Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 2, с. 61 – 64

Эффект тормозного излучения при резонансном комптоновском рассеянии фотона многоэлектронным атомом

А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский[1)], *И. Д. Петров*

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

Поступила в редакцию 8 ноября 2019 г.
После переработки 29 ноября 2019 г.
Принята к публикации 6 декабря 2019 г.

Теоретически предсказана лидирующая роль эффекта тормозного излучения при резонансном комптоновском рассеянии жесткого рентгеновского фотона многоэлектронным атомом. Этот результат может оказаться важным при интерпретации $K\alpha, \beta$-спектров рентгеновской эмиссии звезд, галактик и галактических кластеров.

DOI: 10.31857/S0370274X20020022

1. Введение. Процесс резонансного неупругого (комптоновского) рассеяния фотона многоэлектронным атомом – один из фундаментальных процессов микромира. Его экспериментальному и теоретическому исследованию в области энергий порогов ионизации глубоких оболочек атома посвящено большое количество работ (см., например, [1–4] и ссылки там). В данном Письме мы исследуем дифференциальное сечение процесса в области энергий падающего фотона, намного превышающих энергию порога ионизации глубокой $1s$-оболочки атома ($\hbar\omega \gg I_{1s}$). В качестве объекта исследования взят атом неона (Ne; заряд ядра 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 [5] для проведения высокоточных экспериментов. Такие исследования необходимы, в частности, для полноты теоретического описания рентгеновского континуума (фона тормозного излучения) в наблюдаемых спектрах эмиссии от горячих астрофизических объектов (см., например, [6]).

2. Теория. Рассмотрим процесс резонансного комптоновского рассеяния фотона электронами атома Ne:

$$\omega + [0] \to Q \to 2p_j \varepsilon p + \omega_C, \tag{1}$$

$$Q: \quad 1sxp, \quad 2p_j x(s,d). \tag{2}$$

В работе [1] представлена формально математически полная теория процесса (1). Однако, насколько нам известно, состояния $np_j x(s,d)$, $n \geq 2$ исследованы лишь как причина возникновения "инфракрасной расходимости" сечений рассеяния при нулевой энергии рассеянного фотона [1, 2]. В данном Письме мы строим теорию дифференциального сечения процесса (1) с учетом состояний $2p_j x(s,d)$ и в области энергий резонансов рентгеновской эмиссии.

В (1) и далее принята атомная система единиц ($\hbar = e = m_e = 1$), $\omega\,(\omega_C)$ – энергия падающего (рассеянного) фотона, $\omega \geq I_{1s}$, I_{1s} – энергия порога ионизации $1s$-оболочки, $j = 1/2, 3/2$, Q – промежуточные (виртуальные) состояния ионизации атома и заполненные оболочки конфигураций атома не указаны. Физическая интерпретация амплитуды вероятности рассеяния (1) в представлении диаграмм Фейнмана дана на рис. 1. Амплитуды вероятности

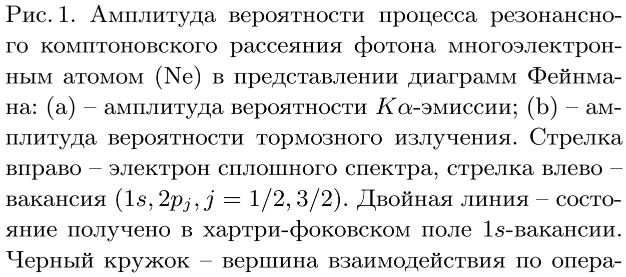

Рис. 1. Амплитуда вероятности процесса резонансного комптоновского рассеяния фотона многоэлектронным атомом (Ne) в представлении диаграмм Фейнмана: (a) – амплитуда вероятности $K\alpha$-эмиссии; (b) – амплитуда вероятности тормозного излучения. Стрелка вправо – электрон сплошного спектра, стрелка влево – вакансия ($1s, 2p_j, j = 1/2, 3/2$). Двойная линия – состояние получено в хартри-фоковском поле $1s$-вакансии. Черный кружок – вершина взаимодействия по оператору радиационного перехода. $\omega\,(\omega_C)$ – падающий (рассеянный) фотон, $\omega \geq I_{1s}$. Направление времени – слева направо ($t_1 < t_2$)

[1)]e-mail: amnrnd@mail.ru

рассеяния нерезонансного типа в данном Письме не учитывались. Причина этому в следующем. Максимальная величина сечения по оператору контактного (квадратичного по электромагнитному полю) взаимодействия на три порядка меньше величины сечения рассеяния по каналам (1). Игнорирование такого сечения приводит к изотропии процесса (1) по углу рассеянного фотона. Однако заметим следующее. При расчете амплитуды вероятности тормозного излучения (рис. 1b) в разложении волновой функции xd-электрона сплошного спектра по парциальным волнам мы оставили лишь вклад углового момента $l = 0$: $|x\rangle \approx j_0(r\sqrt{2x})$, j_0 – сферическая функция Бесселя. Следует ожидать, что учет слагаемых с $l \geq 2$ приведет к угловой анизотропии рассеянного фотона. Такой учет является предметом будущих исследований. Амплитуды вероятности рассеяния, нарушающие принцип причинности на виртуальном уровне, не учтены в силу принятого нами приближения Тамма–Данкова [7, 8]. В этом приближении в нашем случае учитываются лишь диаграммы Фейнмана с числом фотонов, электронов и вакансий в рассечениях, не превышающим фиксированного значения $N = 2$ (рис. 1). Вклад состояний $1s \to np$ и $2p_j \to m(s, d)$ возбуждения $(n, m \geq 3)$ в энергетических масштабах эмиссионных структур на рис. 2, 3 сосредоточен в узкой допороговой области рассеяния (например, $I_{1s} - I_{1snp} \leq 6$ эВ, I_{1snp} – энергия $1s \to np$

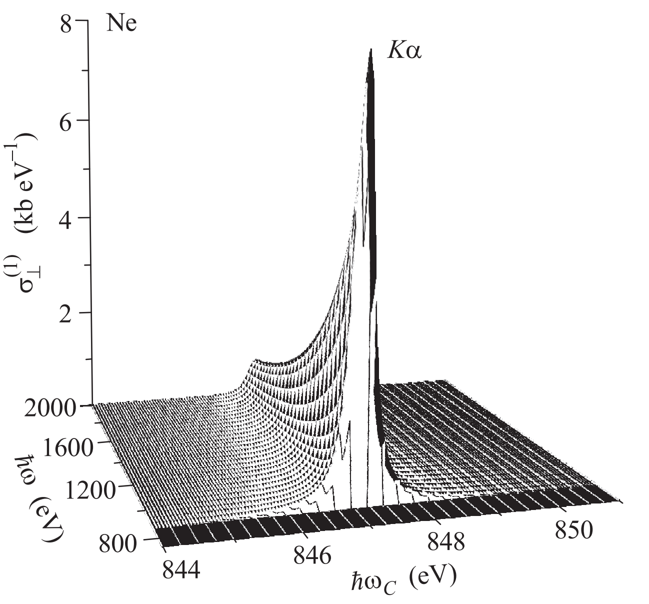

Рис. 2. Дифференциальное сечение процесса резонансного комптоновского рассеяния фотона атомом Ne в области $\hbar\omega \in (I_{1s}; 2)$ кэВ с учетом парциальных амплитуд вероятности рассеяния на рис. 1a, b и их интерференции. $I_{1s} = 870.210$ эВ, $\Gamma_{1s} = 0.271$ эВ, $\delta_{\rm SO} = 0.124$ эВ

фотовозбуждения) и в данном Письме не учитывался. Тогда методами алгебры операторов рождения (уничтожения) фотонов [9], теории неприводимых тензорных операторов [10] и теории неортогональных орбиталей [11] во втором (по α-постоянной тонкой структуры) порядке нерелятивистской квантовой теории возмущений, в приближении нулевой ширины распада $2p_j$-вакансии ($\Gamma_{2p_j} \to 0$) и дипольном приближении для оператора радиационного перехода для дифференциального сечения процесса (1) получаем:

$$\frac{d\sigma_\perp}{d\omega_C} \equiv \sigma_\perp^{(1)} = \frac{4}{9}\pi r_0^2 \frac{\omega_C}{\omega} \sum_j \eta_j M_j, \qquad (3)$$

$$M_j = \frac{\alpha_j\left(\frac{4}{3}\alpha_j + \gamma_{1s} A_j \Delta_j\right)}{[(\omega_C - \omega_j)^2 + \gamma_{1s}^2]} + B_j \Delta_j^2, \qquad (4)$$

$$\alpha_j = 0.82\langle 1s_0|r|2p_+\rangle\langle 1s_0|r| \in_j p\rangle \times$$
$$\times\, \omega_j(\varepsilon_j + I_{1s}), \qquad (5)$$

$$A_j = 3.90 s_j + 1.91 d_j, \qquad (6)$$

$$B_j = 2.96 s_j^2 + 2.25 s_j d_j + 1.29 d_j^2, \qquad (7)$$

$$\Delta_j = \varepsilon_j\left(\frac{\omega}{\omega_C} - 1\right). \qquad (8)$$

В (3)–(8) определено: символ “$\perp$” соответствует выбору схемы предполагаемого эксперимента – векторы поляризации (линейно поляризованных) падающего и рассеянного фотонов перпендикулярны плоскости рассеяния, проходящей через волновые векторы этих фотонов, r_0 – классический радиус электрона, $\eta_j = 2$ ($j = 3/2$), 1 ($j = 1/2$), $\gamma_{1s} = \Gamma_{1s}/2$, Γ_{1s} – естественная (полная) ширина распада $1s$-вакансии, энергии резонансов эмиссии $\omega_j = I_{1s} - I_{2p_j}$, I_{2p_j} – энергия порога ионизации $2p_j$-оболочки, $s_j = \langle p_0|r|\varepsilon_j s\rangle$, $d_j = \langle 2p_0|r|\varepsilon_j d\rangle$ и $\varepsilon_j = \omega - \omega_C - I_{2p_j}$. В одноэлектронной амплитуде вероятности рождения $1s$-вакансии из (5) структура корреляционной функции

$$| \in_j p\rangle = N_{1s}\left(|\varepsilon_j p_+\rangle - |2p_+\rangle \frac{\langle 2p_0|\varepsilon_j p_+\rangle}{\langle 2p_0|2p_+\rangle}\right), \qquad (9)$$

$$N_{1s} = \langle 1s_0|1s_+\rangle\langle 2s_0|2s_+\rangle^2\langle 2p_0|2p_+\rangle^6, \qquad (10)$$

учитывает эффект радиальной релаксации состояний рассеяния в поле $1s$-вакансии. Индексы “0” и “+” определены для радиальных частей волновых функций электронов, полученных решением уравнений Хартри–Фока для конфигураций начального состояния атома ([0]) и однократного иона ($1s_+$), соответственно. Радиальные части волновых функций электронов сплошного спектра в матричных элементах s_j и d_j получены в хартри-фоковском поле $2p$-вакансии.

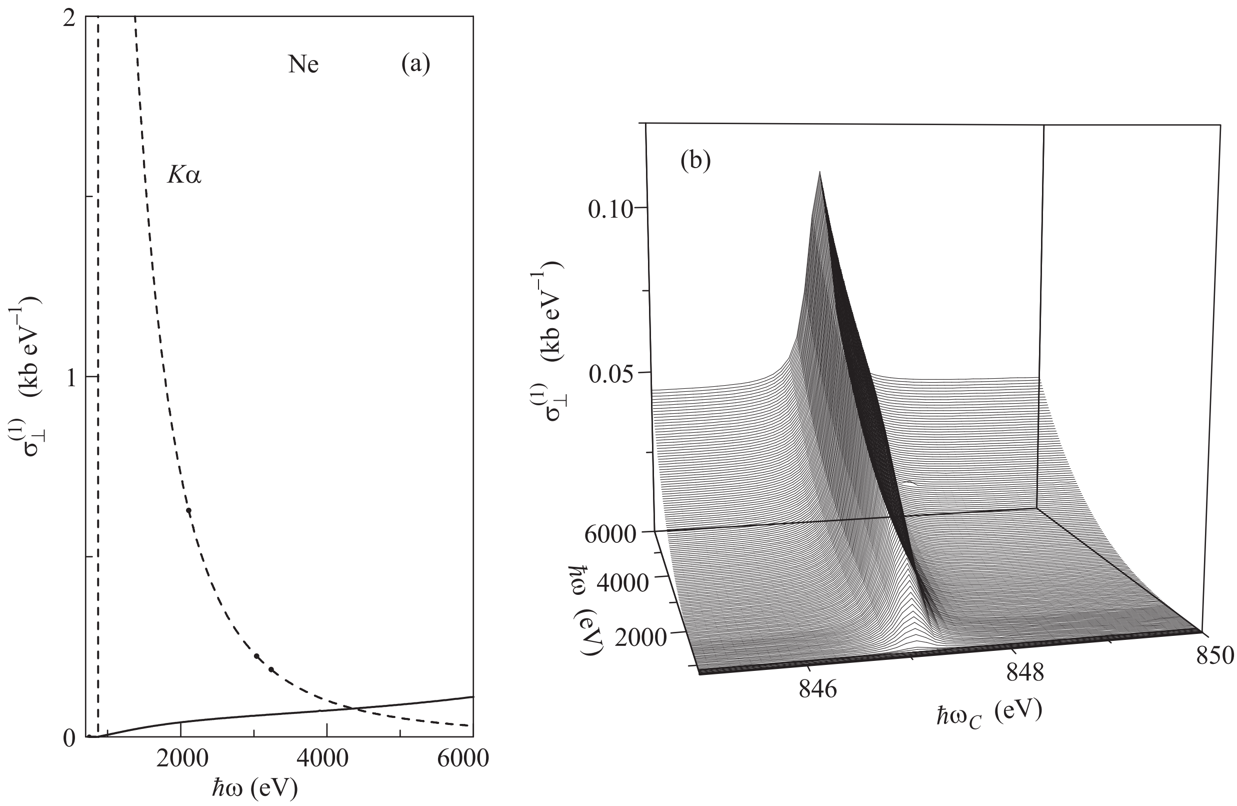

Рис. 3. Дифференциальное сечение процесса резонансного комптоновского рассеяния фотона атомом Ne в области $\hbar\omega \in (I_{1s};\, 6)$ кэВ: (a) – $\hbar\omega_C = 847.1$ эВ (резонанс $K\alpha$-эмиссии), штриховая кривая – учтена лишь диаграмма рис. 1a, сплошная кривая – учтена лишь диаграмма рис. 1b и ее интерференция с диаграммой рис. 1a; (b) – эволюция сплошной кривой на рис. 3a для $\hbar\omega_C \in (845;\, 850)$ эВ. I_{1s}, Γ_{1s}, δ_{SO} – см. рис. 2

Одноэлектронная амплитуда вероятности тормозного излучения (рис. 1b) получена в форме скорости в приближении плоских волн для волновых функций $x(s,d)$- и εp-электронов сплошного спектра [12]:

$$(s-\varepsilon)\langle xl|r|\varepsilon p\rangle \cong 2ix\cdot\delta(x-\varepsilon), \quad l = s, d, \qquad (11)$$

где δ – дельта-функция Дирака. Для интеграла перекрывания двух сплошных спектров на рис. 1a принято приближение $\langle xp_+|\varepsilon p\rangle \cong \delta(x-\varepsilon)$. Как и следовало ожидать, факт возникновения множителя Δ_j из (8) в многоэлектронной амплитуде вероятности тормозного излучения воспроизводит упомянутую выше "инфракрасную расходимость" [1, 2, 9]:

$$\lim_{\omega_C\to 0} \sigma_\perp^{(1)} = \infty. \qquad (12)$$

3. Результаты и обсуждение. Результаты расчета представлены на рис. 2, 3. Для параметров сечения рассеяния (3) приняты значения (в эВ) $I_{1s} = 870.210$ [13], $\Gamma_{1s} = 0.271$ [14] и $I_{2p_j} = 23.207$ ($j = 1/2$), 23.083 ($j = 3/2$) [15]. В силу малости константы спин-орбитального расщепления $2p_j$-оболочки ($\delta_{SO} = \omega_{3/2} - \omega_{1/2} < \Gamma_{1s}$) резонансные $K\alpha_1$- и $K\alpha_2$-структуры спектра эмиссии практически не "разрешены".

Результаты на рис. 2, 3 показывают следующее. При увеличении энергии падающего фотона от $\omega \geq I_{1s}$ (рис. 2) до $\omega \gg I_{1s}$ (рис. 3) основной вклад в сечение рассеяния (3) дает амплитуда вероятности тормозного излучения ($\sim \sqrt{B_j\Delta_j^2}$, континуум на рис. 3b). "Ребристая" структура на фоне континуума при $\omega_C \cong 847.1$ эВ обусловлена резонансной интерференцией амплитуд вероятности тормозного излучения ($\sim A_j\Delta_j$) и эмиссии ($\sim \alpha_j$, штриховая кривая на рис. 3a). При этом практическое исчезновение вклада амплитуды вероятности эмиссии обусловлено сильным подавлением амплитуды вероятности рождения глубокой $1s$-вакансии в α_j из (5).

4. Заключение. Теоретически исследовано дифференциальное сечение резонансного комптоновского рассеяния рентгеновского фотона многоэлектронным атомом. Установлена лидирующая роль эффекта тормозного излучения в формировании не только области "инфракрасной расходимости" (12), но и структуры $K\alpha$-спектра эмиссии в жестком ($\omega \gg I_{1s}$)

диапазоне энергий падающего на атом фотона. Этот результат носит предсказательный характер и, возможно (предмет будущих исследований), допускает обобщение, в частности, на неоноподобные атомные ионы, играющие важную роль в современной астрофизике (см., например, [16, 17]). Наконец, отметим следующее. Уже для $\omega \cong 6$ кэВ (рис. 3) дипольное приближение при расчете амплитуды вероятности $2p \rightarrow x(s, d)$ фотоионизации атома Ne становится некорректным: величина параметра $\zeta = \lambda / r_{2p} = 4$ (λ – длина волны падающего фотона, r_{2p} – средний радиус $2p$-оболочки) нарушает критерий применимости дипольного приближения $\zeta \gg 1$. Однако при $\omega \gg \omega_C \cong \omega_j$ сечение рассеяния определяется практически лишь вероятностью тормозного излучения: $\sigma_{\perp}^{(1)} \sim \omega^3 \cdot B_j$. Как результат, модификация B_j-функции при учете недипольных и многочастичных эффектов [18–20] не изменит утверждения о лидирующей роли эффекта тормозного излучения при $\omega \gg I_{1s}$.

1. T. Åberg and J. Tulkki, in *Atomic Inner-Shell Physics*, ed. by B. Crasemann, Plenum, N.Y. (1985), ch. 10, p. 419.
2. P. P. Kane, Phys. Rep. **218**, 67 (1992).
3. M. A. MacDonald, S. H. Southworth, J. C. Levin, A. Henins, R. D. Deslattes, T. Lebrun, Y. Azuma, P. L. Cowan, and B. A. Karlin, Phys. Rev. A **51**, 3598 (1995).
4. M. Žitnik, M. Kavčič, K. Bučar, A. Mihelič, M. Štuhec, and J. Kokalj, Phys. Rev. A **76**, 032506 (2007).
5. R. Obaid, Ch. Buth, G. L. Dacovski, R. Beerwerth, M. Holmes, J. Aldrich, M.-F. Lin, M. Minitti, T. Osipov, W. Schlotter, L. S. Cederbaum, S. Fritzsche, and N. Berrah, J. Phys. B **51**, 034003 (2018).
6. A. C. Brinkman, E. Behar, M. Gudel et al. (Collaboration), Astron. Astrophys. **365**, L324 (2001).
7. Ig. Tamm, J. Phys. (USSR) **9**, 449 (1945).
8. S. M. Dancoff, Phys. Rev. **78**, 382 (1950).
9. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, М. (1969).
10. А. П. Юцис, А. Ю. Савукинас, *Математические основы теории атома*, Минтис, Вильнюс (1973).
11. A. P. Jucys, E. P. Našlěnas, and P. S. Žvirblis, Int. J. Quant. Chem. **6**, 465 (1972).
12. A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, and S. A. Novikov, Phys. Rev. A **98**, 063424 (2018).
13. L. Pettersson, J. Nordgren, L. Selander, C. Nordling, and K. Siegban, J. Electr. Spectr. Rel. Phenom. **27**, 29 (1982).
14. M. Coreno, L. Avaldi, R. Camilloni, K. C. Prince, M. de Simone, J. Karvonen, R. Colle, and S. Simonucci, Phys. Rev. A **59**, 2494 (1999).
15. N. Nrisimhamurty, G. Aravind, P. C. Deshmukh, and S. T. Manson, Phys. Rev. A **91**, 013404 (2015).
16. E. Träbert, P. Beiersdorfer, J. K. Lepson, M. L. Reinke, and J. E. Rice, Astrophys. J. **865**, 148 (2018).
17. J. Deprince, M. A. Bautista, S. Fritzsche, A. J. Garcia, T. Kallman, C. Mendoza, P. Palmeri, and P. Quinet, Astron. Astrophys. **626**, A83 (2019).
18. M. Ya. Amusia and N. A. Cherepkov, Case Stud. Atom. Phys. **5**, 47 (1975).
19. J. W. Cooper, Phys. Rev. A **47**, 1841 (1993).
20. W. R. Johnson, A. Derevianko, K. T. Cheng, V. K. Dolmatov, and S. T. Manson, Phys. Rev. A **59**, 3609 (1999).