Письма в ЖЭТФ, том 106, вып. 2, с. 104 – 107

Слияние фотонов в поле многоэлектронного атома: высшие порядки теории возмущений

А. Н. Хоперский[1], *А. М. Надолинский, В. А. Явна*

Ростовский государственный университет путей сообщения, 344038 Ростов-на-Дону, Россия

Поступила в редакцию 27 мая 2017 г.

После переработки 8 июня 2017 г.

В приближении Тамма–Данкова исследован вклад высших порядков нерелятивистской квантовой теории возмущений в дифференциальное сечение процесса слияния трех рентгеновских фотонов в один фотон в поле многоэлектронного атома. Высшие порядки практически не изменяют физических результатов лидирующего (второго) порядка теории возмущений.

DOI: 10.7868/S0370274X17140090

1. Введение. В работах [1, 2] в лидирующем (втором) порядке нерелятивистской квантовой теории возмущений впервые исследован фундаментальный нелинейный процесс слияния трех рентгеновских фотонов в один фотон в поле атома и атомного иона. Этот порядок определен оператором контактного (нелинейного по электромагнитному полю) взаимодействия. В отличие, например, от квантовой электродинамики [3], в математическом формализме работ [1, 2] все порядки теории возмущений пропорциональны α^4, где α – постоянная тонкой структуры. Однако, эти порядки отличаются числом энергетических знаменателей и, соответственно, матричных элементов операторов взаимодействия электромагнитного поля с атомом. В таком представлении теории возмущений игнорирование высших порядков (с участием линейного по электромагнитному полю оператора радиационного перехода) оставляет открытым вопрос о значениях соответствующих поправок к абсолютным значениям и форме сечения процесса. Без решения данного вопроса физические результаты работ [1, 2] остаются существенно не полными. В данном Письме в рамках возникшего в релятивистской квантовой теории поля приближения Тамма–Данкова [4, 5] мы снимаем этот вопрос. Здесь необходимо отметить (см., например, работу [6]), что приближение Тамма–Данкова до сих пор не получило своего аналитического обоснования. В частности, остается открытым вопрос о калибровочной инвариантности этого приближения и, как результат, развиваемой в [1, 2] и данном Письме теории. Таким образом, мы дополняем результаты работ [1, 2] в предположении справедливости приближения Тамма–Данкова. В качестве объекта исследования взят атом неона (Ne; заряд ядра атома $Z = 10$; конфигурация и терм основного состояния $[0] = 1s^2 2s^2 2p^6 [^1S_0]$). Выбор обусловлен сферической симметрией основного состояния Ne и его доступностью в газовой фазе для проведения высокоточных экспериментов с рентгеновским лазером на свободных электронах (XFEL; [7, 8]).

2. Теория. Рассмотрим процесс слияния трех ω–XFEL–фотонов в один ω_R-фотон ($\omega_R = 3\omega$) в поле атома:

$$\omega + \omega + \omega + [0] \to X \to [0] + \omega_R. \qquad (1)$$

В (1) и далее принята атомная система единиц: $\hbar = e = m_e = 1$, $\hbar$ – постоянная Планка, e – заряд и m_e – масса электрона. Амплитуда вероятности процесса (1) равна сумме большого набора амплитуд второго, третьего и четвертого порядков теории возмущений. Определим эту сумму в приближении Тамма–Данкова [4, 5], учитывая в каждом порядке лишь лидирующие амплитуды с минимальным числом фотонов, электронов и вакансий в виртуальных (промежуточных) X – состояниях системы “атом $\oplus$ фотоны” (рис. 1):

$$M = M_2 + M_3 + M_4. \qquad (2)$$

Выражение для M_2 (см. рис. 1a) дано в работе [1]. Вычисление M_3 (см. рис. 1b) и M_4 (см. рис. 1c) требует решения сложной задачи (см. Appendix B в работе [1]) точного учета полноты набора одноэлектронных xl-состояний:

$$\underset{x \le F, > F}{\mathsf{S}} |xl(r)\rangle\langle xl(r')| = \delta_l(r - r'), \qquad (3)$$

где F – уровень Ферми (совокупность квантовых чисел валентной оболочки атома), символ $\mathbf{S}$ означает

[1] e-mail: hopersky_vm_1@rgups.ru

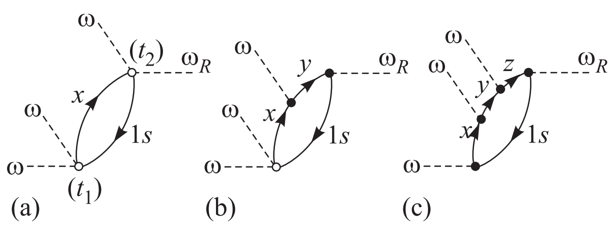

Рис. 1. Лидирующие амплитуды вероятности слияния второго (a), третьего (b) и четвертого (c) порядков теории возмущений в представлении диаграмм Фейнмана нерелятивистской квантовой теории многих тел. Стрелка вправо – электрон ($x \equiv xl$, $l \in [0; \infty)$), стрелка влево – вакансия ($1s$). Открытый кружок – вершина взаимодействия по j_l-оператору контактного перехода. Черный кружок – вершина взаимодействия по оператору радиационного перехода. ω (ω_R) – падающий (рассеянный) фотон. Направление времени – слева направо ($t_1 < t_2$)

суммирование (интегрирование) по состояниям дискретного (сплошного) спектра и δ – дельта-функция Дирака. Для учета (3) примем приближение факторизации M_3 и M_4 на энергетическую часть и часть, содержащую лишь матричные элементы операторов контактного и (или) радиационного переходов. Тогда в области энергий $2\omega \cong I_{1s}$ (I_{1s} – энергия порога ионизации $1s$-оболочки атома), используя методы теории неприводимых тензорных операторов (см. Appendix A в работе [1]), имеем:

$$M_3 \to AB, \tag{4}$$

$$A = \rho a_s a_p, \tag{5}$$

$$B = \underset{x,y>F}{\mathsf{S}} \langle 1s|j_0|xs\rangle\langle xs|r|yp\rangle\langle yp|r|1s\rangle, \tag{6}$$

$$M_4 \to \sum_{l=s,d} C_l D_l, \tag{7}$$

$$C_l = \rho^2 \Delta_p a_p a_l, \tag{8}$$

$$D_l = \underset{x,y,z>F}{\mathsf{S}} \beta_{xz}\langle xp|r|yl\rangle\langle yl|r|zp\rangle. \tag{9}$$

В (6) и (9) для оператора радиационного перехода принято дипольное приближение (в форме длины). Учет недипольных эффектов [9, 10] и корреляций приближения случайных фаз с обменом [11, 12] является предметом будущих исследований. В (5), (6), (8) и (9) обозначено: $\rho = I_p(I_s - I_p)$, I_l – Хартри-Фоковская энергия $1s \to 3l$ перехода,

$$\Delta_p = (\omega - I_p) + \mathrm{i}\gamma_{1s})^{-1},$$

$$a_{s,d} = (2\omega - I_{s,d} + \mathrm{i}\gamma_{1s})^{-1},$$

$$a_p = (3\omega - I_p + \mathrm{i}\gamma_{1s})^{-1},\ \gamma_{1s} = \Gamma_{1s}/2,$$

Γ_{1s} – естественная ширина распада $1s$-вакансии, $j_0(qr)$ – сферическая функция Бесселя, $q = 2\omega/c$, $\beta_{xz} = \langle 1s|r|xp\rangle\langle zp|r|1s\rangle$ и c – скорость света в вакууме. В (6) вклад j_2-функции Бесселя отброшен в силу неравенства $|\langle 1s|j_2|xd\rangle| \ll |\langle 1s|j_0|xs\rangle|$.

Учитывая (3) в (6) и (9), для атома Ne получаем:

$$M_3 = -\mu a_s a_p, \tag{10}$$

$$M_4 = -\frac{1}{\omega^2}(\alpha_s a_s + \alpha_d a_d), \tag{11}$$

где $\mu = 3.63 \cdot 10^{-4}$ эВ, $\alpha_s(\alpha_d) = 0.061$ (0.163) эВ^2.

Заметим, что расчет M_3 и M_4 с учетом лишь основных возбужденных $3(s,p,d)$ состояний дискретного спектра и состояний сплошного спектра по порядку величин воспроизводит результаты приближения факторизации. Такой расчет, в свою очередь, сталкивается с необходимостью аналитического вычисления сингулярных матричных элементов оператора радиационного перехода по состояниям сплошного спектра. Мы использовали приближение плоских волн

$$|x(r)\rangle = (2/\pi k_x)^{1/2}\sin(k_x r), \tag{12}$$

$$k_x = \sqrt{2x},\quad \langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \tag{13}$$

для волновых функций сплошного спектра и получили (форма скорости)

$$(x-y)\langle x|r|y\rangle = \mathsf{P}\left(\frac{f_{xy}}{x-y}\right) + \mathrm{i}\sqrt{2x}\delta(x-y), \tag{14}$$

где $f_{xy} = (-\sqrt{23}/\pi)(xy)^{1/4}$ и P – символ главного значения интеграла в смысле Коши. С точностью до фазового множителя (отсутствует в приближении плоских волн) сингулярная часть (14) воспроизводит таковую, полученную в приближении кулоновских волновых функций [13, 14]. Аналитическая структура (14) для хартри-фоковских волновых функций сплошного спектра многоэлектронного атома установлена в работе [15]. Учет этой структуры, в частности, при расчете M_3 и M_4 вне приближения факторизации, является предметом будущих исследований.

Дифференциальное сечение процесса (1) с учетом (2) принимает вид [1]:

$$\frac{d\sigma_\perp}{d\Omega_R} = |\eta M|^2 \equiv \sigma_\perp^{(1)}, \tag{15}$$

где Ω_R – пространственный угол вылета ω_R-фотона, $\eta = 2\pi c r_0^2/\omega$, r_0 – классический радиус электрона. Падающие (параллельно друг другу) и рассеянный фотоны линейно поляризованы перепендикулярно ($\perp$) плоскости рассеяния. Плоскость рассеяния проходит через волновые векторы падающих и рассеянного фотонов.

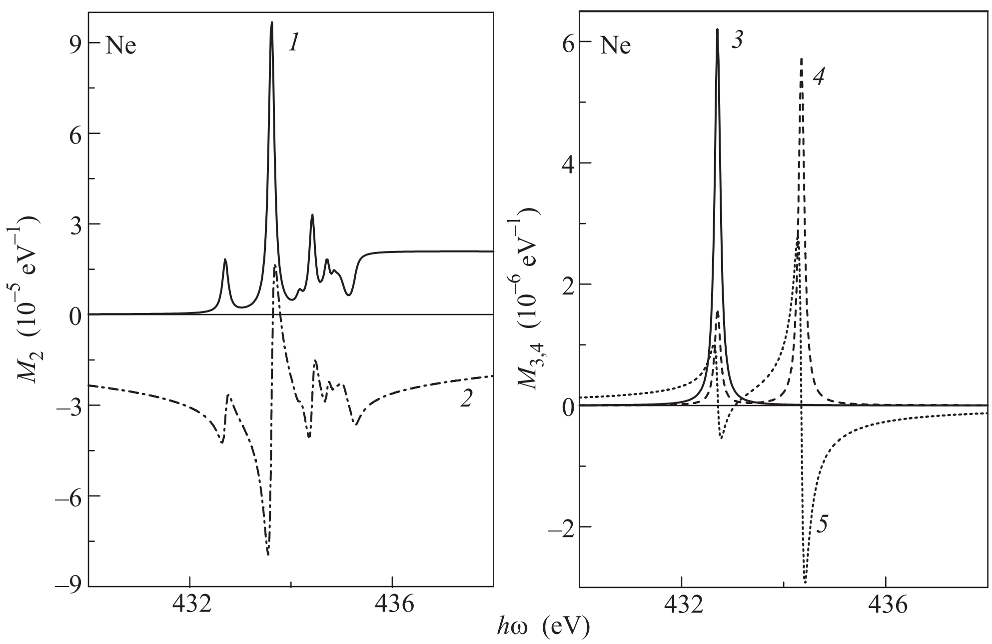

Рис. 2. Реальные и мнимые части амплитуд вероятности слияния в (2): *1* – $\mathrm{Im}\,M_2$, *2* – $\mathrm{Re}\,M_2$, *3* – $\mathrm{Im}\,M_3$, *4* – $\mathrm{Im}\,M_4$, *5* – $\mathrm{Re}\,M_4$. $I_{1s}(\Gamma_{1s}) = 870.17(0.27)$ эВ, угол рассеяния $\theta = 150°$, $\hbar\omega$ – энергия XFEL-фотона

3. Результаты и обсуждение. Физические результаты второго порядка теории возмущений для атома Ne приведены в работе [2]. В данном Письме рассмотрим лишь результаты учета высших порядков.

Согласно рис. 2, на котором представлены реальные и мнимые части амплитуд вероятности слияния в (2), $\sqrt{|M_{3,4}|^2}$ практически на порядок величины меньше $\sqrt{|M_2|^2}$. При этом, в области $1s \to 3s$ резонанса спектра слияния $|\mathrm{Re}\,M_3/\mathrm{Im}\,M_3| \cong 10^{-4}$ и вклад $\mathrm{Re}\,M_3$ на рис. 2 не представлен. Учет M_3 приводит к изменению значения максимума и формы длинноволнового монопольного $1s \to 3s$ ($I_s = 865.41$ эВ) сателлита лидирующего дипольного $1s \to 3p$ ($I_p = 867.23$ эВ) резонанса спектра слияния. Учет M_4 приводит к изменению максимумов и форм как $1s \to 3s$, так и коротковолнового квадрупольного $1s \to 3d$ ($I_d = 868.70$ эВ) сателлитов. В целом, согласно изображенному на рис. 3 дифференциальному сечению процесса (1), учет высших порядков теории возмущений приводит к перераспределению в коротковолновую область энергий XFEL-фотона вероятности процесса (1), рассчитанной во втором порядке.

4. Заключение. В рамках принятых приближений учет высших порядков нерелятивистской квантовой теории возмущений практически не изменяет абсолютных значений и формы дифференциального сечения процесса (1), полученных в лидирующем (втором) порядке. Таким образом, в данном Письме на примере атома Ne предсказан окончательный результат для сечения процесса слияния трех рент-

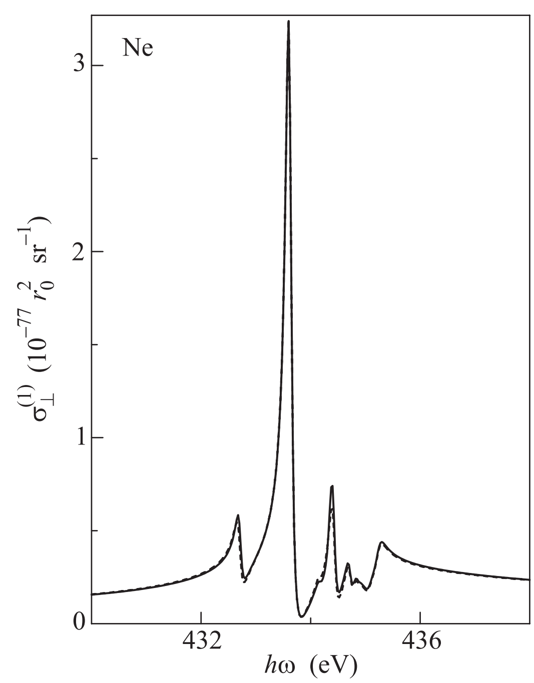

Рис. 3. Дифференциальное сечение процесса (1): пунктирная кривая – второй порядок [2], сплошная кривая – второй, третий и четвертый порядки. $I_{1s}(\Gamma_{1s} = 870.17$ (0.27) эВ, угол рассеяния $\theta = 150°$, $\hbar\omega$ – энергия XFEL-фотона

геновских фотонов в один в поле многоэлектронного атома. Можно предположить, что исследование таких процессов на XFEL's следующих поколений станет одним из приоритетных направлений физики многофотонных процессов.

---

1. A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, and S. A. Novikov, J. Phys. B **50**, 065601 (2017).
2. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, Р. В. Конеев, Письма в ЖЭТФ **105**, 535 (2017).
3. V. B. Berestetskii, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Quantum Electrodynamics*, Pergamon Press, Oxford (1982).
4. Ig. Tamm, J. Phys. (USSR) **9**, 449 (1945).
5. S. M. Dancoff, Phys. Rev. **78**, 382 (1950).
6. В. П. Силин, И. Е. Тамм, В. Я. Файнберг, ЖЭТФ **29**, 6 (1955).
7. L. Young, E. P. Kanter, B. Krässig et al. (Collaboration), Nature (London) **466**, 56 (2010).
8. M. Yabashi and H. Tanaka, Nat. Photon. **11**, 12 (2017).
9. D. W. Lindle and O. Hemmers, J. Electr. Spectr. Rel. Phenom. **100**, 297 (1999).
10. M. Ya. Amusia, A. S. Baltenkov, Z. Felfli, and A. Z. Msezane, Phys. Rev. A **59**, R2544 (1999).
11. M. Ya. Amusia, *Atomic Photoeffect*, Plenum Press, N.Y. (1990).
12. W. R. Johnson, A. Derevianko, K. T. Cheng, V. K. Dolmatov, and S. T. Manson, Phys. Rev. A **59**, 3609 (1999).
13. A. V. Korol, J. Phys. B **26**, 4769 (1993).
14. C. Marante, L. Argenti, and F. Martin, Phys. Rev. A **90**, 012506 (2014).
15. S. A. Novikov and A. N. Hopersky, J. Phys. B **44**, 235001 (2011).