

Raman 自由电子激光的半经典理论

李治宽

(承德民族师范高等专科学校物理系, 承德 067000)

(1995 年 5 月 16 日收到)

采用 Thomas-Fermi 近似势, 将多电子系统简化为单电子问题, 并用微扰论求解了 Klein-Gordon 方程. 由电子的零级波函数求得了电荷密度和电流密度的零级表达式. 通过适当简化 Klein-Gordon 方程, 用分离变量和 WKB 近似, 求得了电子波函数及相应的电荷密度与电流密度的表达式.

PACC: 4255T; 4260

1 引 言

文献[1,2]用半经典理论研究了一维和三维 Compton 型自由电子激光器(FEL). 对于 Compton 型 FEL, 可用描述单电子的 Klein-Gordon 方程通过适当的近似方法, 进行求解. 在量子力学中如同经典力学中的情况一样, 解决多粒子问题要比单粒子问题复杂和困难得多. 而单电子近似法是解决多体问题的一种行之有效的方法. 这种方法最终归结为解单电子的方程, 并已广泛应用于原子结构的具体计算中^[3]. 本文试图用这种方法解决 Raman 型 FEL 的问题. 具体采用了 Thomas-Fermi 势, 并用微扰论求解了 Klein-Gordon 方程, 用得到的零级波函数, 求得了电荷密度与电流密度的表达式. 还对 Klein-Gordon 方程进行了适当的简化, 用分离变量和 WKB 近似方法, 直接求解了 Klein-Gordon 方程, 用求得的波函数计算了电荷密度和电流密度, 并与用零级波函数求得的电荷密度和电流密度进行了比较, 对有关问题进行了讨论.

2 相对论波动方程与电子波函数

一个电子在电磁场($\phi, \mathbf{A}$)中的 Klein-Gordon 方程为

$$\{(\hat{\mathbf{E}} + e\phi)^2 - [c\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}]^2 + m_0^2 c^4\} \psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (1)$$

式中 能量算符 $\hat{E} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (2)$

动量算符 $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla, \quad (3)$

式中 $-e$ 为电子电荷, m_0 为静止质量, c 为真空中光速, $\phi, \mathbf{A}$ 为电磁场的标势和矢势, $i \equiv \sqrt{-1}$, $\hbar \equiv h/2\pi$, h 为普朗克常数, $\psi(\mathbf{r}, t)$ 为电子波函数.

为了便于比较, 本文采用文献[2]的符号. 将(2), (3)式代入(1)式, 得^[4]

$$\begin{aligned} & \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2ie\hbar\phi \frac{\partial}{\partial t} + ie\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} + e^2 \phi^2 \right] \psi(\mathbf{r}, t) \\ & = \left[-\hbar^2 c^2 \nabla^2 - 2ie\hbar c \mathbf{A} \cdot \nabla - ie\hbar c (\nabla \cdot \mathbf{A}) + e^2 \mathbf{A}^2 + m_0^2 c^4 \right] \psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (4)$$

展开上式时,用了対易关系:

$$f\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}f = i\hbar\nabla f, \quad (5)$$

f 为坐标的任意函数.若选择库仑规范,则有

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (6)$$

为了求解方程(4),下面确定 $\mathbf{A}$, ϕ 的具体形式.

设静磁泵场为

$$\mathbf{B} = B_0(e_x \cos k_w z + e_y \sin k_w z), \quad (7)$$

式中 B_0 为常数, $k_w = 2\pi/\lambda_w$, λ_w 为磁场的空间周期. e_x , e_y 为 x , y 方向的单位矢.与(7)式相应的矢势 $\mathbf{A}_i$ 为

$$\mathbf{A}_i = A_i(e_x \cos k_w z + e_y \sin k_w z), \quad (8)$$

式中

$$A_i = -B_0/k_w. \quad (9)$$

若采用 Weizsäcker-Williams 近似, (8)式变成

$$\mathbf{A}_i = A_i[e_x \cos(\omega_i t + k_i z) + e_y \sin(\omega_i t + k_i z)], \quad (10)$$

式中 $k_i = \frac{1}{2}k_w$.

设激光场可表示为^[2]

$$\mathbf{A}_s = A_s(x, y, z, t)[e_x \cos(\omega_s t - k_s z) + e_y \sin(\omega_s t - k_s z)], \quad (11)$$

$A_s(x, y, z, t)$ 为慢变函数.为了方便,采用柱坐标系 (r, φ, z) , 这时(10)和(11)式分别为

$$\mathbf{A}_i = A_i[e_r \cos(\varphi - \omega_i t - k_i z) - e_\varphi \sin(\varphi - \omega_i t - k_i z)], \quad (12)$$

$$\mathbf{A}_s = A_s(r, \varphi, z, t)[e_r \cos(\varphi - \omega_s t + k_s z) - e_\varphi \sin(\varphi - \omega_s t + k_s z)], \quad (13)$$

e_r , e_φ , e_z 分别为 r , φ , z 方向的单位矢.总矢势为

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_i + \mathbf{A}_s. \quad (14)$$

设电子束产生的势 ϕ 只是坐标 z 的慢变函数,在 (r, φ) 方向上不变.由 Thomas-Fermi 方程

$$\nabla^2 \phi = \alpha(\phi - \phi_0)^{3/2[3]}, \quad (15)$$

式中

$$\alpha = \frac{4e}{3\pi\hbar^3}(2M_0 e)^{3/2}, \quad (16)$$

可求出 ϕ , 式中 $\phi_0 = \phi(z_0)$ 为在边界 z_0 处的势.考虑到 ϕ 为 z 的慢变函数,可设 $\nabla^2 \phi \simeq 0$,

则由(15)式可解得 $\phi(z) \simeq \phi_0$. (17)

设

$$\psi(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{r}, \varphi, z)f(t), \quad (18)$$

将(14), (17)和(18)式代入(4)式,可得 $f(t)$ 和 $u(\mathbf{r}, \varphi, z)$ 满足的方程分别为

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} - \frac{2ie\phi_0}{\hbar} \frac{df(t)}{dt} + \frac{E^2 - e^2 \phi_0^2}{\hbar^2} f(t) = 0, \quad (19)$$

$$\left\{ -\hbar^2 c^2 \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - E^2 + M^2 c^4 + \hat{H}' \right\} u(\mathbf{r}, \varphi, z) = 0, \quad (20)$$

$$\text{式中} \quad M^2 c^4 = m_0^2 c^4 + e^2 A_i^2, \quad (21)$$

A_s^2 忽略不计, $\hat{H}'$ 为哈密顿算符的微扰. 由方程(19)和(20)可求得波函数的零级解为

$$\psi^{(0)}(r, \varphi, z, t) = C_{mn} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (e\phi_0 \pm E) t + \frac{i}{\hbar} p_z z + i m \varphi \right] J_m(\mu_{mn} r), \quad (22)$$

式中 E 为电子能量, p_z 为电子 z 方向的动量, C_{mn} 为归一化常数, $J_m(\mu_{mn} r)$ 为贝塞尔函数, μ_{mn} 为该函数的第 n 个正根.

$$\begin{aligned} \hat{H}' = & 2e^2 A_i A_s(r, \varphi, z, t) \cos(\Delta \omega t - kz) + i2e\hbar c \left\{ [A_i \cos(\varphi - \omega_i t - k_i z) \right. \\ & + A_s(r, \varphi, z, t) \cos(\varphi - \omega_s t + k_s z)] \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} [A_i \sin(\varphi - \omega_i t - k_i z) \\ & \left. + A_s(r, \varphi, z, t) \sin(\varphi - \omega_s t + k_s z)] \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\}, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\text{式中} \quad \Delta \omega = \omega_s - \omega_i, \quad (24)$$

$$k = k_s + k_i. \quad (25)$$

(23) 式中略去第二项, 只保留第一项是合理的^[2], 即

$$\hat{H}' = 2e^2 A_i A_s(r, \varphi, z, t) \cos(\Delta \omega t - kz). \quad (26)$$

若设激光场振幅 A_s 为常数, 且 $\omega_s = \omega_i$, 则有

$$\hat{H}' = 2e^2 A_i A_s \cos kz. \quad (27)$$

这时(20)式变成

$$\left\{ -\hbar^2 c^2 \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - E^2 + M^2 c^4 + 2e^2 A_i A_s \cos kz \right\} u(r, \varphi, z) = 0. \quad (28)$$

通过分离变量, 设 $u(r, \varphi, z) = R(r) \Phi(\varphi) V(z)$, 方程(28)变成以下三个常微分方程:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) + \left(\mu^2 - \frac{m^2}{r^2} \right) R = 0, \quad (29)$$

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m^2 \Phi = 0, \quad (30)$$

$$\frac{d^2 V}{dz^2} + \left(\alpha^2 - \frac{2e^2 A_i A_s \cos kz}{\hbar^2 c^2} \right) V = 0, \quad (31)$$

$$\text{式中} \quad \alpha^2 = p_z^2 / \hbar^2, \quad \mu^2 = \beta^2 - \alpha^2, \quad \beta^2 = \frac{E^2 - M^2 c^4}{\hbar^2 c^2}. \quad (32)$$

(31) 式是不均匀弦方程, 可用 WKB 近似求得解^[4]:

$$V(z) = \frac{A}{\sqrt{p_c}} e^{\pm i \int p_c(z) dz}, \quad (33)$$

$$\text{式中} \quad p_c = \left(\frac{p_z^2}{\hbar^2} - \frac{2e^2 A_i A_s \cos kz}{\hbar^2 c^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (34)$$

将(34)式展开取前二项, 代入(33)式, 可得

$$V(z) = \frac{A}{\sqrt{p_c}} \exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \left(p_z z - \frac{e^2 A_i A_s}{p_z k c^2} \sin kz \right) \right]. \quad (35)$$

这时整个波函数的表达式为

$$\psi(r, \varphi, z, t) = A_{mn} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (e\phi_0 \pm E) t \pm \frac{i}{\hbar} (p_z z - \frac{e^2 A_i A_s}{p_z k c^2} \sin kz) + i m \varphi \right] J_m(\mu_{mn} r), \quad (36)$$

式中取 $p_c^{-\frac{1}{2}} \simeq p_z^{-\frac{1}{2}} = \text{常数}$, 归并到归一化因子 A_{mn} 中.

3 Raman FEL 的电荷分布与电流分布

电子的电荷密度 ρ 和电流密度 $\mathbf{J}$ 的公式为^[4]

$$\rho = -\frac{ei\hbar}{2m_0 c^2} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi), \quad (37)$$

$$\mathbf{J} = -\frac{ei\hbar}{2m_0} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi), \quad (38)$$

ψ^* 为 ψ 的复共轭.

将零级微扰解(22)式代入(37)和(38)式, 可计算出零级表达式为

$$\rho^{(0)} = \frac{e}{m_0 c^2} (e\phi_0 \pm E) C_{mn}^2 J_m^2(\mu_{mn} r), \quad (39)$$

$$\mathbf{J}^{(0)} = -\frac{\hbar e}{m_0} C_{mn}^2 J_m^2(\mu_{mn} r) (\frac{m}{r} e_\varphi + \frac{p_z}{\hbar} e_z). \quad (40)$$

若 $e\phi_0 / m_0 c^2 \ll 1$, 并令 $\gamma = E / m_0 c^2$, (41)

则有 $\rho^{(0)} = \pm e \gamma C_{mn}^2 J_m^2(\mu_{mn} r)$, (42)

由(40)式得到的结论是 e_r 方向的电流密度为零:

$$J_r^{(0)} \equiv 0. \quad (43)$$

e_φ 方向的 $J_\varphi^{(0)}$ 是量子化的, 量子数 $m=0, 1, 2, \dots$. 将(36)式代入(37)和(38)式, 计算的结果为

$$\rho = \frac{e}{m_0 c^2} (e\phi_0 \pm E) A_{mn}^2 J_m^2(\mu_{mn} r), \quad (44)$$

$$\mathbf{J} = -\frac{\hbar e}{m_0} A_{mn}^2 J_m^2(\mu_{mn} r) (\frac{m}{r} e_\varphi + \frac{p_z}{\hbar} e_z), \quad (45)$$

式中 $p'_c = p_z - \frac{e^2 A_i A_s}{p_z c^2} \cos kz$. (46)

4 讨 论

1. 在 FEL 的经典理论中, 用单电子近似法已得到了有益的结果^[5,6]. 本文尝试把量子力学中的单电子近似应用到 FEL 的半经典理论中, 但本文通过近似所得到的 $\phi(z) = \phi_0$ 无疑太粗糙. Thomas-Fermi 方程是一非线性方程, 很难得到精确解, 由此得到的势函数精度较差, 在原子结构的实际计算中也并未真正采用. 如果采用精度较高, 考虑了电子之

间交换作用的 Thomas-Fermi-Dirac 势, 计算就更困难^[3].

2. 比较(39), (44)式与(40), (45)式, 看出两种计算方法得到的结果一致. 势 ϕ_0 直接影响着电荷密度的分布. (45)式中的 p_c 包含了泵浦波、散射波和电子三者之间的相互作用, 若忽略这些相互作用, (45)式就变成了(40)式; (36)式变成了(22)式. 由此看出, 本文通过适当简化 Klein-Gordon 方程, 用分离变量和 WKB 近似求得的波函数要比零级波函数包含更多的信息.

- [1] H. L. Fang, S. F. Fu, *Scientia Sinica*, **A29**(1986), 290.
- [2] 方洪烈、傅淑芬, 中国科学(A辑), (10)(1986), 1081.
- [3] 赵伊君、张志杰, 原子结构的计算(科学出版社, 北京, 1987), 第 39, 56 页.
- [4] 周世勋, 量子力学(上海科学技术出版社, 1961), 第 98, 372, 374 页.
- [5] C. C. Shih, A. Yariv, *Phys. Rev.*, **A22**(1980), 2717.
- [6] 李治宽, 物理学报, **44**(1995), 1747.

SEMICLASSICAL THEORY OF RAMAN FREE-ELECTRON LASERS

LI ZHI-KUAN

(Department of Physics, Chengde Teachers College of Nationalities, Chengde 067000)

(Received 16 May 1995)

ABSTRACT

In this paper, we point out that the problem of a system of many particles can be simplified into that of a single electron by using Thomas-Fermi potential in Raman free-electron lasers. Klein-Gordon equation is solved by using perturbation theory. The formula of the density of electric charge and current density are derived from the corresponding zero order wave function.

If we simplify properly the Klein-Gordon equation, we can solved by using the methods of separation of variables and WKB approximation. We also derived the formula of the electric charge and current density which correspond to the new wave function.

PACC: 4255T; 4260