

# Тормозное излучение при нерезонансном неупругом рассеянии фотона атомным ионом

А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский<sup>1)</sup>

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

Поступила в редакцию 26 февраля 2022 г.

После переработки 20 марта 2022 г.

Принята к публикации 21 марта 2022 г.

Теоретически предсказаны аналитическая структура, абсолютные значения и угловая анизотропия дважды дифференциального сечения тормозного излучения при нерезонансном неупругом рассеянии рентгеновского фотона многозарядным гелиоподобным атомным ионом.

DOI: 10.31857/S1234567822080110

**1. Введение.** В рамках квантовой теории, начиная с работ Зоммерфельда, Бете и Гайтлера [1, 2] и до настоящего времени, продолжают исследования (см., например, монографии [3, 4] и обзоры [5, 6]) фундаментального в микромире эффекта тормозного излучения при рассеянии свободного электрона в электрическом поле атома (атомного ядра). Наряду с этим эффектом, фундаментальный интерес (например, для физики лабораторной [7] и астрофизической [8] плазмы) представляют эффекты тормозного излучения, инициированные неупругим рассеянием фотона атомом (атомным ионом). В этом случае амплитуды вероятности тормозного излучения [например, излучение фотона электроном сплошного спектра (рис. 1b) [4–6] и поляризация атома (атомного иона) электроном сплошного спектра с последующим излучением фотона (рис. 1d) [3]] возникают как подструктуры полных амплитуд вероятности рассеяния. Первое такое исследование проведено в работах авторов [9, 10] для процесса однократного резонансного неупругого рассеяния [11–13] фотона многоэлектронным атомом. В данном Письме мы проводим первое теоретическое исследование эффекта тормозного излучения, инициированного однократным нерезонансным неупругим рассеянием [14–16] фотона многозарядным атомным ионом. Такие исследования необходимы, в частности, для интерпретации фоновых (континуальных) структур спектров рентгеновской эмиссии многозарядных атомных ионов горячей плазмы. В качестве объекта исследования взят гелиоподобный ион атома кремния ( $\text{Si}^{12+}$ ; заряд ядра иона  $Z = 14$ ; конфигурация и терм основного состояния  $[0] = 1s^2[{}^1S_0]$ ). Выбор обусловлен сфери-

ческой симметрией основного состояния иона  $\text{Si}^{12+}$  и его предполагаемой доступностью в газовой фазе для проведения высокоточных экспериментов. В частности, таким экспериментом может быть комбинирование методов генерации многозарядных ионов и их захвата в “ловушке” с последующим рассеянием излучения рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL; см., например, [17] и обзор [18]).

**2. Теория.** Рассмотрим процессы нерезонансного неупругого рассеяния фотона электронами гелиоподобного атомного иона:

$$\omega + [0] \rightarrow 1s\varepsilon l({}^1L_J) + \omega_C, \quad (1)$$

$$\omega + [0] \rightarrow 1sxp({}^1P_1) \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} K_s \\ K_d \end{array} \right\} + \omega_C, \quad (2)$$

$$K_s = 1s\varepsilon s({}^1S_0), \quad K_d = 1s\varepsilon d({}^1D_2). \quad (3)$$

В (1), (2) и далее принята атомная система единиц ( $e = \hbar = m_e = 1$ ),  $l \geq 0$ ,  $J = L$ ,  $\omega$  ( $\omega_C$ ) – энергия падающего (рассеянного) фотона,  $x(\varepsilon)$  – энергия электрона сплошного спектра промежуточного (конечного) состояния рассеяния,  $x \in [0; \infty)$ ,  $\varepsilon = \omega - I_{1s} - \omega_C$  и  $I_{1s}$  – энергия порога ионизации  $1s^2$ -оболочки иона. Рассеянию по каналу (1) соответствует нерезонансное комптоновское рассеяние (рис. 1a) по оператору контактного взаимодействия:

$$\hat{Q} = \frac{1}{2c^2} \sum_{n=1}^N (\hat{A}_n \cdot \hat{A}_n). \quad (4)$$

Рассеянию по каналам (2) соответствует инициированное тормозное излучение (рис. 1b) по оператору радиационного перехода:

$$\hat{R} = -\frac{1}{c} \sum_{n=1}^N (\hat{p}_n \cdot \hat{A}_n), \quad (5)$$

<sup>1)</sup>e-mail: amnrnd@mail.ru

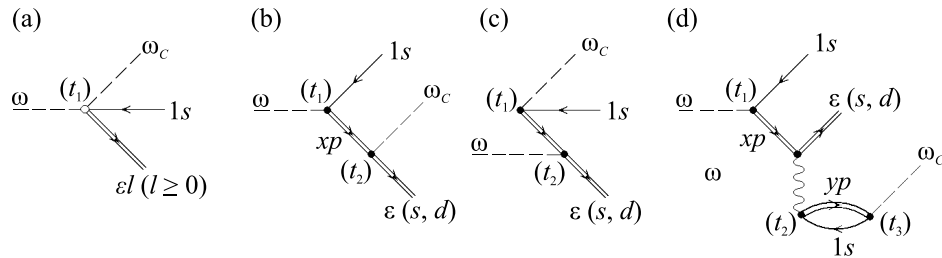


Рис. 1. Амплитуды вероятности нерезонансного неупругого рассеяния фотона гелиоподобным атомным ионом ( $\text{Si}^{12+}$ ) в представлении диаграмм Фейнмана: (а) – нерезонансное комптоновское рассеяние; (б) – тормозное излучение; (с) – рассеяние “по-времени-назад”; (д) – поляризационное тормозное излучение. Стрелка вправо – электрон, стрелка влево – вакансия. Двойная линия – состояние получено в Хартри-Фоковском поле  $1s$ -вакансии. Волнистая линия – электростатическое взаимодействие. Черный (светлый) кружок – вершина взаимодействия по оператору радиационного (контактного) перехода.  $\omega$  ( $\omega_C$ ) – падающий (рассеянный) фотон. Направление времени – слева направо ( $t_1 < t_2 < t_3$ )

где  $\hat{A}_n$  – оператор электромагнитного поля в представлении вторичного квантования,  $\hat{p}_n$  – оператор импульса  $n$ -электрона иона,  $c$  – скорость света в вакууме и  $N$  – число электронов в ионе. В данном Письме при построении амплитуд вероятности рассеяния принято приближение Тамма–Данкова [19] с ограничением на число “частиц” (фотонов, электронов, вакансий) в рассеяниях диаграмм Фейнмана максимальным значением  $N_0 = 2$ . Например, амплитуда вероятности поляризационного тормозного излучения (рис. 1d) с  $N_0 = 5$  отброшена. Амплитуда вероятности спонтанного рождения “частиц” до момента поглощения падающего фотона (рис. 1с с  $N_0 = 4$ ) в приближении Тамма–Данкова игнорируется. Заметим, что проблема аналитического обоснования приближения Тамма–Данкова и границ его применимости остается открытой (см., например, [20] и ссылки там). Однако в нашем случае учет диаграмм Фейнмана лишь с  $N_0 \leq 2$  в приближении Тамма–Данкова соответствует методу квантовомеханической теории возмущений. Именно отбрасывание, например, диаграмм Фейнмана на рис. 1d формально математически обусловлено более высоким порядком малости этой диаграммы по сравнению с диаграммой на рис. 1b. Конечно, можно предположить, что учет резонансного рождения виртуальных электрона и вакансии в момент времени  $t_2 < t_3$  (рис. 1d) даст описание физически значимого эффекта резонансного поляризационного тормозного излучения.

Установим аналитические структуры дважды дифференциальных сечений рассеяния по каналам (1) и (2), используя методы алгебры операторов рождения (уничтожения) фотонов, теории неприводимых тензорных операторов, теории неортогональных орбиталей (см., например, [20] и ссылки там) и приближение нулевой естественной ширины распада  $1s$ -вакансии. Для сечения нерезонансного

комптоновского рассеяния (CS; рис. 1a, 2b) вне рамок дипольного приближения для  $\hat{Q}$ -оператора получаем [15]:

$$\frac{d^2 \sigma_{CS}}{d\omega_C d\Omega_C} \equiv \sigma_{CS}^{(2)} = r_0^2 \frac{\omega_C}{\omega} \eta \mu C, \quad (6)$$

$$C = \sum_{l=0}^{\infty} (4l+2) \langle 1s_0 | \hat{j}_l(qr) | \varepsilon l_+ \rangle^2, \quad (7)$$

где  $\Omega_C$  – пространственный угол вылета рассеянного фотона,  $r_0$  – классический радиус электрона,  $\eta = \langle 1s_0 | 1s_+ \rangle^2 / (27.21)$ ,  $\hat{j}_l$  – сферическая функция Бесселя первого рода  $l$ -порядка,  $q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_C|$  и  $\mathbf{k}$  ( $\mathbf{k}_C$ ) – волновой вектор падающего (рассеянного) фотона. Индексы “0” и “+” соответствуют радиальным частям волновых функций электронов, полученных решением уравнений Хартри–Фока для конфигураций начального ( $[0]$ ) и конечного ( $[1s_+]$ ) состояний иона. Как показал расчет, для иона  $\text{Si}^{12+}$  сумма в (7) практически ограничена лишь слагаемым с  $l = 1$ , тогда как вклад состояний с  $l \neq 1$  исчезающе мал. Как результат, квантовая интерференция каналов (1) и (2) отсутствует. Аксиально-симметричный (относительно вектора  $\mathbf{k}$ ) параметр  $\mu$  в (6) определяет (наряду с параметром  $q$  в  $\hat{j}_l$ -функции Бесселя) эффект угловой анизотропии нерезонансного комптоновского рассеяния. Он конкретизирован в соответствии с тремя схемами предполагаемого эксперимента. Первая схема – векторы поляризации фотонов перпендикулярны плоскости рассеяния ( $\mathbf{e}, \mathbf{e}_C \perp P$ ). Вторая схема – векторы поляризации фотонов параллельны плоскости рассеяния ( $\mathbf{e}, \mathbf{e}_C \parallel P$ ). Третья схема – схема с неполяризованными (NP) фотонами. Здесь  $P$  – плоскость рассеяния, проходящая через векторы  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}_C$ . Как результат, имеем:

$$\mu^\perp = 1, \quad (8)$$

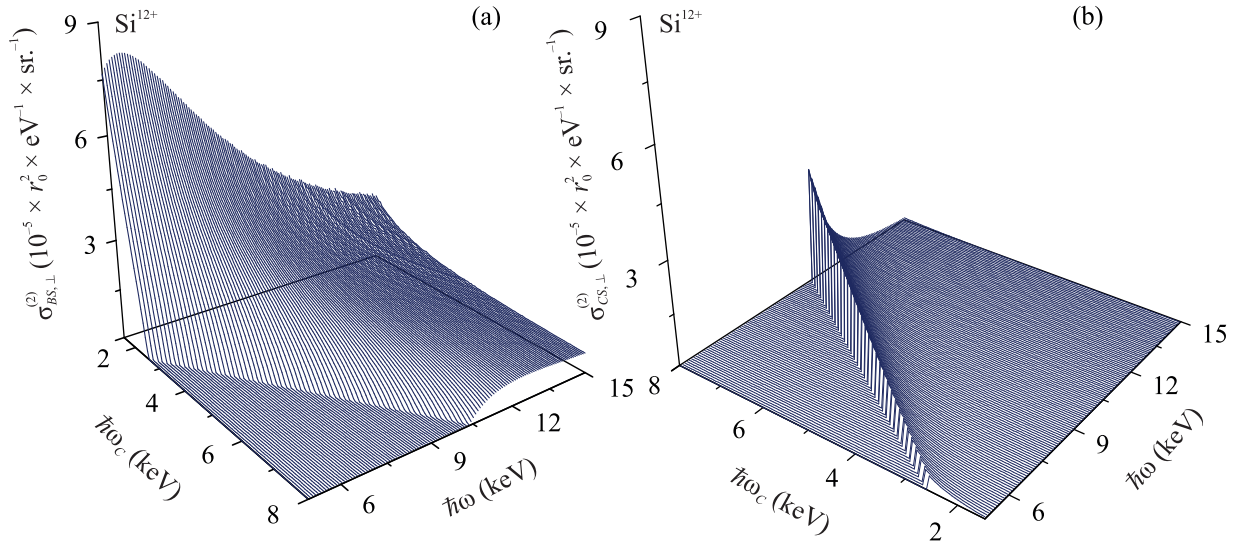


Рис. 2. (Цветной онлайн) Дважды дифференциальное сечение нерезонансного неупругого рассеяния фотона ионом  $\text{Si}^{12+}$  для  $\perp$ -схемы эксперимента: (a) – сечение тормозного излучения ( $\rho^\perp = 1$ ); (b) – сечение нерезонансного комптоновского рассеяния ( $\mu^\perp = 1$ ). Угол рассеяния  $\theta = 90^\circ$ .  $\hbar\omega$  ( $\hbar\omega_C$ ) – энергия падающего (рассеянного) фотона

$$\mu^\parallel = \cos^2 \theta, \quad (9)$$

$$\mu_{NP} = \frac{1}{2}(\mu^\perp + \mu^\parallel), \quad (10)$$

где  $\theta$  – угол рассеяния (угол между векторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}_C$ ). Для сечения тормозного излучения (BS; рис. 1b, рис. 2a) в дипольном приближении для  $\hat{R}$ -оператора получаем:

$$\sigma_{BS}^{(2)} = r_0^2 \frac{\omega_C}{\omega} \eta \rho B, \quad (11)$$

$$B = \frac{4}{5} \varepsilon \left(1 - \frac{\omega}{\omega_C}\right)^2 \langle 1s_0 | \hat{r} | \varepsilon p_+ \rangle^2, \quad (12)$$

где параметр  $\rho$  определяет эффект угловой анизотропии тормозного излучения и имеет вид:

$$\rho^\perp = 1, \quad (13)$$

$$\rho^\parallel = \frac{1}{3}(1 + 2 \cos^2 \theta), \quad (14)$$

$$\rho_{NP} = \frac{1}{2}(\rho^\perp + \rho^\parallel). \quad (15)$$

Сингулярная одноэлектронная амплитуда вероятности тормозного излучения получена в форме скорости в приближении плоских волн для радиальных частей волновых функций электронов сплошного спектра:  $|x\rangle \cong \left(\frac{2}{\pi^2 x}\right)^{1/4} \sin(r\sqrt{2x})$  и, как результат,

$$(x - \varepsilon) \langle x p_+ | \hat{r} | \varepsilon(s, d)_+ \rangle \cong i\sqrt{2x} \delta(x - \varepsilon), \quad (16)$$

где  $\delta$  – дельта-функция Дирака. Аналитическая структура сечения (11) качественно воспроизводит

следующие известные результаты. Первый. В приближении нулевой естественной ширины распада  $1s$ -вакансии для нулевой энергии рассеянного фотона возникает “инфракрасная расходимость” сечения тормозного излучения [11, 12]:

$$\lim_{\omega_C \rightarrow 0} \sigma_{BS}^{(2)} = \infty. \quad (17)$$

Второй. При нулевой энергии электрона сплошного спектра конечного состояния рассеяния имеем [рис. 2a; прямая  $\omega_C = \omega - I_{1s}$  на плоскости  $(\omega; \omega_C)$ ]:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sigma_{BS}^{(2)} = 0. \quad (18)$$

Равенство (18) соответствует результату борновского приближения для нерелятивистского дифференциального сечения тормозного излучения электроном в кулоновском поле ядра [21, 22]:

$$\frac{d\sigma}{d\omega_C} \sim \ln \left( \frac{v_1 + v_2}{v_2 - v_1} \right) \rightarrow 0 \quad (19)$$

при  $v_2 \rightarrow 0$ , где  $v_1(v_2)$  – скорость налетающего (уходящего) электрона. Как и следовало ожидать, наряду с (17) и (18), сечение (11) удовлетворяет асимптотическому условию: при  $\omega \rightarrow \infty$  одноэлектронная амплитуда вероятности перехода  $\langle 1s_0 | r | \varepsilon p_+ \rangle \sim \omega^{-7/4}$  и, как результат,

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \sigma_{BS}^{(2)} = 0. \quad (20)$$

**3. Результаты и обсуждение.** Результаты расчета представлены на рис. 2, 3. Для энергии порога

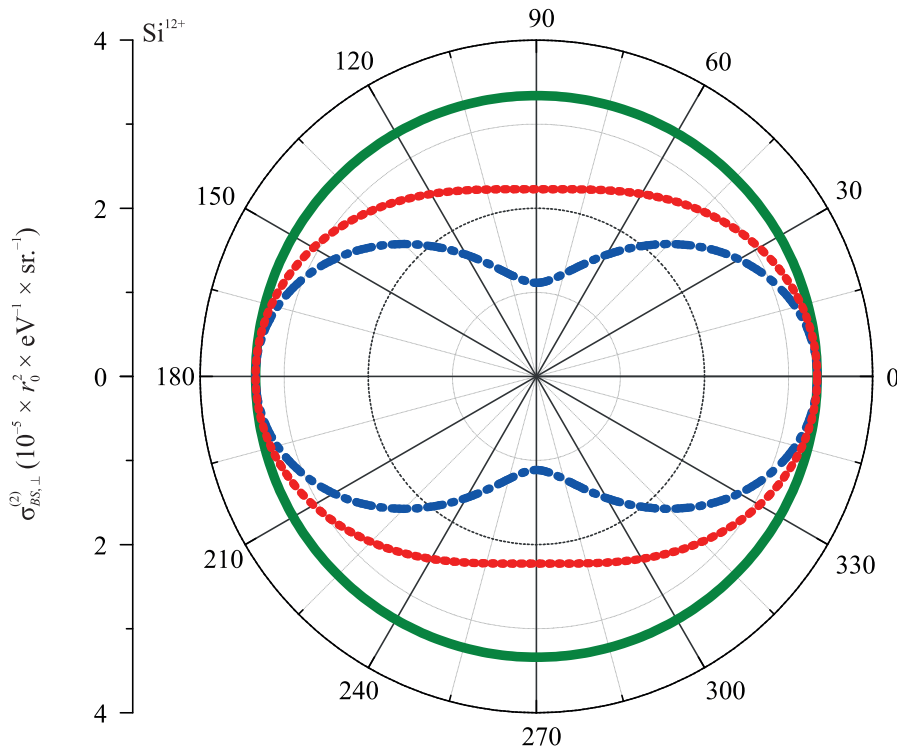


Рис. 3. (Цветной онлайн) Индикатриса тормозного излучения для иона  $\text{Si}^{12+}$  с полярным радиусом  $\sigma_{BS}^{(2)}$  и полярным углом  $\theta$  при фиксированных значениях энергий падающего ( $\hbar\omega = 6.70$  кэВ) и рассеянного ( $\hbar\omega_C = 2.88$  кэВ) фотонов. Схема эксперимента:  $\perp$  (сплошная кривая),  $\parallel$  (штрих-пунктирная кривая), неполяризованные фотоны (пунктирная кривая)

ионизации  $1s^2$ -оболочки иона  $\text{Si}^{12+}$  принято значение  $I_{1s} = 2437.650$  эВ [23]. Для энергий падающего фотона рассмотрен диапазон  $\omega \in (4.5; 15.0)$  кэВ. В этом диапазоне при расчете сечения тормозного излучения выполнен критерий применимости дипольного приближения для  $\hat{R}$ -оператора:  $\lambda_\omega / \langle r_{1s} \rangle \gg \gg 1$  при, например, длине волны падающего фотона  $\lambda_\omega = 1.852 \text{ \AA}$  ( $\omega = 6.70$  кэВ; энергия  $K\alpha$ -линии эмиссии  $\text{Fe}^{24+}$  [24]) и среднем радиусе  $1s$ -оболочки иона  $\text{Si}^{12+}$   $\langle r_{1s} \rangle = 0.058 \text{ \AA}$ .

Результаты на рис. 2а демонстрируют тенденцию сечения тормозного излучения к “инфракрасной расходимости” (17), выполнению асимптотического условия (20) и его лидирующую роль в ближней запороговой области ( $I_{1s} < \omega < 15$  кэВ) полного сечения рассеяния. При  $\omega \geq 15$  кэВ лидирующим становится сечение нерезонансного комптоновского рассеяния (рис. 2б). Заметим, однако, что в  $\parallel$ -схеме эксперимента для угла рассеяния  $\theta = 90^\circ$  сечение нерезонансного комптоновского рассеяния обращается в нуль ( $\mu^\parallel = 0 \Rightarrow \sigma_{CS}^{(2)} = 0$ ) и полное сечение рассеяния определено лишь эффектом тормозного излучения ( $\rho^\parallel = 1/3$ ). Результаты на рис. 3 демонстрируют эффект угловой анизотропии (преимущественное рас-

сеяние в направлении углов  $\theta = 0^\circ, 180^\circ$ ) тормозного излучения для  $\parallel$ -схемы эксперимента и эксперимента с неполяризованными фотонами. Этот результат качественно воспроизводит таковой работы [10] для случая резонансного неупругого рассеяния фотона многоэлектронным атомом. Отметим, что  $K_s$ - и  $K_d$ -состояния рассеяния в (3) дают сравнимые вклады в полное сечение рассеяния. При этом, игнорирование  $K_d$ -состояния приводит к обращению в нуль сечения тормозного излучения при угле рассеяния  $\theta = 90^\circ$  для  $\parallel$ -схемы эксперимента.

**4. Заключение.** Теоретически исследовано дважды дифференциальное сечение нерезонансного неупругого рассеяния рентгеновского фотона многозарядным гелиоподобным атомным ионом. Установлены (а) лидирующая роль эффекта тормозного излучения в ближней запороговой области рассеяния и (б) ярко выраженный эффект угловой анизотропии тормозного излучения в соответствующих схемах предполагаемого эксперимента. Полученные результаты носят предсказательный характер. Их возможное обобщение, например, на многозарядные ионы другого типа и многоэлектронные атомы, переход к следующим порядкам

приближения Тамма–Данкова, а также учет ненулевой ширины спектрального разрешения XFEL-эксперимента ( $\Gamma_{\text{beam}} \cong 0.15\text{--}0.50\text{ эВ}$  [25]) являются предметом будущих исследований.

1. A. Sommerfeld, *Ann. Phys.* **11**, 257 (1931).
2. H. A. Bethe and W. Heitler, *Proc. R. Soc. (London) Ser. A* **146**, 83 (1934).
3. М. Я. Амуся, *Тормозное излучение*, Энергоатомиздат, М. (1990).
4. E. Haug and W. Nakel, *The Elementary Process of Bremsstrahlung*, World Scientific, Singapore (2004).
5. П. А. Крачков, Р. Н. Ли, А. И. Мильштейн, *УФН* **186**, 689 (2016).
6. D. H. Jakubassa-Amundsen, arXiv: 2103. 06034 [physics. atom-ph].
7. P. Beiersdorfer, *J. Phys. B* **48**, 144017 (2015).
8. S. Zhekov, M. Gagné, and S. L. Skinner, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **510**, 1278 (2022).
9. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, И. Д. Петров, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 61 (2020).
10. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, И. Д. Петров, Р. В. Конеев, *ЖЭТФ* **158**, 1032 (2020).
11. T. Åberg and J. Tulkki, in *Atomic Inner-Shell Physics*, ed. by B. Crasemann, Plenum, N.Y. (1985), ch. 10, p. 419.
12. P. P. Kane, *Phys. Rep.* **218**, 67 (1992).
13. J. Szlachetko, J.-Cl. Dousse, M. Berset, K. Fennane, M. Szlachetko, J. Hoszowska, R. Barrett, M. Pajek, and A. Kubala-Kukus, *Phys. Rev. A* **75**, 022512 (2007).
14. L. A. LaJohn, *Phys. Rev. A* **81**, 043404 (2010).
15. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, *ЖЭТФ* **142**, 453 (2012).
16. Ch.-K. Qiao, J.-W. Wei, and L. Chen, arXiv: 2103. 04634 [cond-mat. other].
17. S. W. Epp, J. R. C. López-Urrutia, G. Brenner, V. Mackel, P. H. Mokler, R. Treusch, M. Kuhlmann, M. V. Yurkov, J. Feldhaus, J. R. Schneider, M. Welhofer, M. Martins, W. Wurt, and J. Ulrich, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 183001 (2007).
18. P. Indelicato, *J. Phys. B* **52**, 232001 (2019).
19. A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, N.Y. (1971).
20. A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, and S. A. Novikov, *Phys. Rev. A* **98**, 063424 (2018).
21. H. W. Koch and J. W. Motz, *Rev. Mod. Phys.* **31**, 920 (1959).
22. V. B. Berestetskii, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Quantum Electrodynamics*, Butterworth-Heinemann, Oxford (2008).
23. W. C. Martin and R. Zalubas, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **12**, 323 (1983).
24. A. V. Malyshev, Y. S. Kozhedub, D. A. Glazov, I. I. Tupitsyn, and V. M. Shabaev, *Phys. Rev. A* **99**, 010501 (R) (2019).
25. V. M. Kaganer, I. Petrov, and L. Samoylova, *Acta Crystallogr. A* **77**, 1 (2021).