотношения (.7) приложения Б. Например, член с $B_n^{(5)}$ в (4.54) можно записать в виде

$$|\mathbf{e}_1 \cdot \nabla_1|^2\, r_1^n\, P_n(\cos\theta) = |\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_2|^2\, P_n^{(2)}(\cos\theta) - P_{n-1}^{(1)}(\cos\theta).$$

Таким образом, коэффициенты a_k в (4.16) могут быть представлены как комбинации произведений параметров $B_n^{(i)}$ и производных от полиномов Лежандра (которые фактически являются полиномами Гегенбауэра).

$$a_1 = \frac{1}{3}\sum_{n=0}^{\infty}\Big(B_n^{(1)}\,P_n(x) + B_n^{(2)}\left(4P_n^{(2)}(x) + P_{n-2}^{(2)}(x) - 2P_{n-1}^{(1)}(x)\right)$$
$$+ 12B_n^{(3)}\left(\cos\theta\,P_n^{(2)}(x) - \sin^2\theta\,P_n^{(3)}(x)\right)$$
$$- P_{n-1}^{(1)}(x)\left(B_n^{(4)} + B_n^{(5)}\right) - 2B_n^{(6)}\,\frac{P_n(x)}{\cos\theta}\Big) - \frac{2}{3}\frac{\sin^2\theta}{\cos\theta}Y$$

$$a_2 = \sum_{n=0}^{\infty}\Big(B_n^{(1)}\,P_n(x) - B_n^{(2)}\left(P_n^{(2)}(x) - P_{n-2}^{(2)}(x) + 2P_{n-1}^{(1)}(x)\right)$$
$$- 8B_n^{(3)}\left(\cos\theta\,P_n^{(2)}(x) - \sin^2\theta\,P_n^{(3)}(x)\right)$$
$$- P_{n-1}^{(1)}(x)\left(B_n^{(4)} + B_n^{(5)}\right) - B_n^{(6)}\,\frac{P_n(x)}{\cos\theta}\Big) + \frac{3\sin^2\theta}{\cos\theta}Y$$

$$a_3 = \frac{5}{3}\sum_{n=0}^{\infty}\Big(B_n^{(1)}\,P_n(x) + B_n^{(2)}\left(P_n^{(2)}(x) + P_{n-2}^{(2)}(x) - 2P_{n-1}^{(1)}(x)\right)$$
$$- P_{n-1}^{(1)}(x)\left(B_n^{(4)} + B_n^{(5)}\right) + B_n^{(6)}\,\frac{P_n(x)}{\cos\theta}\Big) + \frac{5}{3}\frac{\sin^2\theta}{\cos\theta}Y$$
$$a_{4,5} = \sum_{n=2}^{\infty}\Big(B_n^{(4,5)}\,P_n^{(2)}(x) - B_n^{(2)}\,P_{n-1}^{(3)}(x)\Big) - \frac{2Y}{\cos\theta}$$
$$\begin{aligned} a_6 &= \sum_{n=3}^{\infty}\Big(B_n^{(2)}\,P_n^{(4)}(x) - 4B_n^{(3)}\left(\cos\theta\,P_n^{(4)}(x) - 2P_n^{(3)}\right)\Big) + \frac{2Y}{\cos\theta} \\ a_{7,8} &= \sum_{n=2}^{\infty}P_n^{(2)}(x)\,\mathrm{Im}\,B_n^{(7,8)} \\ Y &= \sum_{n=2}^{\infty}\Big(B_n^{(2)}\,P_n^{(3)}(x) - B_n^{(3)}\left(\sin^2\theta\,P_n^{(4)}(x) + 2P_n^{(2)}(x)\right)\Big). \end{aligned} \tag{4.63}$$

Здесь мы используем обозначение $x = \cos\theta$. Мы также полагаем, что $P_n^{(m)}(x) \equiv 0$ при $m > n$. В равенстве (4.63) a_4 соответствует $B_n^{(4)}$, a_5 – $B_n^{(5)}$, и аналогично для $a_{7,8}$.

4.5 Одноэлектронное приближение и численные оценки для водородоподобных ионов

4.5.1 Параметры $\alpha_{pJJ'}^{\lambda\lambda'}$ в одноэлектронном приближении

Результаты предыдущего раздела применимы к анализу двухквантовых переходов произвольно ориентированной мишени. Специфика мишени описывается только набором частотнозависящих параметров $\alpha_{pJJ'}^{\lambda\lambda'}$. Выражение (4.34) для этих параметров упрощается в одноэлектронном приближении (для атомов с одним электроном в незаполненной внешней оболочке или водородоподобных ионов). Мы используем стандартное обозначение для одноэлектронного биспинора

$$\Psi_{J,L,M}(E;\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} |EJL\rangle \ \Omega_{JLM} \\ i\,|EJL'\rangle \ \Omega_{JL'M} \end{pmatrix}, \tag{4.64}$$

где $|EJL\rangle$ и $|EJL'\rangle$ есть радиальные части большой и малой компонент волновой функции, $L' = 2J - L$. Ω_{JLM} – сферический спинор. Для суммирования по промежуточным состояниям $\{E_n\}$ в (4.34) мы используем парциальное разложение одноэлектронной функции Грина,

$$G(E;\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{E_n J_n L_n M_n} \frac{\Psi_{J_n,L_n,M_n}(E_n;\mathbf{r})\overline{\Psi_{J_n,L_n,M_n}(E_n;\mathbf{r}')}}{E - E_n}$$

$$= \sum_{J_n L_n M_n} G_{J_n L_n M_n}(E;\mathbf{r},\mathbf{r}'),$$

матрица $G_{J_n L_n}(E;r,r')$ радиальных частей для которой имеет вид

$$G_{J_n L_n}(E;r,r') = \begin{pmatrix} G^{(1)}_{J_n L_n}(E;r,r') & iG^{(2)}_{J_n L_n}(E;r,r') \\ iG^{(3)}_{J_n L_n}(E;r,r') & -G^{(4)}_{J_n L_n}(E;r,r') \end{pmatrix}. \tag{4.65}$$

В этих обозначениях инвариантные атомные амплитуды (4.34) равны

$$\alpha^{\lambda\lambda'}_{pJJ'}(\omega_1,\omega_2) = i^{J-J'+\lambda-\lambda'}(-1)^{J_i+J_f+1}\frac{1}{\sqrt{2J_i+1}}$$
$$\times \sum_{J_n,L_n}\left(\begin{Bmatrix} J' & J & p \\ J_i & J_f & J_n \end{Bmatrix} M^{\lambda'\lambda}_{J'J}(\omega_2,\omega_1)\right.$$
$$\left. + (-1)^{p+J-J'}\begin{Bmatrix} J & J' & p \\ J_i & J_f & J_n \end{Bmatrix} M^{\lambda\lambda'}_{JJ'}(\omega_1,-\omega_2)\right). \tag{4.66}$$

Здесь $(J + J' + \lambda + \lambda')$ – четные числа и $M^{\lambda'\lambda}_{J'J}(\omega,\omega')$ есть приведенные матричные элементы радиальной функции Грина $G_{J_n L_n M_n}(E_i + \omega';\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1)$

$$M^{\lambda'\lambda}_{J'J}(\omega_2,\omega_1) = 4\pi\ \langle E_f J_f L_f \|\ \vec{\alpha}\cdot\mathbf{a}^{(\lambda')}_{J'}(|\omega_2|;\mathbf{r}_2)$$
$$\times G_{J_n L_n}(E_i+\omega_1;\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1)\vec{\alpha}\cdot\mathbf{a}^{(\lambda)}_{J}(|\omega_1|;\mathbf{r}_1)\,\| E_i J_i L_i\rangle\,. \tag{4.67}$$

$M^{\lambda\lambda'}_{JJ'}$ следует из $M^{\lambda'\lambda}_{J'J}$ после подстановок $E_i + \omega_1 \to E_i - \omega_2$, $\lambda J, \lambda' J' \to \lambda' J', \lambda J$, $|\omega_1| \to |\omega_2|$.

Приведенный матричный элемент (4.67) вычисляется стандартными методами техники углового момента и имеет следующее выражение в терминах радиальных матричных элементов второго порядка

$$M^{\lambda'\lambda}_{J'J} = (2J_n+1)\Pi_{J_iJ_f}\Big\{\big\langle E_f J_f L'_f\big|\,\xi^{(\lambda')}_{L'_f J' L_n}(x_2)G^{(1)}_{J_nL_n}\xi^{(\lambda)}_{L_n J L'_i}(x_1)\,\big|E_i J_i L'_i\big\rangle$$
$$+ \big\langle E_f J_f L'_f\big|\,\xi^{(\lambda')}_{L'_f J' L_n}(x_2)G^{(2)}_{J_nL_n}\xi^{(\lambda)}_{L'_n J L_i}(x_1)\,|E_i J_i L_i\rangle$$
$$- \langle E_f J_f L_f|\,\xi^{(\lambda')}_{L_f J' L'_n}(x_2)G^{(3)}_{J_nL_n}\xi^{(\lambda)}_{L_n J L'_i}(x_1)\,\big|E_i J_i L'_i\big\rangle$$
$$- \langle E_f J_f L_f|\,\xi^{(\lambda')}_{L_f J' L'_n}(x_2)G^{(4)}_{J_nL_n}\xi^{(\lambda)}_{L'_n J L_i}(x_1)\,|E_i J_i L_i\rangle\Big\}. \tag{4.68}$$

Здесь $|EJL\rangle \equiv \phi$ и $|EJL'\rangle \equiv \chi$ обозначают радиальные части верхней и нижней («большой» и «малой») компонент волновых функций, $L' = 2J - L$, $x_1 = k_1 r$, $x_2 = k_2 r$. Параметры ξ равны

$$\xi^{(0)}_{LJL'}(x_1) = (-1)^{L'} C^{J1}_{J_i\,\frac{1}{2} J_n\,\frac{1}{2}} j_J(x_1); \tag{4.69}$$

$$\xi^{(1)}_{LJL'}(x_1) = \frac{(-1)^{J_i-1/2}}{2J+1}\sqrt{\frac{J+1}{J}} C^{J0}_{J_n\,-\frac{1}{2} J_i\,\frac{1}{2}} \Big\{ j_{J-1}(x_1)\big[(J_i - L')(2J_i+1) + (J_n - L)(2J_n+1) + J\big] - \frac{J}{J+1} j_{J+1}(x_1)\big[(J_i - L')(2J_i+1) + (J_n - L)(2J_n+1) - J - 1\big]\Big\}. \tag{4.70}$$

$\xi^{(\lambda')}_{LJ'L'}(x_2)$ получается из $\xi^{(\lambda)}_{LJL'}(x_1)$ после подстановки $\{x_1 \to x_2, \quad J, \lambda \to J', \lambda'\}$ и также $\{J_i \to J_n, \quad J_n \to J_f\}$.

Результаты (4.66)–(4.69) справедливы для произвольных J_i, J_f. Для переходов с $J_i = J_f = 1/2$, $L_i = L_f = 0$ они упрощаются, поскольку коэффициенты Клебша-Гордана и $6j-$символы в ξ и α явно вычисляются. Так, в этом случае окончательные результаты для параметров скалярного $(\chi_1(\cos\theta), \chi_2(\cos\theta))$ и антисимметричного $(f_\lambda, g_\lambda, h_\lambda)$ рассеяния могут быть представлены в виде, содержащем только полиномы Лежандра и радиальные матричные элементы

$$\chi_1(\cos\theta) = 2\sum_{J=1}^{\infty}\Big\{ P^{(1)}_J(\cos\theta) \sum_{J_n=J\pm 1/2} \frac{1}{2J_n+1}\left(A^{(1)}_{JJ_n}(\omega) + A^{(1)}_{JJ_n}(-\omega')\right) + \left(\sin^2\theta P^{(2)}_J(\cos\theta) - \cos\theta P^{(1)}_J(\cos\theta)\right) \times \sum_{J_n=J\pm 1/2} \frac{1}{2J_n+1}\left(A^{(0)}_{JJ_n}(\omega) + A^{(0)}_{JJ_n}(-\omega')\right)\Big\}, \tag{4.71}$$

$$\chi_2(\cos\theta) = 2\sum_{J=1}^{\infty}\Big\{ P^{(2)}_J(\cos\theta) \sum_{J_n=J\pm 1/2} \frac{1}{2J_n+1}\left(A^{(1)}_{JJ_n}(\omega) + A^{(1)}_{JJ_n}(-\omega')\right) + \left(P^{(1)}_J(\cos\theta) + \cos\theta P^{(2)}_J(\cos\theta)\right) \times \sum_{J_n=J\pm 1/2} \frac{1}{2J_n+1}\left(A^{(0)}_{JJ_n}(\omega) + A^{(0)}_{JJ_n}(-\omega')\right)\Big\}, \tag{4.72}$$

$$f_\lambda(\cos\theta) = 4\sum_{J=1}^{\infty} P^{(1)}_J(\cos\theta) \sum_{J_n=J\pm 1/2} \frac{(-1)^{J+J_n-1/2}}{(2J_n+1)^2} \times \left(A^{(\lambda)}_{JJ_n}(\omega) - A^{(\lambda)}_{JJ_n}(-\omega')\right), \tag{4.73}$$

$$g_\lambda(\cos\theta) = \frac{1}{2}\sum_{J=2}^{\infty} P^{(2)}_J(\cos\theta) \times \sum_{J'=J\pm 1} \frac{(-1)^{(J-J'-1)/2}}{(J+J'+1)^2}\left(A^{(1-\lambda\,\lambda)}_{J'J}(\omega) - A^{(\lambda\,1-\lambda)}_{JJ'}(-\omega')\right), \tag{4.74}$$

$$h_\lambda(\cos\theta) = -\frac{1}{2}\sum_{J=2}^{\infty} P_J^{(2)}(\cos\theta)$$
$$\times \sum_{J'=J\pm1} \frac{(-1)^{(J-J'-1)/2}}{(J+J'+1)^2}\left(A_{JJ'}^{(\lambda\,1-\lambda)}(\omega) - A_{J'J}^{(1-\lambda\,\lambda)}(-\omega')\right). \quad (4.75)$$

Параметры A содержат только радиальные матричные элементы

$$A_{J,J\pm1/2}^{(0)}(\omega) = \left\langle E_f p_{1/2}\right| j_J(x_2) j_J(x_1)$$
$$\times \left\{G_{J\pm1/2,J\pm1}^{(1)}\left|E_i p_{1/2}\right\rangle + G_{J\pm1/2,J\pm1}^{(2)}\left|E_i s_{1/2}\right\rangle\right\}$$
$$- \left\langle E_f s_{1/2}\right| j_J(x_2) j_J(x_1)\left\{G_{J\pm1/2,J\pm1}^{(3)}\left|E_i p_{1/2}\right\rangle + G_{J\pm1/2,J\pm1}^{(4)}\left|E_i s_{1/2}\right\rangle\right\}$$

$$A_{J,J\pm1/2}^{(1)}(\omega) = \left\langle E_f p_{1/2}\right| \frac{(2J+1\pm1) j_{J\mp1}(x_2) \pm j_{J\pm1}(x_2)}{2J+1}$$
$$\times \left\{\frac{(2J+1\pm1) j_{J\mp1}(x_1) \pm j_{J\pm1}(x_1)}{2J+1} G_{J\pm1/2,J}^{(1)} + j_{J\pm1}(x_1) G_{J\pm1/2,J}^{(2)}\left|E_i s_{1/2}\right\rangle\right\}$$
$$- \left\langle E_f s_{1/2}\right| j_{J\pm1}(x_2)\left\{\frac{(2J+1\pm1) j_{J\mp1}(x_1) \pm j_{J\pm1}(x_1)}{2J+1} G_{J\pm1/2,J}^{(3)}\left|E_i p_{1/2}\right\rangle\right.$$
$$\left. + j_{J\pm1}(x_1) G_{J\pm1/2,J}^{(4)}\left|E_i s_{1/2}\right\rangle\right\}$$

$$A_{J,J\pm1}^{(1\,0)}(\omega) = \left\langle E_f p_{1/2}\right| j_{J\pm1}(x_1)\frac{(2J+1\pm1) j_{J\mp1}(x_2) \pm j_{J\pm1}(x_2)}{2J+1}$$
$$\times \left\{G_{J\pm1/2,J}^{(1)}\left|E_i p_{1/2}\right\rangle - G_{J\pm1/2,J}^{(2)}\left|E_i s_{1/2}\right\rangle\right\}$$
$$- \left\langle E_f s_{1/2}\right| j_{J\pm1}(x_1) j_{J\pm1}(x_2)\left\{G_{J\pm1/2,J}^{(3)}\left|E_i p_{1/2}\right\rangle - G_{J\pm1/2,J}^{(4)}\left|E_i s_{1/2}\right\rangle\right\} \quad (4.76)$$

Здесь $G_{JL}^{(i)} \equiv G_{JL}^{(i)}(E_i+\omega; r_2, r_1)$. Матричный элемент $A_{J\pm1\,J}^{(0\,1)}(\omega)$ получается из $A_{J\,J\pm1}^{(1\,0)}(\omega)$, после замены $x_2 \leftrightarrow x_1$ в аргументах функций Бесселя в правой части (4.76). $\left|Es_{1/2}\right\rangle$ и $\left|Ep_{1/2}\right\rangle$ обозначают верхние и нижние компоненты начального ($E = E_i$) и конечного ($E = E_f$) состояний.

При $\theta = 0$ результаты для $J_i = J_f = 1/2$-переходов приводятся к довольно простому виду. Как уже упоминалось в разделе 4.2.1 в этом случае $a_3^{(0)} = 0$ и сечение принимает вид

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{k}_2}}\right|_{J_i=J_f=1/2} = \frac{{r_0}^2}{3}\frac{\omega_2}{\omega_1}\left(a_1^{(0)}|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*|^2 + \frac{1}{2}a_2^{(0)}(1-|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2)\right) \quad (4.77)$$

с коэффициентами
$$a_1^{(0)} = \frac{3}{2}|\chi_1(\theta=0)|^2, \qquad a_2^{(0)} = |\phi_0(\theta=0)|^2,$$

где ϕ_0 определены в (4.44). Отметим также, что для случая двухфотонного возбуждения двумя идентичными фотонами члены с $A(-\omega)$ должны быть исключены из выражений χ_i, f_λ, g_λ, h_λ.

4.5.2 Параметры для упругих и неупругих переходов в водородоподобных ионах

В настоящее время существуют эффективные методы для вычисления радиальных интегралов в релятивистских двухквантовых переходах в водородоподобных ионах для частот как выше, так и ниже порога ионизации (см., например, [9, 48, 68]). Для анализа относительных величин различных параметров $a_i(\theta)$ и их угловой зависимости мы рассмотрим простейший пример, когда налетающий и рассеянный фотоны линейно ($\xi_2^{(1)} = 0$) и циркулярно ($\xi_2^{(2)} = \pm 1$) поляризованы, соответственно. Соотношение (4.16) в этом случае можно записать как

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{k}_2}} = \frac{r_0^2}{3}\frac{\omega_2}{\omega_1}\Big[\tilde{a}_1(\theta) + \tilde{a}_2(\theta)\Big(\frac{1}{2}[\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2]^2 - (\boldsymbol{\epsilon}_1 \cdot \mathbf{n}_2)^2\Big) - \xi_2^{(2)} a_8(\theta)(\boldsymbol{\epsilon}_1 \cdot \mathbf{n}_2)(\epsilon_1 \cdot [\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2])\Big], \quad (4.78)$$

где коэффициенты $\tilde{a}_i$ связаны со стандартными коэффициентами $a_i(\theta)$ соотношениями

$$2\tilde{a}_1 = \Big(1 - \frac{1}{2}\sin^2\theta\Big)\Big(a_1 + \frac{7}{10}a_3\Big) + \frac{1}{2}a_2\Big(1 + \frac{1}{2}\sin^2\theta\Big) + \sin^2\theta\Big(a_4 + a_5 + \frac{1}{2}a_6\sin^2\theta\Big),$$

$$\tilde{a}_2 = \frac{1}{2}a_1 - \frac{1}{4}a_2 + \frac{1}{20}a_3 - a_5 - \frac{1}{2}a_6\sin^2\theta.$$

Исходя из численных результатов работы [9], в таблице 1 приведены значения параметров $\tilde{a}_1$, $\tilde{a}_2$ и a_8 при трех значениях угла θ для переходов $1s_{1/2} - 1s_{1/2}$ и $1s_{1/2} - 2p_{3/2}$ в водородоподобных ионах с $Z = 30, 50, 80$. Для дипольно-запрещенного рассеяния $1s_{1/2} - 2p_{3/2}$ вместо коэффициентов $\tilde{a}_i$ используется определение $\tilde{A}_i = \big[\tilde{a}_i/(\alpha Z)^2\big] \times 10^2$. Как видно, в последнем случае все параметры $\tilde{A}_i$ имеют сравнимую величину. Для дипольно-разрешенного рассеяния эффекты ЦД малы для малых Z и быстро растут ($\sim Z^2$) с ростом Z. Таким образом, приведенные оценки демонстрируют, что поляризационные аномалии при больших Z имеют заметную величину и доступны для экспериментального наблюдения в экспериментах как по упругому, так и по неупругому рассеянию жестких фотонов атомами с большими Z.

Таблица 1

		$1s_{1/2}-1s_{1/2}$				$1s_{1/2}-2p_{3/2}$					
$\hbar\omega/I$		2.0				1.1			2.0		
θ		30	90	150	θ	30	90	150	30	90	150
Z, 30	$\tilde{a}_1$	1.95	1.03	1.68	$\tilde{A}_1$	20.4	35.6	43.2	19.7	51.7	100
	$\tilde{a}_2$	2.28	2.07	1.86	$\tilde{A}_2$	40.8	19.0	-38.0	30.8	60.1	80.3
	a_8	-0.05	-0.05	-0.04	$\tilde{A}_8$	11.4	10.9	10.9	5.3	4.8	4.4
50	$\tilde{a}_1$	1.74	0.91	1.19	$\tilde{A}_1$	18.2	33.7	35.6	17.2	35.2	53.3
	$\tilde{a}_2$	2.10	1.49	1.23	$\tilde{A}_2$	36.5	15.4	-48.0	27.5	39.6	40.1
	a_8	-0.14	-0.10	-0.07	$\tilde{A}_8$	10.1	9.6	9.6	4.9	2.9	2.0
80	$\tilde{a}_1$	1.26	0.46	0.57	$\tilde{A}_1$	13.4	23.4	22.4	11.9	14.3	14.1
	$\tilde{a}_2$	1.62	0.84	0.48	$\tilde{A}_2$	26.9	99.5	-49.8	20.0	14.1	7.8
	a_8	-0.28	-0.13	-0.06	$\tilde{A}_8$	6.5	5.5	5.0	2.5	0.8	0.3

Глава 5

Поляризационная структура сечений трехфотонных связанно-связанных переходов в атомах

В главе исследована поляризацонная структура сечений произвольных трехфотонных связанно-связанных переходов в атомах. Для оператора электромагнитного взаимодействия используется дипольное приближение. Особо рассмотрен частный случай двух тождественных фотонов. Выражения для поляризационных зависимостей записаны в виде, содержащем только скалярные произведения векторов. Поляризационные коэффициенты представлены в виде скалярных произведений единичных действительных векторов и степеней линейной (l) и циркулярной (ξ) поляризации.

5.1 Поляризационно-угловая структура сечений трехфотонных переходов

5.1.1 Феноменологическое рассмотрение

Пусть $\mathbf{e}_i$ – единичный комплексный вектор поляризации i-го фотона с частотой ω_i и волновым вектором $\mathbf{k}_i = \boldsymbol{\kappa}_i\omega_i/c$, $\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{e}_i^* = 1$, $\mathbf{e}_i\cdot\boldsymbol{\kappa}_i = 0$. В электрическом дипольном приближении сечение произвольного трехфотонного перехода между состояниями $|i\rangle \equiv |\gamma_i J_i M_i\rangle$ и $|f\rangle \equiv |\gamma_f J_f M_f\rangle$ (J и M – полный момент и его проекция на ось квантования, γ – прочие квантовые числа) свободно ориентирующейся системы после усреднения по M_i и суммирования по M_f содержит комбинации шести векторов $\mathbf{e}_i$, $\mathbf{e}_i^*$ с $i = 1, 2, 3$ и линейно зависит от каждого из них. Поэтому общую структуру поляризационно-угловой зависимости сечения можно установить из феноменологических соображений путем подсчета линейно независимых комбинаций указанных векторов. Нетрудно убедиться, что такие комбинации можно записать через попарные скалярные произведения, семь из которых вещественны

$$1, \quad |\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2|^2, \quad |\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2^*|^2, \quad |\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_3|^2, \quad |\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_3^*|^2,$$
$$|\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_3|^2, \quad |\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_3^*|^2, \quad (5.1)$$

а четыре комплексные

$$A_1 = (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)(\mathbf{e}_2^* \cdot \mathbf{e}_3^*)(\mathbf{e}_1^* \cdot \mathbf{e}_3), \qquad A_2 = (\mathbf{e}_1^* \cdot \mathbf{e}_2^*)(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_3^*)(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_3),$$
$$A_3 = (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2^*)(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_3)(\mathbf{e}_1^* \cdot \mathbf{e}_3^*), \qquad A_4 = (\mathbf{e}_1^* \cdot \mathbf{e}_2)(\mathbf{e}_2^* \cdot \mathbf{e}_3)(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_3^*). \quad (5.2)$$

Легко видеть, что комбинации $A_1 - A_4$ получаются друг из друга комплексным сопряжением с последующей заменой одной из пар векторов $\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_i^*$ на $\mathbf{e}_i^*, \mathbf{e}_i$. Таким образом, сечение произвольного трехфотонного процесса содержит 15 слагаемых, четыре из которых (с $\operatorname{Im} A_i$), как будет показано ниже, описывают ЦД.

В общем случае эллиптической поляризации фотонов структура выражений (5.2) весьма сложная, поскольку векторы $\mathbf{e}_i$ комплексные. Для анализа поляризационных эффектов в многофотонных процессах удобно использовать инвариантную (по отношению к выбору системы координат) параметризацию поляризационного тензора фотона из раздела 1.6.

формулы (3.4), (3.5) со стр. 43 позволяют переписать выражения (5.1), содержащие два вектора поляризации, через вещественные векторы $\boldsymbol{\epsilon}$, $\boldsymbol{\kappa}$, $\boldsymbol{\epsilon}'$, $\boldsymbol{\kappa}'$

$$|\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'|^2 = 1 - ll'[\boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{\epsilon}']^2 - \frac{1}{2}\xi\xi'(\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\kappa}') + \frac{1}{2}l(l'-1)(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\kappa}')^2$$
$$+ \frac{1}{2}l'(l-1)(\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\epsilon}')^2 - \frac{1}{4}(l-1)(l'-1)(1 + [\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\kappa}']^2), \quad (5.3)$$

Комбинации векторов A_i в (5.2) также могут быть переписаны аналогичным образом, однако, результаты имеют более громоздкий вид. Ниже приведено выражение для мнимой части A_1

$$2\operatorname{Im} A_1 \equiv 2\operatorname{Im}\big\{(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)(\mathbf{e}_2^* \cdot \mathbf{e}_3^*)(\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_1^*)\big\} = \frac{1}{4}\xi_1\xi_2\xi_3\big(\boldsymbol{\kappa}_1 \cdot [\boldsymbol{\kappa}_2 \times \boldsymbol{\kappa}_3]\big)$$
$$- \xi_1 P_{123} - \xi_2 P_{213} - \xi_3 P_{312}, \quad (5.4)$$

$$P_{ijk} = l_j l_k (\boldsymbol{\epsilon}_j \cdot \boldsymbol{\epsilon}_k)\big(\boldsymbol{\kappa}_i \cdot [\boldsymbol{\epsilon}_j \times \boldsymbol{\epsilon}_k]\big) + \frac{1}{2}l_k(l_j - 1)(\boldsymbol{\kappa}_j \cdot \boldsymbol{\epsilon}_k)\big(\boldsymbol{\kappa}_i \cdot [\boldsymbol{\kappa}_j \times \boldsymbol{\epsilon}_k]\big)$$
$$+ \frac{1}{2}l_j(l_k - 1)(\boldsymbol{\epsilon}_j \cdot \boldsymbol{\kappa}_k)\big(\boldsymbol{\kappa}_i \cdot [\boldsymbol{\epsilon}_j \times \boldsymbol{\kappa}_k]\big)$$
$$+ \frac{1}{4}(l_j - 1)(l_k - 1)(\boldsymbol{\kappa}_j \cdot \boldsymbol{\kappa}_k)\big(\boldsymbol{\kappa}_i \cdot [\boldsymbol{\kappa}_j \times \boldsymbol{\kappa}_k]\big). \quad (5.5)$$

Мнимые части A_{2-4}, как отмечалось выше, также имеют вид (5.4) с заменой в (5.4) знаков двух из трех параметров ξ_i, напр., $\operatorname{Im} A_2 = \operatorname{Im} A_1(\xi_{1,2} \to -\xi_{1,2})$. Таким образом, использование параметризации (3.4), (3.5) позволяет записать кинематические факторы в сечениях в удобном для анализа виде через углы между волновыми векторами фотонов и единичными векторами $\boldsymbol{\epsilon}_i$, задающими направления главных осей эллипсов поляризации.

Как видно из (5.4), величины $\mathrm{Im}\,A_i$ меняют знак при замене $\xi_i \to -\xi_i$, т.е. соответствующие слагаемые в сечениях трехфотонных переходов описывают ЦД. Нетрудно убедиться, что эти слагаемые имеют интерференционную природу и обусловлены интерференцией вещественных и мнимых частей парциальных амплитуд перехода. Действительно, величины $\mathrm{Im}\,A_i$ будучи истинными скалярами (псевдоскалярность ξ_i компенсируется наличием векторного произведения полярных векторов $\boldsymbol{\epsilon}_i$, $\boldsymbol{\kappa}_i$ в каждом из слагаемых в (5.4)), являются T-нечетными, поскольку все слагаемые в (5.5) содержат нечетное число векторов $\boldsymbol{\kappa}_i$, меняющих знак при обращении времени. Следовательно, атомные факторы, с которыми $\mathrm{Im}\,A_i$ входят в сечения, должны содержать произведения вещественных и мнимых частей парциальных амплитуд рассматриваемого трехфотонного процесса, поскольку свойством T-нечетности обладает лишь антиэрмитова (мнимая) часть амплитуды. Как следует из соотношения унитарности для S-матрицы [3], антиэрмитова часть амплитуды конкретного процесса всегда связана с амплитудами других, по отношению к рассматриваемому, физических процессов, которые возможны при заданных начальных состояниях квантовой системы «атом + фотоны». Эти процессы, как бы конкурирующие с рассматриваемым, мы называем в обобщенном смысле диссипативными, поскольку они приводят к ослаблению интенсивности пучка падающих фотонов и, вследствие необратимости диссипативных явлений, вносят в задачу T-нечетные параметры, обусловливающие циркулярный дихроизм. В рассматриваемом нами случае трехфотонных связанно-связанных переходов возможны два «канала диссипации»: реальное заселение промежуточного резонансного уровня (диссипативным параметром при этом является ширина резонансного уровня, являющаяся T-нечетной величиной) или ионизация атома, если энергия одного или двух падающих фотонов достаточна для ионизации атома из начального состояния. Таким образом, ЦД в трехфотонных переходах, как и в случае двухфотонных переходов, является «диссипативно - индуцированным». Различие состоит в том, что в двухфотонных переходах между связанными состояниями ЦД возникает лишь при учете недипольных эффектов во взаимодействии атома с фотонами, поскольку из четырех векторов $\mathbf{e}, \mathbf{e}^*, \mathbf{e}', \mathbf{e}'^*$ невозможно построить T-нечетный скаляр. Учет недипольности вносит в задачу дополнительные векторы $\boldsymbol{\kappa}$ и $\boldsymbol{\kappa}'$, так что комбинации векторов в сечениях произвольных двухфотонных переходов, ответственные за дихроизм, имеют вид [8]

$$E_1 = (\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*)(\mathbf{e}^* \cdot \boldsymbol{\kappa}')(\mathbf{e}' \cdot \boldsymbol{\kappa}), \qquad E_2 = (\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}')(\mathbf{e}^* \cdot \boldsymbol{\kappa}')(\mathbf{e}'^* \cdot \boldsymbol{\kappa}).$$

Используемая нами параметризация $\mathbf{e}$ позволяет переписать эти выражения через углы между вещественными векторами

$$\mathrm{Im}(E_1+E_2)=\xi l'(\boldsymbol{\epsilon}'\cdot\boldsymbol{\kappa})(\boldsymbol{\epsilon}'\cdot[\boldsymbol{\kappa}'\times\boldsymbol{\kappa}]),\quad \mathrm{Im}(E_1-E_2)=l\xi'(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{\kappa}')(\boldsymbol{\epsilon}\cdot[\boldsymbol{\kappa}\times\boldsymbol{\kappa}']),$$

$$\mathrm{Re}(E_1+E_2)=2ll'(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{\epsilon}')(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{\kappa}')(\boldsymbol{\epsilon}'\cdot\boldsymbol{\kappa})$$
$$+(\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{\kappa}')\Big\{l(l'-1)(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{\kappa}')^2+l'(l-1)(\boldsymbol{\epsilon}'\cdot\boldsymbol{\kappa})^2-\frac{1}{2}(l-1)(l'-1)\big(1-(\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{\kappa}')^2\big)\Big\},$$
$$\mathrm{Re}(E_1-E_2)=\frac{1}{2}\xi\xi'\big((\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{\kappa}')^2-1\big).$$

5.1.2 Квантовомеханические формулы для динамических атомных факторов

В общем случае фотонов с различными частотами амплитуда A_{fi} произвольного трехфотонного перехода определяется суммой 6 составных матричных элементов третьего порядка теории возмущений, соответствующих различным комбинациям актов поглощения и испускания фотонов. Так, рассматривая для определенности случай гиперрамановского рассеяния (ГРР) фотонов $\mathbf{e}_1,\omega_1$ и $\mathbf{e}_2,\omega_2$ с испусканием рассеянного фотона $\mathbf{e}_3,\omega_3$ $(E_i+\omega_1+\omega_2=E_f+\omega_3)$ имеем

$$\begin{aligned}A_{fi}(\mathbf{e}_1,\omega_1;\mathbf{e}_2,\omega_2;\mathbf{e}_3^*,-\omega_3)=\langle\gamma_fJ_fM_f|\,\{(\mathbf{e}_3^*\cdot\mathbf{d})G_{E_i+\omega_1+\omega_2}(\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{d})G_{E_i+\omega_1}(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{d})\\+(\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{d})G_{E_i+\omega_1-\omega_3}(\mathbf{e}_3^*\cdot\mathbf{d})G_{E_i+\omega_1}(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{d})+(\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{d})G_{E_i+\omega_1-\omega_3}(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{d})G_{E_i-\omega_3}(\mathbf{e}_3^*\cdot\mathbf{d})\\+(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{d})G_{E_i+\omega_2-\omega_3}(\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{d})G_{E_i-\omega_3}(\mathbf{e}_3^*\cdot\mathbf{d})+(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{d})G_{E_i+\omega_2-\omega_3}(\mathbf{e}_3^*\cdot\mathbf{d})G_{E_i+\omega_2}(\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{d})\\+(\mathbf{e}_3^*\cdot\mathbf{d})G_{E_i+\omega_1+\omega_2}(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{d})G_{E_i+\omega_2}(\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{d})\}\,|\gamma_iJ_iM_i\rangle\,,\end{aligned}\tag{5.6}$$

здесь $\mathbf{d}$-оператор дипольного момента атома,

$$G_E=\sum_{\gamma JM}\frac{|\gamma JM\rangle\,\langle\gamma JM|}{E_{\gamma J}-E+i0}=\sum_{JM}G^J(E)\,|JM\rangle\,\langle JM|$$

функция Грина атома, а $G^J(E)$ – «радиальная» часть G_E, соответствующая полному угловому моменту атома J. $|JM\rangle$ — спин-угловая часть атомной волновой функции с полным моментом J, определяемая типом связи угловых моментов в конкретном атоме. Амплитуды других процессов с тремя фотонами имеют такой же вид с заменой знаков частот и соответствующих векторов поляризации $\mathbf{e}$ на комплексно-сопряженные.

Записывая скалярные произведения $\mathbf{e}\cdot\mathbf{d}$ в (5.6) в сферическом базисе и используя технику неприводимых тензорных операторов, зависимость A_{fi} от проекций M_i,M_f и векторов поляризации $\mathbf{e}_i$ выделяется в явном виде [11]

$$A_{fi}=\sum_{x,\xi}(-1)^{x-\xi}C^{J_iM_i}_{J_fM_f\;x\,-\xi}\sum_{y=0,1,2}Q_{xy}(-\omega_3;\omega_1,\omega_2)\big\{\mathbf{e}_3^*\otimes\{\mathbf{e}_1\otimes\mathbf{e}_2\}_y\big\}_{x,-\xi},\tag{5.7}$$

где атомные параметры

$$Q_{xy}(-\omega_3;\omega_1,\omega_2)=\sqrt{\frac{(2x+1)(2y+1)}{2J_i+1}}\sum_{J_1,J_2}(-1)^{y+J_i-J_1}$$

$$
\times \left[\begin{Bmatrix} 1 & 1 & y \\ J_i & J_1 & J_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & x & y \\ J_i & J_1 & J_f \end{Bmatrix} T^y_{J_1 J_2}(\omega_1+\omega_2, \omega_2; \omega_1+\omega_2, \omega_1) \right.
$$

$$
+(-1)^{J_1+J_2+1-J_i-J_f+x} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & y \\ J_f & J_2 & J_1 \end{Bmatrix}
$$

$$
\times \begin{Bmatrix} 1 & x & y \\ J_f & J_2 & J_i \end{Bmatrix} T^y_{J_1 J_2}(\omega_1-\omega_3, -\omega_3; \omega_2-\omega_3, -\omega_3)
$$

$$
\left. + \begin{Bmatrix} J_f & 1 & J_1 \\ J_i & 1 & J_2 \\ x & y & 1 \end{Bmatrix} T^y_{J_1 J_2}(\omega_2-\omega_3, \omega_2; \omega_1-\omega_3, \omega_1) \right], \qquad (5.8)
$$

выражаются через комбинации приведенных составных матричных элементов

$$
T^y_{J_1 J_2}(\alpha, \beta; \gamma, \delta) = \langle \gamma_f J_f \| \, \mathbf{d} \Big\{ G^{J_1}_{E_i+\alpha} \mathbf{d} G^{J_2}_{E_i+\beta} + (-1)^y G^{J_1}_{E_i+\gamma} \mathbf{d} G^{J_2}_{E_i+\delta} \Big\} \mathbf{d} \, \| \gamma_i J_i \rangle \,. \qquad (5.9)
$$

Используются стандартные обозначения техники углового момента [4] для коэффициентов Клебша-Гордона, $3nj-$символов Вигнера и тензорных произведений.

Как следует из (5.7), с точностью до множителей, определяемых типом конкретного процесса (плотностью конечных состояний и.т.д.), поляризационная зависимость сечений выражается через тензорные произведения векторов поляризации

$$
M_{J_i J_f} = \frac{1}{2J_i+1} \sum_{M_i M_f} |A_{fi}|^2
$$

$$
= \sum_{x=0}^{3} \frac{1}{2x+1} \sum_{\xi=-x}^{x} \left| \sum_{y=0}^{2} Q_{xy} \big\{ \mathbf{e}_3^* \otimes \{ \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 \}_y \big\}_{x,-\xi} \right|^2 . \qquad (5.10)
$$

Здесь величины Q_{xy} с фиксированными x, y играют роль парциальных амплитуд перехода. Как следует из (5.7), (5.8), в общем случае (при произвольных J_i, J_f) отличны от нуля 7 параметров Q_{xy} и (5.10) включает 15 различных слагаемых, содержащих тензорные произведения 6 векторов. Используя правила изменения схемы связи в тензорных произведениях, можно переписать выражение (5.10) через тензорные произведения поляризационных тензоров фотонов $\{\mathbf{e} \otimes \mathbf{e}^*\}_{pm}$, однако, атомные коэффициенты в этом случае становятся чрезвычайно громоздкими [11]. Техника вычисления тензорных произведений векторов, изложенная в разделе 2.2.1, позволяет записать $M_{J_i J_f}$ через обычные скалярные произведения векторов

$$
M_{J_i J_f} = f_0 + f_1 |\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2|^2 + f_2 |\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2^*|^2 + f_3 |\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_3|^2 + f_4 |\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_3^*|^2
$$

$$
+ f_5 |\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_3|^2 + f_6 |\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_3^*|^2 + \sum_{i=1}^{4} \big(\operatorname{Re} g_i \operatorname{Re} A_i - \operatorname{Im} g_i \operatorname{Im} A_i \big) \quad (5.11)
$$

в полном соответствии с феноменологическими соображениями п. 5.1.1 Явные выражения коэффициентов $f_i - g_i$ через билинейные комбинации Q_{xy} приведены в приложении Д.

Таким образом, в наиболее общем случае в «полном опыте» в результате поляризационных измерений возможно определение 15 независимых атомных параметров $f_i - g_i$, описывающих сечение трехфотонного процесса. В отсутствии диссипативных процессов (нерезонансные переходы с суммарной энергией падающих фотонов, недостаточной для ионизации атома) величины Q_{xy} вещественны, поэтому $\operatorname{Im} g_i = 0$ и число параметров уменьшается до 11.

Выражение (5.11) дает поляризационно-угловую структуру сечений в наиболее общем случае фиксированных поляризаций $\mathbf{e}_i$ и направлений распространения $\boldsymbol{\kappa}_i$ всех трех фотонов. Если, например, в рассмотренном выше случае ГРР рассеянный фотон не наблюдается, то усреднение в (5.11) по поляризациям $\mathbf{e}_3$ и интегрирование по направлениям $\boldsymbol{\kappa}_3$, состоящее, как известно [3], в замене $(\mathbf{e}_3)_i(\mathbf{e}_3^*)_j \to \frac{4\pi}{3}\delta_{ij}$, дает для $M_{J_iJ_f}$ выражение

$$M_{J_iJ_f} = \frac{1}{9}\alpha^s|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2 + \frac{1}{18}\alpha^a\big(1-|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*|^2\big) + \frac{1}{30}\alpha^t\big(1+|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*|^2 - \frac{2}{3}|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2\big). \quad (5.12)$$

В этом случае исчезают эффекты ЦД, а зависимость сечения от поляризаций $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$ падающих фотонов такая же, как и в случае двухфотонного возбуждения в теории Плачека. Роль скалярной, антисимметричной и тензорной частей сечения двухфотонного перехода в нашем случае играют следующие комбинации параметров Q_{xy}

$$\alpha^s = |Q_{10}|^2, \quad \alpha^a = \sum_{x=0}^{2}|Q_{x1}|^2, \quad \alpha^t = \sum_{x=1}^{3}|Q_{x2}|^2.$$

Если не регистрируется лишь поляризация рассеянного фотона, то сохраняется зависимость сечения от вектора $\boldsymbol{\kappa}_3$ ($(\mathbf{e}_3)_i(\mathbf{e}_3^*)_j \to \frac{1}{2}(\delta_{ij} - (\boldsymbol{\kappa}_3)_i(\boldsymbol{\kappa}_3)_j)$)

$$M_{J_iJ_f} = p_0 + p_1|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2 + p_2|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*|^2 + p_3|\mathbf{e}_1\cdot\boldsymbol{\kappa}_3|^2 + p_4|\mathbf{e}_2\cdot\boldsymbol{\kappa}_3|^2 + \sum_{i=1}^{2}\big(\operatorname{Re} q_i \operatorname{Re} A_i' - \operatorname{Im} q_i \operatorname{Im} A_i'\big). \quad (5.13)$$

Здесь отличны от нуля 9 атомных параметров, два из которых ($\operatorname{Im} q_{1,2}$) описывают ЦД. Явные выражения $p_i - q_i$ через Q_{xy} приведены в приложении Д. Действительные и мнимые части векторных комбинаций

$$A_1' = (\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2)(\mathbf{e}_2^*\cdot\boldsymbol{\kappa}_3)(\mathbf{e}_1^*\cdot\boldsymbol{\kappa}_3) \qquad A_2' = (\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2^*)(\mathbf{e}_2\cdot\boldsymbol{\kappa}_3)(\mathbf{e}_1^*\cdot\boldsymbol{\kappa}_3)$$

можно записать через вещественные векторы $\boldsymbol{\epsilon}_i$, $\boldsymbol{\kappa}_i$. Например,

$$2\operatorname{Im} A_1' = \xi_1\Big\{l_2(\boldsymbol{\epsilon}_2\cdot\boldsymbol{\kappa}_3)(\boldsymbol{\epsilon}_2\cdot[\boldsymbol{\kappa}_1\times\boldsymbol{\kappa}_3]) + \frac{1}{2}(l_2-1)(\boldsymbol{\kappa}_2\cdot\boldsymbol{\kappa}_3)(\boldsymbol{\kappa}_3\cdot[\boldsymbol{\kappa}_1\times\boldsymbol{\kappa}_2])\Big\}$$

$$+\xi_2\Big\{l_1(\boldsymbol{\epsilon}_1\cdot\boldsymbol{\kappa}_3)(\boldsymbol{\epsilon}_1\cdot[\boldsymbol{\kappa}_2\times\boldsymbol{\kappa}_3])+\frac{1}{2}(l_1-1)(\boldsymbol{\kappa}_1\cdot\boldsymbol{\kappa}_3)(\boldsymbol{\kappa}_3\cdot[\boldsymbol{\kappa}_1\times\boldsymbol{\kappa}_2])\Big\}.$$

Выражение (5.13) с заменой $\boldsymbol{\kappa}_3$ на $\mathbf{e}_3$ (и другими выражениями для параметров p_i, q_i) справедливо и в случае чисто линейной поляризации рассеянного фотона.

Если линейно-поляризованы два фотона (напр., $\mathbf{e}_1=\mathbf{e}_1^*$, $\mathbf{e}_2=\mathbf{e}_2^*$), то

$$A_1=A_2=A_3^*=A_4^*,\qquad \operatorname{Im}A_1=-\frac{1}{2}\xi_3(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2)\big(\boldsymbol{\kappa}_3\cdot[\mathbf{e}_1\times\mathbf{e}_2]\big)$$

и сечение содержит шесть слагаемых

$$M_{J_iJ_f}=\varphi_0+\varphi_1(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2)^2+\varphi_2|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_3|^2+\varphi_3|\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{e}_3|^2+\varphi_4\operatorname{Re}A_1 \\ +\varphi_5\xi_3(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2)\big(\boldsymbol{\kappa}_3\cdot[\mathbf{e}_1\times\mathbf{e}_2]\big),\quad (5.14)$$

где коэффициенты $\varphi_0-\varphi_5$ простым образом связаны с параметрами f_i-g_i в (5.11).

5.1.3 Правила отбора для трехфотонных переходов

Как следует из общего выражения (5.6) для амплитуды, правила отбора для трехфотонных переходов совпадают с таковыми для матричных элементов тензора третьего ранга, построенного из трех полярных векторов $\mathbf{d}$. Как известно [4], всякий тензор 3-го ранга разлагается на 7 неприводимых тензоров с рангами x от 0 до 3, однако, такое разложение неоднозначно, поэтому представление (5.7) для A_{fi}, которое и соответствует указанному разложению, и выражение (5.10) содержат дополнительное суммирование по индексу y. В результате, (5.7) содержит два тензорных произведения векторов ранга $x=2$ (с $y=1,2$) и три тензора первого ранга (с $y=0,1,2$), интерференция которых в выражении (5.10) и обусловливает поляризационные аномалии в сечениях переходов.

Правила отбора для отдельных слагаемых в (5.10) такие же, как для электрического октупольного($x=3$), магнитного квадрупольного($x=2$), электрического дипольного излучения($x=1$) и псевдоскаляра($x=0$), соответственно. В частности, переходы возможны лишь между состояниями $|i\rangle$ и $|f\rangle$ противоположной четности, а для индексов x, y в парциальных амплитудах Q_{xy} имеют место следующие «правила отбора»

$$3\geq x\geq|J_i-J_f|,\qquad 2\geq y=x,x\pm1,\qquad \Delta J\equiv|J_i-J_f|\leq3.\qquad (5.15)$$

В результате, для заданных моментов J_i,J_f с $\Delta J\leq3$ число отличных от нуля параметров Q_{xy} и независимых коэффициентов в (5.11) зависит от значений J_i,J_f. Наиболее простую структуру имеет сечение перехода между состояниями с максимально возможной разностью моментов $\Delta J=3$. В этом случае в (5.10) отлична от нуля лишь «октупольная» часть сечения, определяемая парциальной амплитудой Q_{32}, а соответствующее тензорное произведение векторов вычисляется по формуле (2.33) и содержит все комбинации векторов (5.1), (5.2) за исключением $\operatorname{Im} A_i$. Это единственный тип переходов, в которых отсутствует ЦД при открытых каналах диссипации и сечение определяется лишь одним атомным параметром $|Q_{32}|^2$. Для переходов с $\Delta J = 2$ отличны от нуля Q_{21}, Q_{22} и (при $J_i, J_f > 0$) Q_{32}. В этом случае сечения содержат одно «дихроичное» слагаемое $\sim \operatorname{Im} Q_{22}Q_{21}^*$ (см. приложение Д), обусловленное интерференцией двух «магнито-квадрупольных» амплитуд Q_{2y}. Амплитуда Q_{01} входит в сечения только для переходов с $\Delta J = 0$, поэтому все семь парциальных амплитуд Q_{xy} дают вклад в сечения лишь для переходов с $J_i = J_f \geq 3$.

Общие результаты упрощаются также при малых значениях J_i, J_f. Как отмечалось выше, для переходов с $J_i = 0, J_f = 3$ и $J_i = 0, J_f = 2$ отличны от нуля одна и две амплитуды Q_{xy} соответственно. При $J_i = 0, J_f = 1$ и $J_i = J_f = 1/2$ отличны от нуля 3 и 4 параметра Q_{xy} ссоответственно, при этом $\operatorname{Im} g_3 = 0$ и ЦД описывается интерференцией действительных и мнимых частей введенных в приложении Д величин α_i, являющихся комбинациями «электрических дипольных» амплитуд Q_{1y}.

5.2 Трехфотонные переходы с идентичными фотонами

Особого рассмотрения требует практически важный частный случай, когда два из трех фотонов идентичны (из одного светового пучка). Для простоты будем считать их полностью поляризованными и положим, для определенности, $(\mathbf{e}_1, \boldsymbol{\kappa}_1) = (\mathbf{e}_2, \boldsymbol{\kappa}_2) \equiv (\mathbf{e}, \boldsymbol{\kappa})$, $(\mathbf{e}_3, \boldsymbol{\kappa}_3) \equiv (\mathbf{e}', \boldsymbol{\kappa}')$. Амплитуда перехода в этом случае есть (ср. с (5.6))

$$\begin{aligned}\tilde{A}_{fi}(\mathbf{e}, \omega; \mathbf{e}'^*, -\omega') = \langle \gamma_f J_f M_f | \{ & (\mathbf{e}'^* \cdot \mathbf{d}) G_{E_i+2\omega} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}) G_{E_i+\omega} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}) \\ & + (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}) G_{E_i+\omega-\omega'} (\mathbf{e}'^* \cdot \mathbf{d}) G_{E_i+\omega} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}) \\ & + (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}) G_{E_i+\omega-\omega'} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}) G_{E_i-\omega'} (\mathbf{e}'^* \cdot \mathbf{d}) \} | \gamma_i J_i M_i \rangle \end{aligned} \quad (5.16)$$

и может быть записана в виде (5.7). При этом в сумме по y выпадают слагаемые с $y = 1$, так что сечения определяются лишь четырьмя (в общем случае комплексными) парциальными амплитудами Q_{10}, Q_{12}, Q_{22}, Q_{32}, выражения для которых имеют вид (5.8) с заменой $T^y_{J_1 J_2}(\alpha, \beta; \gamma, \delta)$ на

$$\tilde{T}_{J_1 J_2}(\alpha, \beta) = \langle \gamma_f J_f \| \, \mathbf{d} G^{J_1}_{E_i+\alpha} \mathbf{d} G^{J_2}_{E_i+\beta} \mathbf{d} \, \| \gamma_i J_i \rangle \, .$$

Комбинации векторов (5.2) в рассматриваемом случае также упрощаются

$$A_2 = A_1^* = l(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}')(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*), \quad A_3 = |\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'|^2, \quad A_4 = |\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*|^2,$$

при этом

$$\operatorname{Im} A_2 = \xi l \Big\{ l'(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\epsilon}') \big(\boldsymbol{\kappa} \cdot [\boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{\epsilon}'] \big) + \frac{1}{2}(1 - l')(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\kappa}') \big(\boldsymbol{\epsilon} \cdot [\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\kappa}'] \big) \Big\}, \quad (5.17)$$

$$2\operatorname{Re} A_2 = l\Big\{2l'(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{\epsilon}')^2 - (l-1)(l'-1)\big(1+(\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{\kappa}')^2\big) \\ + (l-1)[\boldsymbol{\kappa}\times\boldsymbol{\epsilon}']^2 - (l'-1)[\boldsymbol{\epsilon}\times\boldsymbol{\kappa}']^2\Big\}.$$

В результате поляризационно-угловая структура сечений определяется выражением (ср. с (5.11))

$$\tilde{M}_{J_iJ_f} = a_1 + a_2 l^2 + a_3|\mathbf{e}\cdot\mathbf{e}'|^2 + a_4|\mathbf{e}\cdot\mathbf{e}'^*|^2 + a_5\operatorname{Re} A_2 + a_6\operatorname{Im} A_2, \tag{5.18}$$

где

$$a_1 = \frac{1}{3}\Big(\frac{1}{7}|Q_{32}|^2 + \frac{2}{5}|Q_{22}|^2\Big), \quad a_2 = \frac{1}{15}\Big(\frac{1}{3}|Q_{12}-\sqrt{5}Q_{10}|^2 - \frac{1}{7}|Q_{32}|^2 - |Q_{22}|^2\Big),$$
$$a_3 = \frac{2}{3}\Big(\frac{1}{7}|Q_{32}|^2 - \frac{2}{5}|Q_{22}|^2 - \frac{1}{5}|Q_{21}|^2\Big), \qquad a_4 = \frac{1}{15}\Big(3|Q_{12}|^2 - \frac{4}{7}|Q_{32}|^2 - |Q_{22}|^2\Big),$$
$$a_5 = \frac{2}{15}\Big(\sqrt{5}\operatorname{Re}\{Q_{10}Q_{12}^*\} - \frac{2}{7}|Q_{32}|^2 + |Q_{22}|^2 - |Q_{12}|^2\Big),\ a_6 = \frac{2\sqrt{5}}{15}\operatorname{Im}\{Q_{10}Q_{12}^*\}.$$

Как видно из (5.17), последнее слагаемое в (5.18) отлично от нуля лишь при эллиптической поляризации поля накачки с $0 < |\xi| < 1$ и меняет знак при замене ξ на $-\xi$, т.е. приводит к зависимости сечений от направления вращения вектора электрического поля накачки (эллиптический дихроизм - ЭД). Как и в случае циркулярного дихроизма, ЭД определяется интерференцией действительных и мнимых частей парциальных амплитуд и его измерение позволяет получить информацию о диссипативных параметрах среды, недоступную в экспериментах с линейной или циркулярной поляризацией фотонов накачки.

Для переходов с идентичными фотонами также справедливы правила отбора (5.15) для амплитуд Q_{xy} с дополнительным условием $Q_{x1} = 0$. Поэтому ЭД отсутствует не только для переходов с $\Delta J = 3$, но и в случае $\Delta J = 2$. В последнем случае сечение определяется двумя неинтерферирующими амплитудами Q_{32} и Q_{22}. Все четыре параметра Q_{xy} входят в сечения только для переходов с $(J_i + J_f) \geq 3$ и $\Delta J = 0, 1$. При $J_i = 0, J_f = 1$ и $J_i = J_f = 1/2$ сечения определяются лишь двумя параметрами Q_{10} и Q_{12}.

В случае трехфотонного возбуждения полем одного светового пучка все три фотона идентичны. Сечение в этом случае определяется всего двумя атомными факторами при произвольных J_i, J_f:

$$M_{J_iJ_f} = a + bl^2, \tag{5.19}$$

где

$$a = \frac{1}{7}|Q_{32}|^2, \quad b = \frac{1}{45}|\sqrt{5}Q_{10} + 2Q_{12}|^2 - \frac{3}{35}|Q_{32}|^2 \tag{5.20}$$

Для гиперрамановского перехода $\big|\gamma_i S_{1/2}\big\rangle + 2\omega \longrightarrow \big|\gamma_f P_{1/2}\big\rangle + \omega'$ в атоме с одним электроном во внешней оболочке парциальные амплитуды $Q_{10,12}$ после вычисления приведенных матричных элементов в (5.8), (5.9) имеют вид

$$\sqrt{3}Q_{10} = R^s_{1/2}(\omega,\omega) + R^s_{1/2}(\omega,-\omega') + 2\left[R^s_{3/2}(\omega,\omega) + R^d_{1/2}(\omega,-\omega')\right]$$

$$+\frac{1}{3}\left[2R^d_{3/2}(-\omega',\omega)+4R^d_{1/2}(-\omega',\omega)+4R^s_{3/2}(-\omega',\omega)-R^s_{1/2}(-\omega',\omega)\right],$$

$$\sqrt{\frac{3}{5}}Q_{12}=R^d_{1/2}(\omega,\omega)+R^d_{1/2}(\omega,-\omega')$$

$$+\frac{1}{5}\left[R^d_{3/2}(\omega,\omega)+R^d_{3/2}(\omega,-\omega')-\frac{2}{3}R^d_{3/2}(-\omega',\omega)\right]$$

$$+\frac{1}{3}\left[-R^d_{1/2}(-\omega',\omega)+R^s_{3/2}(-\omega',\omega)+2R^s_{1/2}(-\omega',\omega)\right].$$

Здесь

$$R^s_J(\alpha,\beta)=\left\langle\gamma_f P_{1/2}\right|dg_{1/2,0}(E_i+\alpha+\beta)dg_{J,1}(E_i+\beta)d\left|\gamma_i S_{1/2}\right\rangle,$$

$$R^d_J(\alpha,\beta)=\left\langle\gamma_f P_{1/2}\right|dg_{3/2,2}(E_i+\alpha+\beta)dg_{J,1}(E_i+\beta)d\left|\gamma_i S_{1/2}\right\rangle$$

— радиальные составные матричные элементы, соответствующие двум значениям $J=1/2,3/2$ полного момента в радиальной части $g_{JL}(E;r,r')$ функции Грина.

Численный расчет $R^{s,d}_J(\alpha,\beta)$ может быть выполнен стандартными методами расчета многофотонных сечений по теории возмущений, численные значения для ряда трехфотонных переходов в конкретных атомах приведены, например, в [8]. Для надпороговых частот ($E_i+\alpha=E>0$ или $E_i+\alpha+\beta=E>0$ матричные элементы $R^{s,d}_J(\alpha,\beta)$ имеют мнимую часть, пропорциональную произведению амплитуд одно- и двухфотонной ионизации из состояний $|i\rangle$ и $|f\rangle$ в одно и то же состояние континуума с энергией E. В общем случае $\operatorname{Re}R^{s,d}_J(\alpha,\beta)$ и $\operatorname{Im}R^{s,d}_J(\alpha,\beta)$ имеют одинаковый порядок величины, так что эффекты циркулярного дихроизма и эллиптического дихроизма в этом случае имеют величину порядка единицы (см. аналогичный расчет для матричных элементов для циркулярного дихроизма при двухфотонном дипольно-запрещенном надпороговом рассеянии света в [11]).

В резонансных процессах эффекты циркулярного дихроизма оказываются малыми, поскольку интерференционные слагаемые в сечении, пропорциональные Γ малы по сравнению с чисто резонансной частью сечения. Так, если Δ – интервал тонкой структуры резонансного уровня с шириной Γ то дихроичные слагаемые имеют порядок Γ/Δ, такой же, как и величина диссипативно-индуцированных ориентационных эффектов (см. ниже раздел 5.3) при дипольно-разрешенном двухфотонном рассеянии. Поэтому, так же как и в случае двухфотонного рассеяния, эффекты циркулярного или эллиптического дихроизма в резонансных трехфотонных процессах могут стать существенными лишь в случае резонанса на дипольно-запрещенном переходе. При этом поляризационно-угловая структура сечений имеет уже более громоздкий вид по сравнению с (5.11), поскольку резонансная часть амплитуды включает также волновые векторы $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$, происходящие от учета недипольных поправок во взаимодействии атома с фотонами.

Мы не приводим здесь соответствующие формулы, поскольку они могут быть записаны в значительно более простом виде для каждой конкретной геометрии эксперимента.

5.3 Эффекты атомной ориентации при возбуждении в двухчастотном поле

Как обсуждалось выше, эффекты дихроизма являются специфическими интерференционными эффектами и обусловлены наличием в задаче T-нечетного псевдовектора $\xi\boldsymbol{\kappa} = i[\mathbf{e}^* \times \mathbf{e}]$, присущего эллиптически-поляризованной волне, и T-нечетного (диссипативного) атомного параметра, например, ширины Γ резонансного уровня в случае резонансных процессов. Другой класс интерференционных явлений, обусловленных шириной Γ, связан с эффектами поляризации атомов в резонансных многофотонных процессах в полях с нулевой степенью циркулярной поляризации. В этом случае аксиальным T-нечетным вектором является средний угловой момент $\mathbf{J}$ атома в начальном ($\mathbf{J}_i$) или конечном ($\mathbf{J}_f$) состоянии.

Зависимость сечений двухфотонных процессов от ориентации атома в начальном состоянии и возникновение преимущественной ориентации в конечном состоянии в случае неполяризованного исходного состояния проанализированы в работе [18] и обусловлены интерференционными слагаемыми в сечении типа ($\mathbf{J} = \mathbf{J}_i$ или $\mathbf{J}_f$)

$$\Gamma(\mathbf{J}[\boldsymbol{\kappa}_1 \times \boldsymbol{\kappa}_2])(\boldsymbol{\kappa}_1\boldsymbol{\kappa}_2) \tag{5.21}$$

для неполяризованных фотонов или

$$\Gamma(\mathbf{J}[\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2])(\mathbf{e}_1\,\mathbf{e}_2) \tag{5.22}$$

в случае линейной поляризации фотонов.

Очевидно, диссипативно-индуцированные ориентационные явления возможны и в многофотонных процессах с тремя и более фотонами. При этом наиболее интересен случай двухчастотных полей с векторами поляризации $\mathbf{e}_{1,2}$. Как отмечалось выше, возможны эффекты двух типов: зависимость сечений от ориентации исходного состояния атома при нефиксированной ориентации конечного состояния (это требует создания предварительной ориентации газовой среды, например, методами оптической накачки) и возникновение ориентации в конечном состоянии при неполяризованном исходном состоянии газа. В последнем случае ориентация в процессах типа рассеяния света имеет корреляционный характер, поэтому она может быть зафиксирована лишь в совпадении с регистрацией рассеянных фотонов в заданном направлении $\boldsymbol{\kappa}_2$ и зависит от направления $\boldsymbol{\kappa}_2$

Ниже приводятся результаты для простейшего случая перехода между состояниями с $J_i = J_f = 1/2$, напр., для переходов $nS_{1/2} - n'P_{1/2}$ в атомах щелочных металлов с поглощением двух фотонов $\mathbf{e}, \boldsymbol{\kappa}, \omega$ и испусканием (ГРР) или поглощением фотона $\mathbf{e}', \boldsymbol{\kappa}', \omega'$. Вероятность перехода, усредненная по ориентациям $M_i = \pm\frac{1}{2}$ начального состояния, вычисляется для фиксированной проекции M_f момента конечного состояния на заданное направление $\mathbf{N}$ в пространстве (ось детектора, измеряющего ориентацию возбужденного атома). Вектор $\mathbf{j} = (M_f)\mathbf{N}$, где (M_f) — среднее значение M_f, характеризует ориентацию атома в конечном состоянии ($0 \leq |\mathbf{j}| \leq 1/2$). При произвольных (эллиптических) поляризациях падающих и рассеянного фотонов поляризационно-угловая структура сечения может быть записана в виде:

$$2\tilde{M}(\mathbf{e}, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{e}', \boldsymbol{\kappa}', \mathbf{j}) = a_2^{(1/2)} l^2 (1 + 2\xi' \boldsymbol{\kappa}' \cdot \mathbf{j}) + a_4^{(1/2)} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*|^2 (1 - 2\xi \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{j})$$

$$+ a_5^{(1/2)} \big(\operatorname{Re} A_2 + 2l \operatorname{Im} \mathbf{B} \cdot \mathbf{j}\big) + a_6^{(1/2)} (\operatorname{Im} A_2 - 2l \operatorname{Re} \mathbf{B} \cdot \mathbf{j}\big). \tag{5.23}$$

Здесь $\operatorname{Re} A_2$ и $\operatorname{Im} A_2$ даются формулами (5.17),

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{j} = (\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*)([\mathbf{e} \times \mathbf{e}'] \cdot \mathbf{j}). \tag{5.24}$$

А коэффициенты $a_i^{(1/2)}$ те же, что и в (5.18) если положить в последних $J_i = J_f = 1/2$. При этом $a_1 = a_3 = 0$, а остальные коэффициенты выражаются через параметры Q_{10}, Q_{12}. Таким образом, для перехода с $J_i = J_f = 1/2$ ориентационные эффекты описываются теми же атомными параметрами, что и в случае неполяризованного атома. Укажем, что выражение (5.23) может быть использовано и для анализа трехфотонных переходов в предварительно ориентированном атоме без анализа ориентации в конечном состоянии (см. аналогичное рассмотрение в [18] для двухфотонного рассеяния).

В общем случае произвольных поляризаций вещественная и мнимая части этого выражения имеют достаточно громоздкий вид

$$2 \operatorname{Re} \mathbf{B} \cdot \mathbf{j} = 2l' (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\epsilon}') \big([\boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{\epsilon}'] \cdot \mathbf{j}\big) + \frac{1}{2} \xi \xi' \big[(\boldsymbol{\kappa}' \cdot \boldsymbol{\epsilon}) \big([\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon}] \cdot \mathbf{j}\big) + \big([\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon}] \cdot \boldsymbol{\kappa}'\big)(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{j})\big]$$

$$+ l'(l-1)(\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\epsilon}') \big([\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon}'] \cdot \mathbf{j}\big) + l(l'-1)(\boldsymbol{\kappa}' \cdot \boldsymbol{\epsilon}) \big([\boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{\kappa}'] \cdot \mathbf{j}\big)$$

$$+ \frac{1}{2}(l-1)(l'-1)(\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\kappa}') \big([\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\kappa}'] \cdot \mathbf{j}\big), \tag{5.25}$$

$$2 \operatorname{Im} \mathbf{B} \cdot \mathbf{j} = \xi' \Big\{ l(\boldsymbol{\kappa}' \cdot \mathbf{j}) - (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\kappa}')(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{j}) + \frac{1}{2}(l-1)[\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\kappa}'] \cdot [\boldsymbol{\kappa} \times \mathbf{j}] \Big\}$$

$$+\xi \Big\{ l' \Big(2(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\epsilon}') \big([\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon}] \cdot [\boldsymbol{\epsilon}' \times \mathbf{j}]\big) + [\boldsymbol{\epsilon}' \times \boldsymbol{\kappa}] \cdot [\boldsymbol{\epsilon}' \times \mathbf{j}] \Big)$$

$$+ \frac{1}{2}(l'-1) \Big(2(\boldsymbol{\kappa}' \cdot \boldsymbol{\epsilon}) \big([\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon}] \cdot [\boldsymbol{\kappa}' \times \mathbf{j}]\big) + [\boldsymbol{\kappa}' \times \boldsymbol{\kappa}] \cdot [\boldsymbol{\kappa}' \times \mathbf{j}] \Big) \Big\}. \tag{5.26}$$

Как видно из (5.23)-(5.26), существуют два механизма возникновения ориентации возбужденного атома в процессе трехфотонного рассеяния. В первых трех слагаемых в (5.23) ориентационные члены ($\sim \mathbf{j}$) исчезают при $\xi = 0$, $\xi' = 0$ и описывают «нормальные» ориентационные явления в полях с отличной от нуля степенью циркулярной поляризации. Отметим лишь, что при чисто циркулярной поляризации фотона $\mathbf{e}$ ориентационные слагаемые $\sim \xi' \boldsymbol{\kappa}' \cdot \mathbf{j}$ и $\sim \operatorname{Im} \mathbf{B} \cdot \mathbf{j}$ выпадают из сечения и дают вклад лишь при линейной или эллиптической поляризации $\mathbf{e}$. Слагаемое с $\operatorname{Re} \mathbf{B} \cdot \mathbf{j}$ отлично от нуля и при $\xi = \xi' = 0$ и описывает диссипативно-индуцированную ориентацию в двух линейно-поляризованных световых полях. Выражение (5.23) в этом случае принимает особенно простой вид

$$\tilde{M}(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\epsilon}', \boldsymbol{\kappa}', \mathbf{j}) = a_2^{(1/2)} + (a_4^{(1/2)} + a_5^{(1/2)})(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\epsilon}')^2 - 2a_6(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\epsilon}')([\boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{\epsilon}'] \cdot \mathbf{j}). \tag{5.27}$$

Как видно, ориентационное слагаемое имеет ту же векторную структуру (5.22), что и в случае двухфотонного рассеяния. Для коллинеарных световых пучков вектор ориентации направлен вдоль направления распространения света и максимален, когда угол между направлениями линейной поляризации фотонов составляет $\pi/4$. Ориентация возникает и в случае неполяризованного фотона $\mathbf{e}'$ ($\xi' = l' = 0$), но при отличной от нуля степени линейной поляризации l фотона $\mathbf{e}$. Соответствующие результаты легко получаются как частный случай (5.23) – (5.26). В этом случае вектор ориентации направлен перпендикулярно плоскости векторов $\boldsymbol{\epsilon}$ и $\boldsymbol{\kappa}'$, максимален когда угол между этими векторами равен $\pi/4$ и исчезает в случае коллинеарных световых пучков.

Если же неполяризован и фотон $\mathbf{e}$, то в отличие от случая двухфотонного рассеяния ориентация исчезает (см. (5.21)). Этот факт специфичен лишь для случая двух идентичных фотонов, поэтому, если все три фотона различны, ориентация возникает и для неполяризованных фотонов и описывается комбинациями векторов вида

$$(\boldsymbol{\kappa}_1 \cdot \boldsymbol{\kappa}_2)(\boldsymbol{\kappa}_1 \cdot \boldsymbol{\kappa}_3)([\boldsymbol{\kappa}_2 \times \boldsymbol{\kappa}_3] \cdot \mathbf{j})$$

плюс члены, получаемые перестановкой индексов 1,2,3. Относительно численной величины диссипативно-индуцированных ориентационных эффектов справедливы те же соображения, что и в случае эффектов циркулярного и эллиптического дихроизма: для надпороговых частот величина эффекта порядка единицы, а в резонансной области частот для наблюдения диссипативно-индуцированных ориентационных явлений наиболее перспективен случай дипольно-запрещенных одно- или двухфотонных резонансов.

Заключение

Суммарный результат диссертации состоит в следующем: во-первых, развит общий метод кинематического анализа угловых распределений в атомных процессах при произвольных величинах атомных угловых моментов и, во-вторых, проведен общий анализ угловой структуры сечений фотопроцессов, таких как

1. излучение фотонов поляризованными атомами;

2. одноэлектронная фотоионизация поляризованных атомов;

3. двухэлектронная фотоионизация;

4. релятивистский фотоэффект;

5. релятивистские двухфотонные связанно-связанные переходы в атомах с учетом эффектов запаздывания;

6. трехфотонные связанно-связанные переходы.

Инвариантные представления МКВ (равенства (1.47) и (1.48)) наряду с новым правилом преобразования неприводимых тензоров (1.55) представляют ключевой результат главы 1. Использование инвариантных представлений МКВ может быть эффективно не только в задачах, включающих мультипольные разложения, где они позволяют извлекать информацию о поляризационной и спиновой зависимости сечений в инвариантной векторной форме, но также и в случаях, когда стандартная техника углового момента и тензорная алгебра (например, теорема Вигнера-Эккарта) неприменимы. Такая ситуация, например, возникла в работе [22], в которой исследовались ориентационные эффекты в ионизации поляризованного атома электронным ударом, с использованием так называемой 3C волновой функции, которая в асимптотическом пределе совпадает с асимптотикой точной кулоновской трехтельной волновой функции. В этой работе численно вычислялись в специальной системе координат тензоры Σ_{KQ}, описывающие динамику процесса. Использоване инвариантных представлений МКВ позволяет записать Σ_{KQ} непосредственно в виде,

$$\Sigma_{KQ} = \sum_{N=0}^{K} C_{KN}\, \mathcal{Y}_{KQ}^{N}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2), \tag{5.28}$$

справедливом также и для недиагональной матрицы плотности начального атома. В равенстве (5.28) C_{KN} являются скалярными коэффициентами, зависящими как от динамики, так и от углов между векторами задачи. В качестве векторов $\mathbf{n}_{1,2}$ могут быть выбраны единичные векторы вдоль направлений электронных импульсов.

Аналогичная ситуация возникла также в работе [52], в которой исследовалось угловое распределение в трехэлектронной фотоионизации, с использованием 6С волновой функции, которая является обобщением 3С волновой функции, используемой в двойной ионизации. Результаты раздела 1.5 позволяют записывать сечение в инвариантном виде, аналогичном приведенному в разделе 3.3.

Полученное в разделе 3.1 выражение для угловой зависимости излучения поляризованного атома отличается высокой симметрией и инвариантной структурой, содержит только скалярные произведения векторов поляризации фотона, и векторов, связанных с процессом приготовления атомной мишени, что позволяет эффективно учитывать симметрию процесса возбуждения, и удобно для анализа конкретной геометрии эксперимента. Результаты раздела 3.1 могут быть легко обобщены на случай, когда в статистическую смесь входят атомные состояния с различными значениями полного момента J_i. В этом случае возможны так называемые квантовые биения [27, 39, 51].

Как правило, прямое использование мощной техники неприводимых тензорных операторов приводит к появлению в сечениях тензорных произведений векторов задачи (мультиполярных гармоник). Проблемой является запись сечений в наиболее удобной форме, предпочтительно в виде комбинаций простых векторных конструкций – скалярных и смешанных произведений векторов. Для решения этой проблемы в главе 2 предложена техника приведения мультиполярных гармоник, которая может быть применена не только к задачам столкновений свободных атомов с электронами и/или ионами, но также и ко всем задачам, включающим мультипольные разложения по сферическим функциям.

Анализ однократной и двойной фотоионизации, проведенный в разделах 3.2, 3.3 представляет собой примеры, иллюстрирующий эффективность предлагаемой техники для решения конкретных проблем.

Результаты раздела 3.2 являются, вероятно, наиболее удобным способом описания угловых распределений в однократной фотоионизации любого атома или иона с угловым моментом J_0 с аккуратным учетом эффектов поляризации атома, фотона и электрона. Важность равенств (3.14), (3.22) - (3.33) или (3.16), (3.39) для $d\sigma/d\Omega$ состоит в их регулярной структуре и простой зависимости коэффициентов при мультиполях состояния ρ^a_{r0} от $\cos\theta$ и атомных $B-$ факторов. С увеличением J_0, коэффициенты σ_i, g_i, f_i, при векторных комбинациях в выражениях (3.14), (3.16) включают дополнительные члены с высшими рангами мультиполей состояния и полиномов от $\cos\theta$, при одной и той же глобальной векторной структуре $d\sigma/d\Omega$. Полное число независимых атомных параметров зависит от схемы связи и от квантовых чисел начального атомного состояния. Для конкретных J_0 и схем связи, представленные результаты упрощают анализ т.н. «полного» эксперимента [49] в фотоионизации в электрическом дипольном приближении. Результаты раздела 3.2 могут быть использованы и для анализа поляризационных состояний фотоиона. В этом случае возникает специфический эффект ионной ориентации, аналогичный рассмотренному в [18] эффекту атомной ориентации в рассеянии света.

Кинематический анализ двойной фотоионизации, представленный в разделе 3.3 дает общую структуру сечения без использования каких-либо приближённых выражений для двухэлектронных волновых функций. Конечно, вычисление двухэлектронных параметров $B^p_{kk'}(p_1, p_2)$ – сложная задача, которая в настоящее время может быть решена только приближённо. Пример численных расчетов ЦД в двойной фотоионизации гелия можно найти в работе [24].

Формулы для углового распределения в релятивистском фотоэффекте, полученные в разделе 3.4 могут быть полезны для анализа экспериментальных данных, поскольку они не связаны с какой-либо конкретной экспериментальной геометрией и не зависят от выбора параметров, описывающих поляризацию фотона. Кроме того, приведенные результаты облегчат проведение и теоретических расчетов, так как позволяют избежать вычисления «лишних» 9j-символов и содержат зависимость от относительного угла в виде простых многочленов.

В главе 4 развита квантово-электродинамическая теория эффектов фотонной поляризации в двухквантовых переходах между связанными состояниями неполяризованной мишени с определенными значениями полного углового момента J_i, J_f. Общая структура поляризационной и угловой зависимости сечений приведена в двух эквивалентных формах (4.16) и (4.20), выделены независящие от поляризаций атомные факторы для произвольных угловых моментов J_i, J_f. В общем случае, в сечения входят 8 различных атомных факторов, зависящих от относительного угла θ между направлениями волновых векторов фотонов. Это число уменьшается до 6 в случае упругого рассеяния. Атомные факторы являются рядами полиномов Лежандра от $cos\,\theta$ и матричных элементов второго порядка со сферическими функциями Бесселя. В деталях проанализированы частные случаи $J_i = J_f = 0$ и $J_i = J_f = 1/2$. Эти результаты обобщают хорошо известную теорию поляризационных эффектов в рассеянии фотонов свободным релятивистским электроном на случай связанно-связанных переходов.

Показано, что для связанного электрона наличие антиэрмитовой (диссипативной) части в амплитуде двухфотонных переходов приводит к специфическому эффекту фотонной поляризации — циркулярному дихроизму. Выведены необходимые условия появления ЦД и структура членов сечения, описывающих ЦД. В результате, диссипативные эффекты в фотонном рассеянии могут приводить к эффектам, анализ которых требует определения дополнительных характеристик, помимо стандартного набора традиционных параметров, таких как коэффициент экстинкции (полное сечение), степень деполяризации. Одним из таких дополнительных параметров может быть относительный ЦД, определенный как отношение Δ (4.2) к полному сечению σ. Поскольку для резонансного рассеяния или двухфотонного возбуждения мы имеем $\Delta \sim \Gamma_r$, экспериментальное изучение Δ может быть использовано, в частности, для развития высокочувствительного метода измерений ширин резонансных уровней. Для надпорогового рассеяния измерение ЦД может дать важную информацию о соотношениях между мнимыми и действительными частями амплитуд рассеяния. Численные оценки членов с ЦД для водородоподобных ионов и вычисления для атомов с заполненными оболочками показывают, что эффекты ЦД имеют заметную величину и доступны для экспериментального наблюдения.

В заключение отметим, что детальный анализ поляризационных эффектов является сложной задачей уже в рамках квантовой электродинамики свободных частиц. Тем более, такой анализ усложняется в случае связанных электронов из-за необходимости использования методов алгебры углового момента для описания электрона с произвольными J_i, J_f в комбинации с двумя бесконечными мультипольными разложениями фотонного векторного потенциала. Таким образом, несмотря на сложность, явные выражения (4.16) или (4.20) являются, по сути, наиболее общими и простыми формами записи угловых распределений, зависящих от нескольких векторов. Представленные результаты достаточны для исчерпывающего анализа угловых распределений в любом связанно-связанном переходе с двумя поляризованными фотонами. Для каждого конкретного атома они нуждаются только в расчете радиальных матричных элементов второго порядка.

В главе 5 в электрическом дипольном приближении сечение произвольного трехфотонного перехода между дискретными состояниями атома с полными угловыми моментами J_i и J_f записано в инвариантной форме, содержащей скалярные и смешанные произведения векторов поляризации фотонов и инвариантные атомные параметры, зависящие лишь от частоты фотонов. Определено число независимых атомных параметров при фиксированных значениях J_i и J_f и получены их явные выражения через приведённые составные дипольные матричные элементы. Поляризационная зависимость сечений выражена через степени l и ξ линейной и циркулярной поляризации фотонов. Проанализирован диссипативно-индуцированный циркулярный дихроизм в трехфотонных процессах, т.е. различие Δ сечений при одновременном изменении знака степени циркулярной поляризации всех фотонов. Детально рассмотрен случай двух идентичных фотонов и явление эллиптического дихроизма, когда $\Delta \sim l\xi$ и дихроизм имеет место лишь при эллиптической поляризации фотонов с $0 < |\xi| < 1$. Обсуждаются эффекты ориентации атомов при резонансном трехфотонном возбуждении линейно-поляризованными или неполяризованными фотонами, которые имеют место даже в случае линейно-поляризованных или неполяризованных фотонов.

Приложение

A Операторы повышения и понижения ранга сферической функции

В этом приложении вводятся тензорные операторы повышения и понижения ранга l сферической функции $Y_{lm}(\mathbf{r}/r)$. Сначала запишем два полезных соотношения для неприводимых тензоров.

(1) Все тензоры, ранг которых совпадает с количеством входящих в них векторов, не зависят от схем связи этих векторов. Это утверждение очевидно из соотношения (R_{i-1} и S_j - произвольные тензоры)

$$\{\{R_{i-1}\otimes\mathbf{a}\}_i\otimes S_j\}_{i+j\ m}=\{R_{i-1}\otimes\{\mathbf{a}\otimes S_j\}_{j+1}\}_{j+i\ m}. \tag{A.1}$$

(2) Если ранг тензорного произведения равен разности рангов входящих в него тензоров, то схему связи этих тензоров можно изменять в соответствии с равенством

$$\{\{R_{i-1}\otimes\mathbf{a}\}_i\otimes S_j\}_{j-i\ m}=\{R_{i-1}\otimes\{\mathbf{a}\otimes S_j\}_{j-1}\}_{j-i\ m} \tag{A.2}$$

Здесь $j\geq i\geq 1$.

Используя известное представление сферической функции в виде тензорного произведения векторов $\mathbf{n}=\mathbf{r}/r$

$$Y_{lm}(\mathbf{r}/r)=\sqrt{\frac{(2l+1)!!}{4\pi\ \ l!}}\frac{1}{r^l}\{\mathbf{r}\}_{lm} \tag{A.3}$$

и тривиальное тождество $\{\nabla\otimes\mathbf{r}\}_{a\alpha}=-\sqrt{3}\delta_{a0}\delta_{\alpha0}$, можно проверить следующее равенство

$$\{\nabla\otimes r^lY_l(\mathbf{r}/r)\}_{kq}=-\delta_{k,l-1}(2l+1)\sqrt{\frac{l}{2l-1}}r^{l-1}Y_{l-1,q}(\mathbf{r}/r). \tag{A.4}$$

Принимая во внимание равенства (A.1), (A.2), (.3), этот результат можно обобщить в виде

$$\{\{\nabla\}_k\otimes r^lY_l(\mathbf{r}/r)\}_L=\delta_{L,l-k}(-1)^k\frac{2l+1}{2l-2k+1}\sqrt{\frac{(2l)!}{2^k(2l-2k)!}}r^{l-k}Y_{l-k}(\mathbf{r}/r). \tag{A.5}$$

Итак, оператор

$$\hat{\mathcal{O}}^{l-}_{kq}(r,\nabla)=(-1)^k\frac{2l-2k+1}{2l+1}\sqrt{\frac{2^k(2l-2k)!}{(2l)!}}\frac{1}{r^{l-k}}\{\nabla\}_{kq}r^l \tag{A.6}$$

является искомым оператором понижения ранга.

Аналогично, используя равенство

$$\{\nabla \otimes \frac{1}{r^{l+1}} Y_l(\mathbf{r}/r)\}_{kq} = -\delta_{k,l+1}(2l+1)\sqrt{\frac{l+1}{2l+3}}\frac{1}{r^{l+2}} Y_{l+1,q}(\mathbf{r}/r),$$

можно получить оператор повышения ранга

$$\hat{\mathcal{O}}^{l+}_{kq}(r,\nabla) = (-1)^k \sqrt{\frac{2^k(2l+2k+1)(2l)!}{(2l+1)(2l+2k)!}} r^{l+k+1} \{\nabla\}_{kq} \frac{1}{r^{l+1}}. \tag{A.7}$$

Для операторов $\hat{\mathcal{O}}^{l\pm}_{kq}(r,\nabla)$ справедливо важное соотношение

$$\left\{\hat{\mathcal{O}}^{l\pm}_{k} \otimes Y_l(\mathbf{r}/r)\right\}_{jm} = \delta_{j,l\pm k} Y_{l\pm k,m}(\mathbf{r}/r), \tag{A.8}$$

которое может быть применено в различных приложениях сферических функций. Отметим, что выражения для некоторых компонент операторов повышения и понижения ранга сферической функции (а именно, с фиксированным значением $m = 0$ в (A.6), (A.7)) были получены в работе [67].

Теперь легко проверить следующее равенство, включающее биполярные гармоники

$$\begin{aligned} &\{\{\hat{\mathcal{O}}^{n-}_{k+\lambda_p}(r,\nabla) \otimes \hat{\mathcal{O}}^{n-}_{j-k}(r',\nabla')\}_j \otimes \{Y_n(\mathbf{r}/r) \otimes Y_n(\mathbf{r}'/r')\}_0\}_{jm} \\ &= \Pi_{j,n-k-\lambda_p,n-j-k} \begin{Bmatrix} j-k & k+\lambda_p & j \\ n & n & 0 \\ n-j+k & n-k-\lambda_p & j \end{Bmatrix} Y^{n-k-\lambda_p,n-j+k}_{jm}(\frac{\mathbf{r}}{r},\frac{\mathbf{r}'}{r'}). \end{aligned} \tag{A.9}$$

Это равенство становится очевидным после «пересвязывания» тензоров в правой части с последующим применением (.8).

Вычислив в явном виде $9j-$символ с одним нулевым индексом в (.9), и используя определения (2.3), (.6), мы приходим к выражению (2.17) раздела 2.1.

Б Векторное дифференцирование полиномов Лежандра

В этом приложении приведен метод вычисления действия тензорных произведений $\nabla-$операторов на полиномы Лежандра.

Сначала получим дифференциальную форму

$$P^{(k)}_n(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'/rr') = \frac{(2k-1)!!}{(n-k)!} r^{n+k+1} \left(-\frac{1}{r'}\mathbf{r}'\cdot\nabla\right)^{n-k} \frac{1}{r^{2k+1}} \tag{Б.1}$$

для $k-$ой производной $P_n(x)$, $x = \cos\theta = \mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'/rr'$. Для проверки этого результата сравним, с одной стороны, разложение известной производящей функции для полиномов Лежандра $P^{(k)}_n(x)$

$$f(x,r) \equiv \left(1 - 2x/r + 1/r^2\right)^{-k-1/2} = \frac{1}{(2k-1)!!}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{r}\right)^{n-k} P^{(k)}_n(x)$$

и, с другой стороны, ее разложение в ряд Тэйлора

$$f(x,r) = \frac{r^{2k+1}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{2k+1}} = r^{2k+1}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-\mathbf{r}'\cdot\nabla)^n\frac{1}{r^{2k+1}}.$$

Здесь $|\mathbf{r}| > 1$, $|\mathbf{r}'| = 1$. Приравнивая коэффициенты при равных степенях $1/r$ в правой части этих двух разложений, получаем (.1).

Далее, представим некоторые важные выражения с $\nabla-$операторами, которые полезны для приложений

$$\{\nabla\}_{kq}r^m = \frac{m!!}{(m-2k)!!}r^{m-2k}\{\mathbf{r}\}_{kq}, \tag{Б.2}$$

$$\{\nabla\}_{kq}\frac{1}{r^m} = (-1)^k\frac{(m-2+2k)!!}{(m-2)!!}\frac{1}{r^{m+2k}}\{\mathbf{r}\}_{kq}, \tag{Б.3}$$

$$(\mathbf{a}\cdot\nabla)^m\{\mathbf{r}\}_{kq}\Big|_{|\mathbf{r}|=1} = \frac{k!}{(k-m)!}\{\{\mathbf{a}\}_m\otimes\{\mathbf{r}\}_{k-m}\}_k$$

$$= 4\pi\, k!\sqrt{\frac{m!}{(k-m)!(2m+1)!!(2k-2m+1)!!}}\mathcal{Y}^{k-m}_{kq}(\mathbf{a},\mathbf{r}); \quad |\mathbf{a}| = 1, k > m. \tag{Б.4}$$

С помощью (.1) - (.4) легко вычислить действие операторов градиента ∇, ∇' на P_n в (2.17). А именно, используя правило Лейбница для $m-$ой производной $(uv)^{(m)}$ произведения двух функций u, v, сначала для вычисления действия ∇, и затем для вычисления ∇', мы находим для случая $\lambda_p = 0$ в (2.17)

$$\big\{\{\nabla\}_k\otimes\{\nabla'\}_{j-k}\big\}_{jm}r^n r'^n P_n(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'/rr')$$

$$= (-1)^{n+j}\sum_t\binom{k}{t}(-1)^t\frac{(2n+1)!!(2j-2t-1)!!}{(2n-2t+1)!!}$$

$$\times\, r^{2n-2t+1}\sum_s\binom{j-t}{s}\{\{\mathbf{r}'\}_s\otimes\{\mathbf{r}\}_{j-s}\}_{jm}\frac{(\mathbf{r}'\cdot\nabla)^{n-j+k-s}}{(n-j+k-s)!}\frac{1}{r^{2j-2t+1}}. \tag{Б.5}$$

Выше использовано простое тождество, $\nabla'(\mathbf{r}'\cdot\nabla) = \nabla$. Собирая (2.17), (.5) вместе с определениями (.1), (.3), (.4), мы непосредственно получаем выражения (2.18), (2.20) для $\lambda_p = 0$.

Хотя (2.17) справедливо и для $\lambda_p = 0$ и для $\lambda_p = 1$, результаты для случая $\lambda_p = 1$ удобнее получить, если использовать равенство

$$\big\{\{\nabla\}_{k+1}\otimes\{\nabla'\}_{j-k}\big\}_{jm} = \sqrt{\frac{2(k+1)(j-k)}{(j+1)}}$$

$$\times\big\{\{\nabla\otimes\nabla'\}_1\otimes\{\{\nabla\}_k\otimes\{\nabla'\}_{j-k-1}\}_{j-1}\big\}_{jm}, \tag{Б.6}$$

которое можно проверить «пересвязывая» тензоры в правой части этого равенства. Учитывая (.6) и заменяя в (.5) $j \to (j-1)$, с последующим тензорным умножением результата на тензор $\{\nabla\otimes\nabla'\}_1$, мы получаем выражения (2.19), (2.20) раздела 2.1 для $\lambda_p = 1$.

В заключение, приведем еще одно полезное соотношение для вычисления действия операторов ∇ на полиномы Лежандра

$$(\mathbf{a}\cdot\nabla)\, r^{n-m}\, P_n^{(m)}(\cos\alpha) = (\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})\, r^{n-m-1}\, P_n^{(m+1)}(\cos\beta) - (\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})\, r^{n-m-2}\, P_{n-1}^{(m+1)}(\cos\beta), \quad (\text{Б.7})$$

это соотношение можно проверить непосредственно, здесь $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ – единичные векторы и $\cos\beta = \mathbf{r}\cdot\mathbf{b}/r$.

В Формулы приведения для БГ с малыми рангами

Здесь представлены формулы приведения для БГ с рангами $1, 2$ и 3. Использованы обозначения $x = \cos\theta = \mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'$, $l_{\max} = \max(l, l')$.

$$Y_1^{ll}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = \frac{i(-1)^{l+1}}{4\pi}\sqrt{\frac{3(2l+1)}{l(l+1)}}P_l^{(1)}(x)\ [\mathbf{n}\times\mathbf{n}']. \quad (\text{В.1})$$

$$Y_1^{ll'}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = -\frac{1}{4\pi}\sqrt{\frac{3}{l_{\max}}}\Big((-1)^l P_l^{(1)}(x)\mathbf{n} + (-1)^{l'} P_{l'}^{(1)}(x)\mathbf{n}'\Big). \quad (\text{В.2})$$

Здесь $l' = l \pm 1$.

$$Y_{2m}^{ll}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = \frac{(-1)^{l+1}}{4\pi}\sqrt{\frac{30(2l+1)}{(2l-1)l(l+1)(2l+3)}}\Big(P_l^{(1)}(x)\{\mathbf{n}\otimes\mathbf{n}'\}_{2m} + P_l^{(2)}(x)\big\{[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']\otimes[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']\big\}_{2m}\Big). \quad (\text{В.3})$$

$$Y_{2m}^{ll'}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = i\frac{(-1)^l}{4\pi}\sqrt{\frac{10}{ll'(l_{\max}+1)}}\Big(P_l^{(2)}(x)\ \big\{\mathbf{n}\otimes[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']\big\}_{2m} + P_{l'}^{(2)}(x)\ \big\{\mathbf{n}'\otimes[\mathbf{n}'\times\mathbf{n}]\big\}_{2m}\Big). \quad (\text{В.4})$$

Здесь $l' = l \pm 1$.

$$Y_{2m}^{ll'}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = \frac{(-1)^l}{4\pi}\sqrt{\frac{5}{l_{\max}(2l_{\max}-1)(l_{\max}-1)}} \times\Big(P_l^{(2)}(x)\{\mathbf{n}\otimes\mathbf{n}\}_{2m} - 2P_{(l+l')/2}^{(2)}(x)\{\mathbf{n}\otimes\mathbf{n}'\}_{2m} + P_{l'}^{(2)}(x)\{\mathbf{n}'\otimes\mathbf{n}'\}_{2m}\Big). \quad (\text{В.5})$$

Здесь $l' = l \pm 2$.

$$Y^{ll'}_{3m}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = \mathcal{C}(l,l')\Big(-P^{(3)}_{l}(x)\{\mathbf{n}\}_{3m} + P^{(3)}_{l'}(x)\{\mathbf{n}'\}_{3m}$$
$$-\Big(3P^{(3)}_{l'+1}(x) - \frac{(l'-l+3)(l+l'+4)}{2}P^{(2)}_{l'}(x)\Big)\{\mathbf{n}\otimes\{\mathbf{n}'\}_2\}_{3m}$$
$$+\Big(3P^{(3)}_{l+1}(x) - \frac{(l-l'+3)(l+l'+4)}{2}P^{(2)}_{l}(x)\Big)\{\mathbf{n}'\otimes\{\mathbf{n}\}_2\}_{3m}\Big). \tag{B.6}$$

Здесь $l = l' \pm 1;\ l' \pm 3$.

$$Y^{ll'}_{3m}(\mathbf{n},\mathbf{n}') = i\mathcal{C}(l,l')\Big(P^{(3)}_{l}(x)\{[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']\otimes\{\mathbf{n}\}_2\}_{3m}$$
$$+ P^{(3)}_{l'}(x)\{[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']\otimes\{\mathbf{n}'\}_2\}_{3m}$$
$$+\Big(\frac{(l'-l+2)(l+l'+3)}{2}P^{(2)}_{l'}(x) - 2P^{(3)}_{l'+1}(x)\Big)$$
$$\times\{[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']\otimes\{\mathbf{n}\otimes\mathbf{n}'\}_2\}_{3m}\Big). \tag{B.7}$$

Здесь $l = l';\ l' \pm 2$.

Коэффициенты $\mathcal{C}$ в (.6), (.7) равны

$$\mathcal{C}(l,l') = \frac{6(-1)^{l'+1}}{\pi}\sqrt{\frac{70(2l+1)(2l'+1)(l+l'-3)!}{(l-l'+3)!(l'-l+3)!(l+l'+4)!}}.$$

Г Вычисление тензоров $T^{J\lambda\,J'\lambda'}_{pm}$

В качестве примера вычисления угловых конструкций, возникающих при анализе угловых распределений в двухфотонных процессах, рассмотрим тензор первого ранга

$$T^{J1\,J1}_{1m} = 4\pi\big\{(\mathbf{e}\cdot\mathcal{Y}^{(1)}_{J}(\mathbf{n}))\otimes(\mathbf{e}'^{*}\cdot\mathcal{Y}^{(1)}_{J}(\mathbf{n}'))\big\}_{1m}, \tag{Г.1}$$

$$\mathbf{e}\cdot\mathbf{n} = \mathbf{e}'\cdot\mathbf{n}' = 0, \quad \mathbf{n}\cdot\mathbf{n}' = \cos\theta = x,$$

который эквивалентен аксиальному вектору. Дифференциальная форма мультиполей $\mathcal{Y}^{(\lambda)}_{JM}(\mathbf{n})$ имеет вид [4]

$$\mathcal{Y}^{(1)}_{JM}(\mathbf{n}) = \frac{1}{\sqrt{J(J+1)}}\nabla_{\mathbf{n}}Y_{JM}(\mathbf{n}), \quad \mathcal{Y}^{(0)}_{JM}(\mathbf{n}) = \frac{-i}{\sqrt{J(J+1)}}[\mathbf{n}\times\nabla_{\mathbf{n}}]Y_{JM}(\mathbf{n}). \tag{Г.2}$$

Использование первого равенства (.2) приводит к следующей форме для T_{1m}

$$T^{J1,J1}_{1m} = \frac{4\pi}{J(J+1)}(\mathbf{e}\cdot\nabla_{\mathbf{n}})(\mathbf{e}'^{*}\cdot\nabla_{\mathbf{n}'})\big\{Y_J(\mathbf{n})\otimes Y_J(\mathbf{n}')\big\}_{1m}.$$

Далее, используем равенство для биполярных гармоник первого ранга (B.1)

$$4\pi\big\{Y_J(\mathbf{n})\otimes Y_J(\mathbf{n}')\big\}_{1m} = i(-1)^{J+1}\sqrt{\frac{3(2J+1)}{J(J+1)}}P^{(1)}_{J}(x)[\mathbf{n}\times\mathbf{n}']_{1m},$$

и очевидные равенства

$$(\mathbf{e}\cdot\nabla_{\mathbf{n}})[\mathbf{n}\times\mathbf{n}'] = [\mathbf{e}\times\mathbf{n}'],$$

$$(\mathbf{e}\cdot\nabla_{\mathbf{n}})P_J^{(k)}(\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}') = (\mathbf{e}\cdot\mathbf{n}')P_J^{(k+1)}(\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}').$$

После простых преобразований выражение для тензора T_{1m} сводится к комбинации векторных произведений

$$T_1^{J1,J1} = i(-1)^{J+1}\frac{\sqrt{3(2J+1)}}{[J(J+1)]^{3/2}}\Big\{[\mathbf{e}\times\mathbf{e}'^*]P_J^{(1)}(x) + \big((\mathbf{e}\cdot\mathbf{n}')[\mathbf{n}\times\mathbf{e}'^*] + (\mathbf{e}'^*\cdot\mathbf{n})[\mathbf{e}\times\mathbf{n}']\big)P_J^{(2)}(x) + [\mathbf{n}\times\mathbf{n}']\Big((\mathbf{e}\cdot\mathbf{e}'^*)P_J^{(2)}(x) + (\mathbf{e}\cdot\mathbf{n}')(\mathbf{e}'^*\cdot\mathbf{n})P_J^{(3)}(x)\Big)\Big\}. \quad (\text{Г}.3)$$

Вычисление тензоров $T_{1m}^{J\lambda,J'\lambda'}$ с другими значениями J, λ, J', λ' проводится аналогично с использованием приведенных выше равенств, однако окончательный вид этих тензоров более сложен.

Д Инвариантные атомные параметры для трехфотонных процессов

Используя обозначения для комбинаций атомных параметров Q_{xy}

$$\alpha_1 = \frac{1}{2}\big(\sqrt{3}Q_{12}+\sqrt{5}Q_{11}\big),\ \alpha_2 = \frac{1}{2}\big(\sqrt{3}Q_{12}-\sqrt{5}Q_{11}\big),\ \alpha_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\big(\sqrt{5}Q_{10}-Q_{12}\big),$$

$$\beta_1 = \frac{1}{2}\big(Q_{22}+\sqrt{3}Q_{21}\big),\quad \beta_2 = \frac{1}{2}\big(Q_{22}-\sqrt{3}Q_{21}\big),\quad \gamma_1 = |Q_{01}|^2,\quad \gamma_2 = \frac{1}{7}|Q_{32}|^2,$$

динамические атомные факторы f_i, g_i в (5.11) записываются в виде

$$f_0 = \frac{1}{6}\Big(\gamma_1+\gamma_2+\frac{8}{15}|\beta_1+\beta_2|^2-\frac{8}{15}\,\mathrm{Re}(\beta_1\beta_2^*)\Big),$$

$$f_2 = \frac{1}{6}\Big(-\gamma_1+\gamma_2+\frac{4}{15}|\beta_1+\beta_2|^2+\frac{8}{15}\,\mathrm{Re}(\beta_1\beta_2^*)\Big),$$

$$f_1 = \frac{1}{15}\Big(|\alpha_3|^2-\gamma_2-|\beta_1+\beta_2|^2\Big),$$

$$f_3 = \frac{1}{6}\Big(-\gamma_1+\gamma_2+\frac{4}{15}\big[|\beta_1-\beta_2|^2-3|\beta_2|^2\big]\Big),$$

$$f_5 = \frac{1}{6}\Big(-\gamma_1+\gamma_2+\frac{4}{15}\big[|\beta_1-\beta_2|^2-3|\beta_1|^2\big]\Big),$$

$$f_4 = \frac{1}{15}\Big(|\alpha_2|^2-\gamma_2-|\beta_1|^2\Big),\quad f_6 = \frac{1}{15}\Big(|\alpha_1|^2-\gamma_2-|\beta_2|^2\Big),$$

$$g_1 = \frac{2}{15}\Big({\alpha_2}^*\alpha_3-\gamma_2+|\beta_1|^2+{\beta_1}^*\beta_2\Big),\qquad g_2 = \frac{2}{15}\Big(\alpha_1{\alpha_3}^*-\gamma_2+|\beta_2|^2+{\beta_1}^*\beta_2\Big),$$

$$g_3 = \frac{1}{3}\Big(\gamma_1+\gamma_2-\frac{4}{15}\big[|\beta_1-\beta_2|^2+3\beta_1{\beta_2}^*\big]\Big),\qquad g_4 = \frac{2}{15}\Big({\alpha_1}^*\alpha_2-\gamma_2-\beta_1{\beta_2}^*\Big),$$

Параметры $p_i - q_i$ в выражении (5.13) имеют вид

$$p_0 = \frac{1}{30}\Big(8\gamma_2 + |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + |\beta_1|^2 + |\beta_2|^2\Big),$$

$$p_1 = \frac{1}{15}\Big(-3\gamma_2 + \mathrm{Re}\sum_{i=1}^{3}\alpha_i\alpha_3^*\Big),$$

$$p_2 = \frac{1}{45}\Big(12\gamma_2 + 3\,\mathrm{Re}(\alpha_1\alpha_2^*) - 5\,\mathrm{Re}(\beta_1\beta_2^*)\Big),$$

$$p_3 = \frac{1}{60}\Big(5\gamma_1 - 3\gamma_2 - 2|\alpha_2|^2 + \frac{2}{3}|\beta_1 + 2\beta_2|^2\Big),$$

$$p_4 = \frac{1}{60}\Big(5\gamma_1 - 3\gamma_2 - 2|\alpha_1|^2 + \frac{2}{3}|2\beta_1 + \beta_2|^2\Big),$$

$$q_1 = \frac{1}{15}\Big(2\gamma_2 - \alpha_3(\alpha_1^* + \alpha_2^*) - |\beta_1 + \beta_2|^2\Big),$$

$$q_2 = \frac{1}{30}\Big(-5\gamma_1 - 3\gamma_2 + \frac{4}{3}|\beta_1 - \beta_2|^2 - \alpha_1\alpha_2^* + 2\,\mathrm{Re}(\beta_1\beta_2^*) + i\,6\,\mathrm{Im}(\beta_1\beta_2^*)\Big).$$

Литература

1. М. Я. Амусья, *Атомный фотоэффект*, М., (1987).

2. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, Москва: Наука, (1966).

3. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Москва: Наука, (1989).

4. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Ленинград: Наука, (1975).

5. С. А. Запрягаев, Ю. А. Нефедов, *Оптика и спектроскопия*, **71(3)** (1991) 417–424.

6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Москва: Наука, (1988).

7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Москва: Наука, (1989).

8. Н. Л. Манаков, *ЖЭТФ*, **106** (1994) 1286.

9. Н. Л. Манаков, А. А. Некипелов, А. Г. Файнштейн, *Ядерная Физика*, **45** (1987) 1091.

10. Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, А. Г. Файнштейн, *ЖЭТФ*, **108** (1995) 1569.

11. Н. Л. Манаков, В. Д. Овсянников, *Опт. и спектр.*, **48** (1980) 651.

12. Н. Л. Манаков, А. В. Меремьянин, *ЖЭТФ*, **111** (1997) 1984–2000.

13. М. С. Маринов, *Ядерная Физика*, **5(6)** (1967) 943.

14. В. Л. Стрижевский, В. М. Клименко, *ЖЭТФ*, **53** (1967) 244.

15. А. В. Тайченачев, А. М. Тумайкин, В. И. Юдин, Г. Ниенхаус, *ЖЭТФ*, **114** (1998) 125–134.

16. Г. В. Фролов, *Ядерная Физика*, **17** (1973) 355.

17. И. Б. Хриплович, *Несохранение четности в атомных явлениях*, Москва: Наука, (1981).

18. M. Y. Agre, N. L. Manakov, *J. Phys. B*, **29** (1996) L5.

19. R. Ali, I. Ahmad, R. W. Dunford, *Phys. Rev. A*, **55** (1997) 994.

20. S. Baier, A. N. Grum-Grzhimailo, N. M. Kabachnik, *J. Phys. B.*, **27** (1994) 3363.

21. A. Bechler, R. H. Pratt, *Phys. Rev. A*, **42** (1990) 6400.

22. J. Berakdar, A. Engelns, H. Klar, *J. Phys. B*, **29** (1996) 1109.

23. J. Berakdar, H. Klar, *Phys. Rev. Lett.*, **69** (1992) 1175–1177.

24. J. Berakdar, H. Klar, A. Huetz, P. Selles, *J. Phys. B*, **26** (1993) 1463.

25. A. K. Bhatia, A. Temkin, *Rev. Mod. Phys.*, **36** (1964) 1050–1064.

26. L. C. Biedenharn, J. D. Louck, *Angular Momentum in Quantum Physics. Theory and Applications*, Addison-Wesley, (1981), рус. перев.: Л. Биденхарн, Дж. Лаук. Угловой момент в квантовой физике. М.:«Мир», 1984.

27. K. Blum, *Density matrix theory and applications*, New-York: Plenum Press, (1981).

28. P. O. Bogdanovich, A. K. Kazansky, V. N. Ostrovsky, *J. Phys. B*, **30** (1997) 921–940.

29. S. Chakrabarti, D. P. Dewangan, *J. Phys. B.*, **28** (1995) L769.

30. N. A. Cherepkov, *Adv. At. Mol. Phys.*, **19** (1983) 395–447.

31. N. A. Cherepkov, V. V. Kuznetsov, V. A. Verbitskii, *J. Phys. B*, **26** (1995) 1221.

32. J. W. Cooper, *Phys. Rev. A*, **47** (1993) 1841.

33. A. Costescu, P. M. Bergstrem, C. Dinu, R. H. Pratt, *Phys. Rev. A*, **50** (1994) 1390.

34. N. B. Delone, V. P. Krainov, *Multiphoton processes in atoms*, Berlin: Springer-Verlag, (1994).

35. A. Derevianko, W. R. Johnson, *Phys. Rev. A*, **56** (1997) 1288.

36. A. G. Fainshtein, N. L. Manakov, S. I. Marmo, *Phys. Lett*, **195a** (1994) 359–361.

37. A. G. Fainshtein, N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, L. P. Rapoport, **210** (1992) 112.

38. U. Fano, *Rev. Mod. Phys.*, **29** (1957) 76.

39. U. Fano, J. H. Macek, *Rev. Mod. Phys.*, **45** (1973) 553.

40. A. J. Ferguson, *Angular Correlation Methods in Gamma-ray Spectroscopy*, Amsterdam: North-Holland, (1965).

41. V. Florescu, M. Marinescu, R. H. Pratt, *Phys. Rev. A*, **26** (1990) 3844.

42. E. W. Hobson, *The theory of spherical and ellipsoidal harmonics*, Cambridge University Press, (1931).

43. J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*, N.-Y. – London: John Wiley and Sons Inc., (1962).

44. V. L. Jacobs, *J. Phys. B*, **5** (1972) 2257–2271.

45. W. R. Johnson, F. D. Feiock, *Phys. Rev.*, **168** (1968) 22.

46. M. Jung, B. Krässig, D. S. Gemmel, E. P. Kanter, T. LeBrun, S. H. Southworth, L. Young, *Phys. Rev., A*, **54(3)** (1996) 2127–2136.

47. N. M. Kabachnik, V. Schmidt, *J. Phys. B*, **28** (1996) 233.

48. P. P. Kane, L. Kissel, R. H. Pratt, S. C. Roy, *Phys. Rep.*, **140** (1986) 75.

49. H. Klar, H. Kleinpoppen, *J. Phys. B*, **15** (1982) 933–950.

50. A. V. Korol, A. G. Lyalin, A. V. Solovy'ov, *J. Phys. B*, **28** (1995) 4947–4962.

51. J. Macek, D. Burns, in: S. Bashkin, ed., *Beam Foil Spectroscopy*, Berlin: Springer, (1976).

52. A. W. Malcherek, J. S. Briggs, *J. Phys. B*, **30** (1997) 4419.

53. L. Malegat, P. Selles, P. Lablanque, J. Mazeau, A. Huetz, *J. Phys. B*, **30** (1997) 263–276.

54. N. L. Manakov, S. I. Marmo, A. G. Fainshtein, *Zh. Eksp. Theor. Phys.*, **106** (1995) 1569–1588.

55. N. L. Manakov, S. I. Marmo, A. V. Meremianin, in: *Invited Talks of V Int. Workshop on Autoiniz. Phen. in Atoms (AIS-95)*, 45–49, Dubna, (1995).

56. N. L. Manakov, S. I. Marmo, A. V. Meremianin, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **79** (1996) 331–334.

57. N. L. Manakov, S. I. Marmo, A. V. Meremianin, *J. Phys. B*, **29** (1996) 2711–2737.

58. N. L. Manakov, S. I. Marmo, V. V. Volovich, *Phys. Lett. A*, **204** (1996) 42.

59. N. L. Manakov, A. V. Meremianin, in: *Contributed papers of 5-th ECAMP*, no. II, 635, (1995).

60. N. L. Manakov, A. V. Meremianin, in: *Proceedings of 5-th ECAMP*, no. 2, 635, Edinburgh, (1995).

61. N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, Z. Ozgo, *Physica*, **100 C** (1980) 260.

62. W. H. McMaster, *Rev. Mod. Phys.*, **33** (1961) 8.

63. S. I. Nikitin, V. N. Ostrovsky, *J. Phys. B*, **18** (1985) 4349–4369.

64. M. Peshkin, in: *Advances in Chemical Physics*, vol. XVIII, 1–14, John Wiley and Sons, (1970).

65. T. Åberg, S. Heinäsmäki, *Appl. Phys. A*, **65** (1997) 131.

66. S. C. Roy, B. Sarcar, L. D. Kissel, R. H. Pratt, *Phys. Rev., A*, **34** (1986) 1178.

67. C. K. Schneider, R. Wilson, *J. Math. Phys.*, **20** (1979) 2380–2390.

68. C. Szymanovsky, V. Veniard, R. Tajeb, A. Maquet, *Phys. Rev., A*, **56** (1997) 700.

69. J. Viefhaus, L. Avaldi, G. Snell, *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996) 3975.

70. D. Xenakis, O. Faucher, D. Charalambidis, C. Fotakis, *J. Phys. B*, **29** (1996) L 457.