

01

Двойное комптоновское рассеяние фотона атомным ионом

© А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский[✉]

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

[✉]e-mail: amnrnd@mail.ru

Поступила в редакцию 17.01.2023 г.

В окончательной редакции 15.02.2023 г.

Принята к публикации 16.02.2023 г.

Теоретически предсказаны аналитическая структура, абсолютные значения и угловая анизотропия четырехжды дифференциальных сечений нелокального и локального двойного комптоновского рассеяния рентгеновского фотона многозарядным гелиеподобным атомным ионом.

Ключевые слова: двойное комптоновское рассеяние, рассеяние фотона атомным ионом, гелиеподобный неон.

DOI: 10.21883/OS.2023.04.55562.4538-22

Введение

Рассеяние фотона электроном с испусканием двух фотонов (двойное комптоновское рассеяние) — один из фундаментальных процессов в микромире. Его исследованию посвящено большое количество экспериментальных [1–5] и теоретических [6–10] работ. В настоящей работе мы проводим первое теоретическое исследование этого процесса при рассеянии фотона атомным ионом. В этом случае поглощаемый атомным ионом фотон рождает виртуальный электрон сплошного спектра энергий, и амплитуды вероятности двойного нелокального (излучение в разных пространственно-временных точках (рис. 1, *a*)) и локального (излучение в одной пространственно-временной точке (рис. 1, *b*)) комптоновского рассеяния возникают как подструктуры полной амплитуды вероятности рассеяния. Такие исследования широко востребованы, в частности, для интерпретации фоновых (континуальных) структур наблюдаемых спектров рентгеновской эмиссии многозарядных атомных ионов лабораторной и астрофизической плазмы [11,12]. В качестве объекта исследования взят гелиеподобный ион атома неона (Ne^{8+} , заряд ядра $Z = 10$, конфигурация и терм основного состояния $[0] = 1s^2[1S_0]$). Выбор обусловлен сферической симметрией основного состояния иона Ne^{8+} , его доступностью в газовой фазе при проведении высокоточных экспериментов, например, с рентгеновским лазером на свободных электронах [13] и ярко выраженным присутствием его (*r, i, f*)-триплета *K α* -линий в наблюдаемых спектрах рентгеновской эмиссии от горячих астрофизических объектов [14,15].

Теория метода

Рассмотрим процессы нерезонансного неупругого рассеяния фотона гелиеподобным атомным ионом:

$$\omega + [0] \rightarrow X \rightarrow \left\{ \begin{matrix} K_s \\ K_d \end{matrix} \right\} \rightarrow W, \quad (1)$$

$$X = 1sxp(^1P_1), \quad (2)$$

$$\left\{ \begin{matrix} K_s \\ K_d \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} 1sys(^1S_0) \\ 1syd(^1D_2) \end{matrix} \right\} + \omega_n, \quad n = 1, 2, \quad (3)$$

$$W = 1s\epsilon p(^1P_1) + \omega_1 + \omega_2, \quad (4)$$

$$\omega + [0] \rightarrow X \rightarrow W. \quad (5)$$

В (1), (3), (4), (5) и далее принята атомная система единиц ($e = \hbar = m_e = 1$), ω (ω_n) — энергия падающего (рассеянного) фотона, $x(\epsilon)$ — энергия электрона сплошного спектра промежуточного (конечного) состояния рассеяния, $x \in [0; \infty)$, $\epsilon = \omega - I_{1s} - \omega_1 - \omega_2$, I_{1s} — энергия порога ионизации оболочки $1s^2$. Рассеянию по каналу (1) соответствует нелокальное двойное комптоновское рассеяние (рис. 1, *a*) по оператору радиационного перехода:

$$\hat{R} = -\frac{1}{c} \sum_{n=1}^N (\hat{p}_n \hat{A}_n), \quad (6)$$

где \hat{p}_n — оператор импульса *n*-го электрона, \hat{A}_n — оператор электромагнитного поля в представлении вторичного квантования, c — скорость света в вакууме, N — число электронов в ионе. Рассеянию по каналу (5) соответствует локальное двойное комптоновское рассеяние (рис. 1, *b*) по оператору контактного взаимодействия:

$$\hat{Q} = \frac{1}{2c^2} \sum_{n=1}^N (\hat{A}_n \hat{A}_n). \quad (7)$$

При построении амплитуд вероятности рассеяния принят третий (по постоянной тонкой структуры) порядок квантово-механической теории возмущений. При этом амплитуды вероятности спонтанного рождения „частиц“ (фотонов, электронов, вакансий) до момента поглощения фотона (рис. 1, *c, d*) отброшены (приближение Тамма–Данкова [16]).

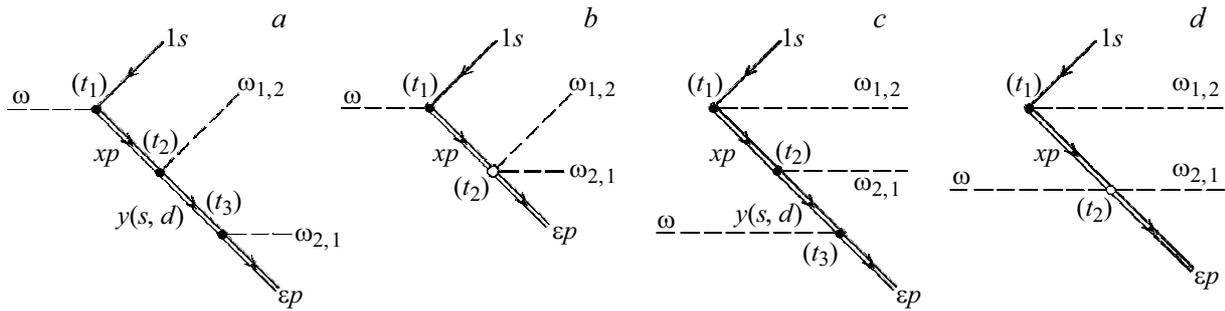


Рис. 1. Амплитуды вероятности неупругого рассеяния фотона гелиеподобным атомным ионом (Ne^{8+}) в представлении диаграмм Фейнмана: (a) нелокальное двойное комптоновское рассеяние, (b) локальное двойное комптоновское рассеяние, (c, d) рассеяние „по-времени-назад“. Стрелка вправо — электрон, стрелка влево — вакансия. Двойная линия — состояние получено в хартри-фокковском поле 1s-вакансии. Черный (светлый) кружок — вершина радиационного (контактного) перехода, $\omega(\omega_n)$ — падающий (рассеянный) фотон. Направление времени — слева направо ($t_1 < t_2 < t_3$).

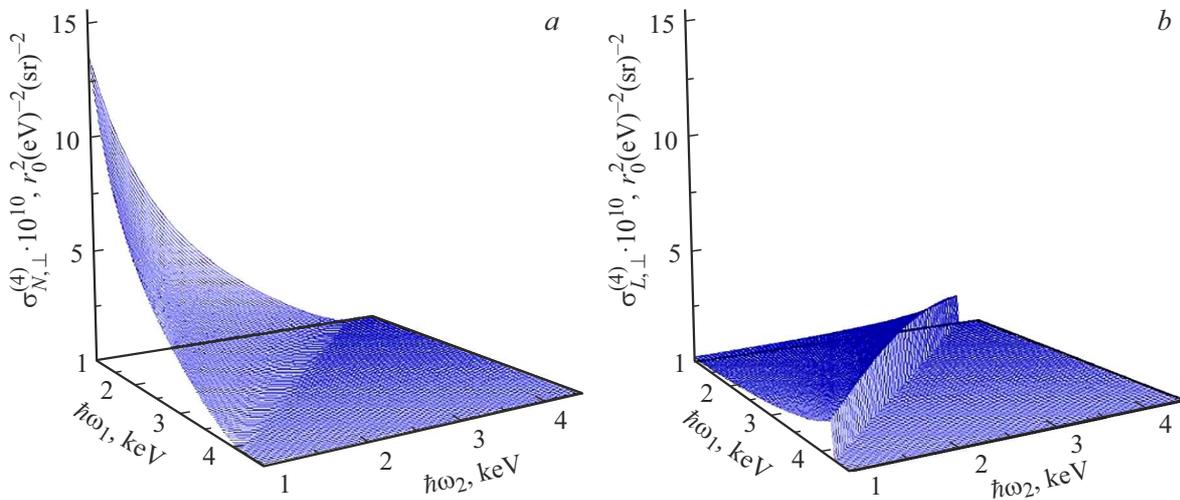


Рис. 2. Парциальные четырехжды дифференциальные сечения неупругого рассеяния фотона ионом Ne^{8+} для \perp -схемы эксперимента: сечение (a) нелокального ($\rho^\perp = 1$) и (b) локального ($\mu^\perp = 1$) двойного комптоновского рассеяния. Угол рассеяния $\theta = 90^\circ$. Энергия падающего фотона $\hbar\omega = 6.40 \text{ keV}$, $\hbar\omega_n$ — энергия рассеянного фотона ($n = 1, 2$).

Аналитические структуры четырехжды дифференциальных сечений рассеяния по каналам (1) и (5) получены методами алгебры операторов рождения (уничтожения) фотонов, теории неприводимых тензорных операторов и теории неортогональных орбиталей [17] в приближении нулевой естественной ширины распада 1s-вакансии. Для сечения нелокального двойного комптоновского рассеяния (NDCS, рис. 1, a, 2, a) в дипольном приближении для \hat{R} -оператора с учетом квантовой интерференции виртуальных состояний рассеяния K_s и K_d имеем

$$\frac{d^4\sigma_N}{d\omega_1 d\omega_2 d\Omega_1 d\Omega_2} \equiv \sigma_N^{(4)} = r_0^2 \frac{\omega_1 \omega_2}{\omega} \beta \rho N^2, \quad (8)$$

$$N = \frac{\sqrt{6}}{5} \frac{\varepsilon(\varepsilon + I_{1s})}{\omega_1 \omega_2} \langle 1s_+ | 1s_0 \rangle \langle 1s_0 | \hat{r} | \varepsilon p_+ \rangle, \quad (9)$$

где Ω_n — пространственный угол вылета рассеянного ω_n -фотона, r_0 — классический радиус электрона,

$\beta = \alpha r_0 \varepsilon_0 / (a_0 \pi^2)$, α — постоянная тонкой структуры, $\varepsilon_0 = 27.21$ и a_0 — радиус Бора. В (9) индексы „0“ и „+“ соответствуют радиальным частям волновых функций электронов, полученным решением уравнений самосогласованного поля Хартри–Фока для конфигураций начального ($[0]$) и конечного ($[1s_+]$) состояний иона. В (8) поляризационный множитель ρ определяет эффект угловой анизотропии сечения NDCS-процесса. Он конкретизирован в соответствии с тремя схемами предполагаемого компланарного $[\mathbf{k}, \mathbf{k}_n \in P; \mathbf{k}(\mathbf{k}_n)$ — волновой вектор падающего (рассеянного) фотона, P — плоскость рассеяния] и аксиально-симметричного (относительно вектора \mathbf{k}) эксперимента. Первая схема — векторы поляризации фотонов перпендикулярны плоскости рассеяния ($\mathbf{e}, \mathbf{e}_n \perp P$). Вторая схема — векторы поляризации фотонов параллельны плоскости рассеяния ($\mathbf{e}, \mathbf{e}_n \parallel P$). Третья схема — схема с неполяризованны-

ми (NP) фотонами. В результате имеем

$$\rho^\perp = 1, \quad (10)$$

$$\rho^\parallel = \cos^2 \theta + \frac{1}{12\pi} \sin^4 \theta + f \sin^2(2\theta), \quad (11)$$

$$\rho_{NP} = \frac{1}{2} (\rho^\perp + \rho^\parallel), \quad (12)$$

$$f = \frac{1}{4\pi} \left(1 + \frac{1}{16\pi}\right) - \frac{1}{9} \frac{(\omega_1 + 2\omega_2)(\omega_2 + 2\omega_1)}{(\omega_1 + \omega_2)^2}, \quad (13)$$

где θ — угол рассеяния (угол между векторами \mathbf{k} и \mathbf{k}_n). Сингулярные одноэлектронные амплитуды вероятности излучения при переходе из континуума в континуум (рис. 1, *a*) получены в форме скорости в приближении плоских волн для радиальных частей волновых функций сплошного спектра, $|x\rangle \cong \left(\frac{2}{\pi^2 x}\right)^{1/4} \sin(r\sqrt{2x})$:

$$(x - y)\langle x p_+ | \hat{r} | y(s, d) \rangle \cong i\sqrt{2x}\delta(x - y), \quad (14)$$

$$(y - \varepsilon)\langle y(s, d)_+ | \hat{r} | \varepsilon p_+ \rangle \cong i\sqrt{2y}\delta(y - \varepsilon), \quad (15)$$

где δ — дельта-функция Дирака. Аналитическая структура сечения (8) качественно воспроизводит результаты для однократного комптоновского рассеяния [18]. А именно воспроизводится возникновение „инфракрасной расходимости“ сечения при $\omega_{1,2} \rightarrow 0$:

$$\lim_{\omega_{1,2} \rightarrow 0} \sigma_N^{(4)} = \infty, \quad (16)$$

обращение сечения в нуль при $\varepsilon \rightarrow 0$ (рис. 2, *a*: прямая $\omega_1 + \omega_2 = \omega - I_{1s}$ на плоскости (ω_1, ω_2)):

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sigma_N^{(4)} = 0, \quad (17)$$

и выполнение асимптотического условия при $\omega \rightarrow \infty$:

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \sigma_N^{(4)} = 0. \quad (18)$$

Для сечения локального двойного комптоновского рассеяния (LDCS; рис. 1, *b*, 2, *b*) вне рамок дипольного приближения для оператора \hat{Q} имеем [19,20]

$$\sigma_L^{(4)} = r_0^2 \frac{\omega_1 \omega_2}{\omega} \beta \mu L^2, \quad (19)$$

$$L = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(1 - \frac{\omega}{\omega_1 + \omega_2}\right) \langle 1s_+ | 1s_0 \rangle \langle 1s_0 | \hat{r} \hat{j}_0(qr) | \varepsilon p_+ \rangle, \quad (20)$$

где $\hat{j}_0(qr) = (1/qr) \cdot \sin(qr)$, $q = |\mathbf{k} + \mathbf{k}_2|$ и поляризаационный множитель

$$\mu^\perp = 1, \quad (21)$$

$$\mu^\parallel = \cos^2(2\theta), \quad (22)$$

$$\mu_{NP} = \frac{1}{2} (\mu^\perp + \mu^\parallel), \quad (23)$$

определяет эффект угловой анизотропии сечения процесса LDCS. Заметим, что в (20) учтен множитель $1/\sqrt{6}$, который был потерян в [19,20]. Эта поправка не

изменяет физических результатов работ [19,20]. Для сечения (19) отсутствует „инфракрасная расходимость“, при $\varepsilon \rightarrow 0$ возникает „обрыв“ и выполняется асимптотическое условие.

Ограничиваясь лишь наиболее простой в математическом отношении \perp -схемой предполагаемого эксперимента, для полного сечения двойного комптоновского рассеяния с учетом квантовой интерференции амплитуд вероятности процесса NDCS (1) и процесса LDCS (5) имеем

$$\sigma_\perp^{(4)} = \chi^2 \sigma_{L,T}^{(4)}, \quad (24)$$

$$\chi = \frac{6}{5} \varepsilon \left(\frac{1}{\omega_1} + \frac{1}{\omega_2}\right) - 1, \quad (25)$$

где $\sigma_{L,T}^{(4)}$ определяется выражением (19) при $\mu^\perp = 1$. Как и следовало ожидать, при $\varepsilon \rightarrow 0$ $\sigma_{N,\perp}^{(4)} \rightarrow 0$ и $\sigma_\perp^{(4)} \rightarrow \sigma_{L,\perp}^{(4)}$.

Результаты и обсуждение

Результаты расчета представлены на рис. 2–4. Для параметров сечений (8) и (19) приняты значения $I_{1s} = 1.195$ keV [19] и $\omega = 6.400$ keV (энергия $K\alpha$ -линии эмиссии атома железа [21]). В этом случае выполнен критерий применимости дипольного приближения [$\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n) \cong 1$] для \hat{R} -оператора: $\lambda_\omega / \langle r_{1s} \rangle \gg 1$, где средний радиус оболочки $1s^2$ иона Ne^{8+} $\langle r_{1s} \rangle = 0.08$ Å и длина волны падающего на ион излучения $\lambda_\omega = 1.94$ Å.

Результат на рис. 2, *a* демонстрирует лидирующую роль NDCS-процесса при $\varepsilon \rightarrow \omega - I_{1s}$ (тенденция к „инфракрасной расходимости“ (16)). При этом учет квантовой интерференции каналов рассеяния K_s и K_d из (3) практически в два раза увеличивает теоретические значения сечения NDCS-процесса, полученные с учетом лишь канала K_s . При $\varepsilon \rightarrow 0$ лидирующим становится LDCS-процесс (рис. 2, *b*). Результат на рис. 3 демонстрирует эффект угловой анизотропии сечений NDCS-процесса (рис. 3, *a*; преимущественное рассеяние в направлении углов $\theta = 0^\circ, 180^\circ$) и LDCS-процесса (рис. 3, *b*; преимущественное рассеяние в направлении углов $\theta = 0^\circ, \pm 90^\circ, 180^\circ$) для \parallel -схемы эксперимента и эксперимента с неполяризованными фотонами. Результаты на рис. 3, *a* качественно воспроизводят таковые для однократного комптоновского рассеяния [18,22]. Однако эти результаты обретают следующую особенность — поляризаационные множители ρ^\parallel и ρ_{NP} формально математически становятся зависящими (через f -функцию из (13)) от энергий ω_n -фотонов. Сравнение результатов на рис. 4, *a* и рис. 4, *b* демонстрирует эффект деструктивной (гасящей) квантовой интерференции амплитуд вероятности NDCS- и LDCS-процессов, входящих с разными знаками в полную амплитуду вероятности рассеяния. При этом происходит перераспределение вероятности рассеяния в область доминирования NDCS-процесса.

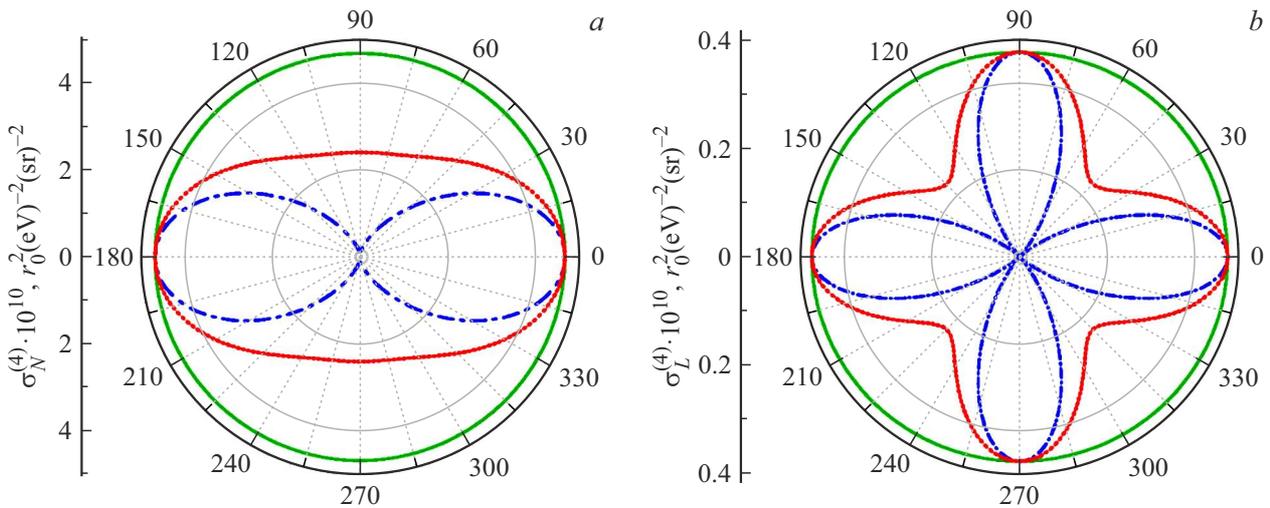


Рис. 3. Индикатрисы (a) нелокального (рис. 2, a) и (b) локального (рис. 2, b) двойного комптоновского рассеяния фотона ионом Ne^{8+} с полярным радиусом $\sigma^{(4)}$ и полярным углом θ при фиксированных значениях энергий падающего ($\hbar\omega = 6.40 \text{ keV}$) и рассеянных ($\hbar\omega_1 = \hbar\omega_2 = 1.50 \text{ keV}$) фотонов. Схема эксперимента: \perp (сплошная зеленая кривая), \parallel (штрихпунктирная синяя кривая), неполяризованные фотоны (пунктирная красная кривая).

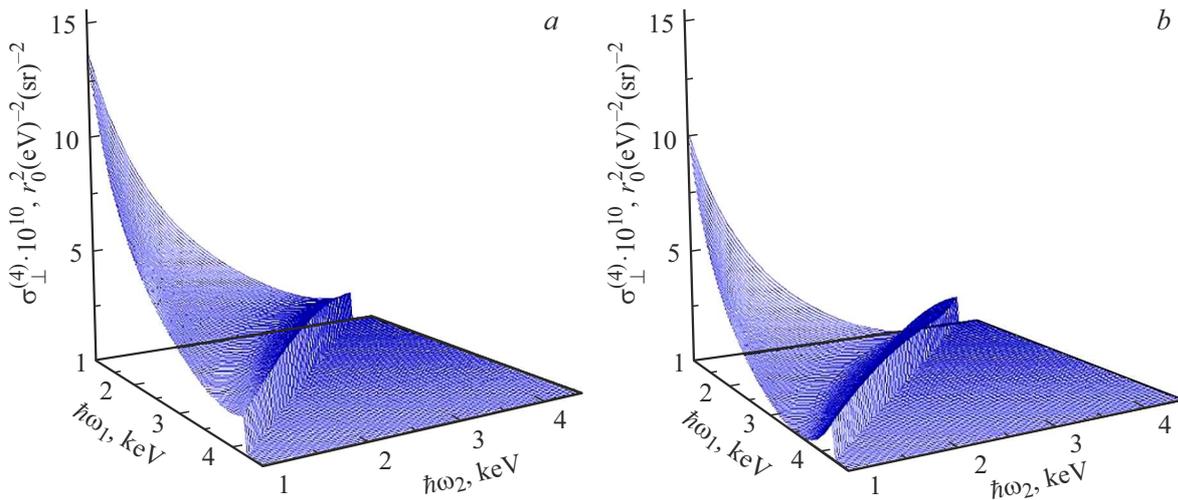


Рис. 4. Полные четырехжды дифференциальные сечения неупругого рассеяния фотона ионом Ne^{8+} для \perp -схемы эксперимента: (a) без учета (сумма (8) и (19) при $\rho^\perp = \mu = 1$) и (b) с учетом (24) квантовой интерференции амплитуд вероятностей процессов нелокального и локального двойного комптоновского рассеяния. Угол рассеяния $\theta = 90^\circ$. Энергия падающего фотона $\hbar\omega = 6.40 \text{ keV}$, $\hbar\omega_n$ — энергия рассеянного фотона ($n = 1, 2$).

Заключение

Сформулирован нерелятивистский вариант квантовой теории процесса двойного комптоновского рассеяния рентгеновского фотона многозарядным гелиеподобным атомным ионом. Установлены (a) энергетические области доминирования, (b) эффекты угловой анизотропии (в соответствующих схемах предполагаемого эксперимента) и (c) эффект деструктивной квантовой интерференции процессов нелокального и локального двойного комптоновского рассеяния. Полученные результаты носят предсказательный характер. Теория допускает модификацию, в частности, заменой δ -функции Дирака в „зо-

лотом правиле“ Ферми [23] на спектральную функцию Гаусса–Лапласа:

$$\delta(\varepsilon - \varepsilon_0) \rightarrow G = \frac{1}{\gamma_b \sqrt{\pi}} \exp \left\{ - \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\gamma_b} \right)^2 \right\},$$

$$\gamma_b = \frac{1}{2\sqrt{\ln 2}} \Gamma_{beam},$$

для учета ненулевой ширины спектрального разрешения современного эксперимента (например, $\Gamma_{beam} = 0.50 \text{ eV}$ в экспериментах с рентгеновским лазером на свободных электронах [24] и $\Gamma_{beam} = 5 \text{ eV}$ в астрофизике [25]). Наконец, добавим следующее. Можно предположить, что экс-

периментальное обнаружение процесса двойного комптоновского рассеяния фотона атомным ионом возможно, в частности, методами работ [1–5]. При этом оценка значения ожидаемого дважды дифференциального сечения двойного комптоновского рассеяния фотона ионом Ne^{8+} [$\sigma^{(2)} \sim 10^{-8}(r_0^2 eV^{-1} s r^{-1})$] на два–три порядка меньше значения дважды дифференциального сечения однократного комптоновского рассеяния фотона гелиеподобным (и „близким“ иону Ne^{8+}) ионом Si^{12+} [26].

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A. Bracci, C. Coceva, C. Colli, E. Lonati. *Nuovo Cimento*, **3**, 203 (1956). DOI: 10.1007/BF02746210
- [2] M.R. McGie, F.P. Brady, W.J. Knox. *Phys. Rev.*, **152** (4), 1190 (1966). DOI: 10.1103/PhysRev.152.1190
- [3] B.S. Sandhu, R. Dewan, B. Singh, B.S. Ghumman. *Phys. Rev. A*, **60**, 4600 (1999). DOI: 10.1103/PhysRevA.60.4600
- [4] A. Sharma, M.B. Saddi, B. Singh, B.S. Sandhu. *Nucl. Sci. Eng.*, **148**, 445 (2004). DOI: 10.13182/NSE04-A2470
- [5] M.B. Saddi, B. Singh, B.S. Sandhu. *Nucl. Technology*, **175** (1), 168 (2011). DOI: 10.13182/NT11-A12286
- [6] L.M. Brown, R.P. Feynman. *Phys. Rev.*, **85** (2), 231 (1952). DOI: 10.1103/PhysRev.85.231
- [7] F. Mandl, T.H.R. Skyrme. *Proc. R. Soc. (London) A*, **215** (1123), 497 (1952). DOI: 10.1098/rspa.1952.0227
- [8] M. Ram. *Phys. Rev. D*, **12** (7), 2043 (1975). DOI: 10.1103/PhysRevD.12.2043
- [9] W. Heitler. *The Quantum Theory of Radiation* (Dover, N. Y., 1984).
- [10] F. Bell, arXiv: 0809.1505 [quant-ph]. DOI: 10.48550/arXiv.0809.1505
- [11] P. Beiersdorfer. *J. Phys. B*, **48** (14), 4017 (2015). DOI: 10.1088/0953-4075/48/14/144017
- [12] P. Indelicato. *J. Phys. B*, **52** (23), 2001 (2019). DOI: 10.1088/1361-6455/ab42c9
- [13] G. Doumy, C. Roedig, S.-K. Son, C.I. Blaga, A.D. Di Chiara, R. Santra, N. Berrah, C. Bostedt, J.D. Bozek, P.H. Bucksbaum, J.P. Cryan, L. Fang, S. Ghimire, J.M. Glowina, M. Hoenner, E.P. Kanter, B. Krässig, M. Kuebel, M. Messerschmidt, G.G. Paulus, D.A. Reis, N. Rohringer, L. Young, P. Agostini, L.F. Di Mauro. *Phys. Rev. Lett.*, **106** (08), 3002 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.083002
- [14] Y. Tanaka, H. Uchida, T. Tanaka, Y. Amano, Y. Koshiba, T. Go Tsuru, H. Sano, Y. Fukui. *Astrophys. J.*, **933**, 101 (2022). DOI: 2205.10038
- [15] G. Rauw, Y. Naze, C. Motch, M.A. Smith, J.G. Flö, R. Lopes de Oliveira. *Astron. Astrophys.*, **664**, A 184 (2022). DOI: 10.1051/0004-6361/202243679
- [16] A.L. Fetter, J.D. Waleska. *Quantum Theory of Many-Particle System* (Mc Graw-Hill, N. Y., 1971). DOI: 10.1063/1.3071096
- [17] A.N. Hopersky, A.M. Nadolinsky, S.A. Novikov. *Phys. Rev. A*, **98** (6), 3424 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevA.98.063424
- [18] P.M. Bergstrom, T. Surič, K. Pisk, R.H. Pratt. *Phys. Rev. A*, **48** (2), 1134 (1993). DOI: 10.1103/PhysRevA.48.1134
- [19] A.N. Hopersky, A.M. Nadolinsky, S.A. Novikov, R.V. Koneev. *J. Phys. B*, **54** (15), 5601 (2021). DOI: 10.1088/1361-6455/ac04c5
- [20] А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский, Р.В. Конеев. *ЖЭТФ*, **162** (1), 27 (2022). DOI: 10.31857/S0044451022070000
- [21] A. Shimaguchi, K.K. Nobukawa, S. Yamauchi, M. Nobukawa, Y. Fujita. *Publ. Astron. Soc. Japan*, **74**, 656 (2022). DOI: 10.48550/arXiv.2203.03136
- [22] А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский, И.Д. Петров, Р.В. Конеев. *ЖЭТФ*, **158** (6), 1032 (2020). DOI: 10.31857/S0044451020110000
- [23] R. Loudon. *The Quantum Theory of Light* (Oxford Science Publications, 2001).
- [24] V.M. Kaganer, I. Petrov, L. Samoylova. *Acta Crystallogr. A*, **77**, 1 (2021). DOI: 10.1107/S205327321003697
- [25] P. Gandhi, T. Kawamuro, M. Diaz Trigo, J.A. Paice, P.G. Boorman, M. Cappi, C. Done, A.C. Fabian, K. Fukumura, J.A. Garčia, C.L. Greenwell, M. Guainazzi, K. Makishima, M.S. Tashiro, R. Tomaru, F. Tombesi, Y. Ueda. *Nature Astron.*, **6**, 1364 (2022). DOI: 10.1038/s41550-022-01857-y
- [26] А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский. *Письма в ЖЭТФ*, **115** (8), 469 (2022). DOI: 10.31857/S1234567822080110