

# Слияние рентгеновских фотонов в поле легкого атомного иона

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

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

Поступила в редакцию 27 февраля 2017 г.

Теоретически исследован процесс слияния трех рентгеновских фотонов в один в поле легкого атомного иона. В области энергий падающего фотона  $\hbar\omega \cong I_{1s}/2$  ( $I_{1s}$  – энергия порога ионизации  $1s$ -оболочки иона) предсказаны ярко выраженная резонансная структура и сильная угловая анизотропия дифференциального сечения слияния. Дана оценка абсолютного значения наблюдаемого сечения слияния.

DOI: 10.7868/S0370274X1709003X

**1. Введение.** С созданием рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL; [1]) открывается возможность исследования фундаментальных процессов нелинейного взаимодействия рентгеновского излучения с многоэлектронной системой. К нелинейным процессам, наряду, например, со слиянием фотонов в кулоновском поле протона [2], комптоновским [3] и рэлеевским [4] рассеянием двух фотонов атомом, относится процесс слияния фотонов в поле атома [5]. Для процессов слияния теорема Фарри [6] квантовой электродинамики требует выполнения равенства  $n + m = 2g$ , где  $n(m)$  – число падающих (рассеянных) фотонов и  $g$  – целое число. В данном Письме мы распространяем теорию работы [5] (теорема Фарри для  $n = 3, m = 1$ ) на случай атомного иона и исследуем динамику эффекта слияния при переходе, в данном случае, от атома к его изоэлектронной последовательности. Взяты атом неона (Ne; заряд ядра атома  $Z = 10$ ; конфигурация и терм основного состояния  $[0] = 1s^2 2s^2 2p^6 [^1S_0]$ ) и неоподобный ион атома кремния ( $\text{Si}^{4+}$ ;  $Z = 14$ ). Выбор объектов исследования обусловлен сферической симметрией основного состояния и их доступностью для проведения высокоточных экспериментов (см., например, [7] (Ne), [8] ( $\text{Si}^{4+}$ )). Результаты исследований спектральных характеристик легких элементов и их ионов, в свою очередь, широко востребованы, в частности, в контексте проблем диагностики высокотемпературной лабораторной плазмы и осуществления управляемого термоядерного синтеза [9].

**2. Теория.** В атомной системе единиц в случае слияния трех  $\omega$ -XFEL-фотонов в один  $\omega_R$ -фотон ( $\omega_R = 3\omega$ )

$$\omega + \omega + \omega + [0] \rightarrow X \rightarrow [0] + \omega_R, \quad (1)$$

для дифференциального сечения процесса (1) получаем [5]:

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

$$M = \sum_{x>F} Q \left( \frac{1}{\omega_{-} + i(\Gamma_{1s}/2)} - \frac{1}{\omega_{+}} \right), \quad (3)$$

$$Q = (4l + 2) R_l^{(1)} R_l^{(2)} P_l(\cos \psi). \quad (4)$$

В (1)–(4) обозначено:  $X$  – виртуальные состояния системы “атом (ион)  $\oplus$  фотоны”,  $\Omega_R$  – пространственный угол вылета рассеянного фотона,  $\eta = 2\pi cr_0^2/\omega$ ,  $c$  – скорость света в вакууме,  $r_0$  – классический радиус электрона,  $\sum_{x>F}$  – символ суммирования (интегрирования) по состояниям  $1s \rightarrow xl$  перехода дискретного (сплошного) спектра,  $l \in [0; \infty)$ ,  $F$  – уровень Ферми – набор квантовых чисел валентной оболочки атома (иона),  $\omega_{\pm} = 2\omega \pm [E(1s2s^22p^6xl) - E(0)]$ ,  $E$  – полные энергии состояний атома (иона),  $R_l^{(m)} = \langle 1s | j_l(r_m) | xl \rangle$ ,  $j_l$  – сферическая функция Бесселя,  $r_m = r|\mathbf{q}_m|$ ,  $|\mathbf{q}_1| = 2\omega/c$ ,  $|\mathbf{q}_2| = (\omega/c)(10 - 6 \cos \theta)^{1/2}$ ,  $\theta$  – угол рассеяния (угол между волновыми векторами падающего ( $\mathbf{k}$ ) и рассеянного ( $\mathbf{k}_R$ ) фотонов),  $P_l$  – сферический ортогональный полином Лежандра,  $\psi$  – угол между векторами  $\mathbf{q}_1 = 2\mathbf{k}$  и  $\mathbf{q}_2 = \mathbf{k} - \mathbf{k}_R$  и  $\Gamma_{1s}$  – естественная ширина распада  $1s$ -вакансии. Эффект радиальной релаксации возбужденных состояний атома (иона) в поле  $1s$ -вакансии и соответствующая аналитическая модификация величин  $R_l^{(m)}$  учтены методами теории неортогональных орбиталей [10] в рамках одноконфигурационного приближения Хартри–Фока.

Принята схема предполагаемого XFEL-эксперимента, когда падающие (параллельно друг другу) и рассеянные фотоны линейно поляризованы перпендикулярно ( $\perp$ ) плоскости рассеяния. Плоскость рассеяния проходит через волновые векторы

<sup>1)</sup>e-mail: hopersky\_vm\_1@rgups.ru

падающих и рассеянного фотонов. Физическая интерпретация слагаемых амплитуды вероятности слияния (3) в представлении диаграмм Фейнмана дана на рис. 1: первое слагаемое – см. рис. 1а; вто-

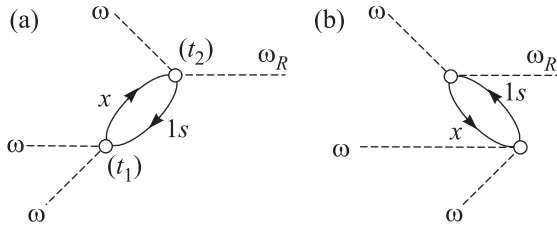


Рис. 1. Парциальные амплитуды вероятности слияния в (3) в представлении диаграмм Фейнмана нерелятивистской квантовой теории многих тел. Стрелка вправо – электрон ( $x \equiv xl, l \in [0; \infty)$ ), стрелка влево – вакансия ( $1s$ ). Открытый кружок – вершина контактного взаимодействия по парциальному  $j_l$ -оператору перехода,  $\omega(\omega_R)$  – падающий (рассеянный) фотон. Направление времени – слева направо ( $t_1 < t_2$ )

рое слагаемое, нарушающее принцип причинности на виртуальном уровне – см. рис. 1b. Обсуждение приближения ограничения лишь состояниями  $1s \rightarrow xl$  возбуждения (ионизации) атома (иона) в исследуемой нами области энергий XFEL-фотона  $2\omega \cong I_{1s} \pm 80$  эВ, эффектов образования в спектрах слияния структур типа профилей Фано, проблем локальной калибровочной инвариантности, инфракрасной расходимости и учета полноты набора одноэлектронных  $xl$ -состояний при построении сечения (2) дано в работе [5].

**3. Результаты и обсуждение.** Результаты расчета представлены на рис. 2, 3. Учтены лишь наиболее интенсивные  $1s \rightarrow n(s, p, d, f)$  переходы в состоянии дискретного спектра. Для состояний  $1s \rightarrow xl$  ионизации учтены лишь значения  $l \in [0; 17]$ . Для величин  $I_{1s}$  ( $\Gamma_{1s}$ ) взяты (в эВ) экспериментальные 870.17 (0.27) (Ne [11]) и теоретические 1905.68 (0.43) ( $\text{Si}^{4+}$  [12]) значения.

Переход от Ne к  $\text{Si}^{4+}$  сопровождается локализацией к ядру состояний дискретного спектра и, соответственно, делокализацией состояний сплошного спектра. Например, для среднего радиуса  $3p$ -электрона в Ne ( $\text{Si}^{4+}$ ) получаем  $\langle r_{3p} \rangle = 3.17(0.93)$  Å. Как результат, в интегралах  $R_l^{(m)}$  возрастает степень перекрытия радиальных частей  $|1s\rangle$  и  $|nl\rangle$  волновых функций дискретного спектра и интенсивность слияния через состояния сплошного спектра перераспределяется в область гигантских резонансов сечения (2) (см. рис. 2). По шкале энергий  $\omega$ -XFEL-фотона возникают “окна прозрачности” ( $\sigma_{\perp}^{(1)} \rightarrow 0$ )

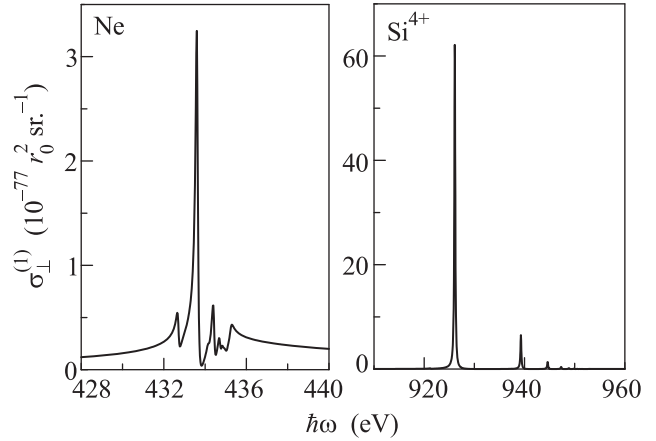


Рис. 2. Дифференциальные сечения процесса слияния (2) для Ne и  $\text{Si}^{4+}$  в области энергии падающего XFEL-фотона  $2\hbar\omega \cong I_{1s} \pm 80$  эВ. Угол рассеяния  $\theta = 150^\circ$ ,  $I_{1s} = 870.17$  (Ne), 1905.68 ( $\text{Si}^{4+}$ ) эВ,  $\Gamma_{1s} = 0.27$  (Ne), 0.43 ( $\text{Si}^{4+}$ ) эВ

между лидирующими резонансами спектра слияния. Основной вклад в вероятность слияния дают состояния дипольно разрешенной  $p$ -симметрии. Профили менее интенсивных монополярных  $1s \rightarrow ns$  переходов в состоянии дискретного спектра “наблюдаются” как длинноволновые сателлиты лидирующих резонансов спектра слияния. Например, для  $1s \rightarrow 3s$  ( $1s \rightarrow 3p$ ) перехода в Ne получаем  $\omega = 432.70$  (433.62) эВ и  $Q = 0.24$  ( $1.30$ )  $\cdot 10^{-5}$ . При этом эффект локализации дискретных состояний высших ( $l \geq 2$ ) симметрий сопровождается увеличением их вклада в амплитуду вероятности (3) на несколько порядков. Так, для  $1s \rightarrow 3d$  перехода в Ne ( $\text{Si}^{4+}$ ) получаем  $Q = 0.14 \cdot 10^{-10}$  ( $0.39 \cdot 10^{-7}$ ). Таким образом, с увеличением заряда ядра элемента изоэлектронной последовательности роль высших симметрий в формировании и интерпретации спектра слияния будет заметно возрастать.

Результаты исследования углового распределения рассеянного  $\omega_R$ -фотона (см. рис. 3) для предполагаемой аксиально-симметричной (относительно вектора  $\mathbf{k}$ ) схемы XFEL-эксперимента демонстрируют сохранение эффекта сильной угловой анизотропии процесса (1) при переходе от Ne к  $\text{Si}^{4+}$ : с наибольшей вероятностью три падающих фотона сливаются в один фотон для углов рассеяния  $\theta \sim 120 \div 180^\circ$  (рассеяние назад; высокая отражательная способность атома (иона) к падающим на него фотонам). Причина такой анизотропии определена математическими свойствами полинома Лежандра и функции Бесселя для лидирующей ( $l = 1$ ) симметрии состояний возбуждения (ионизации) атома (иона)

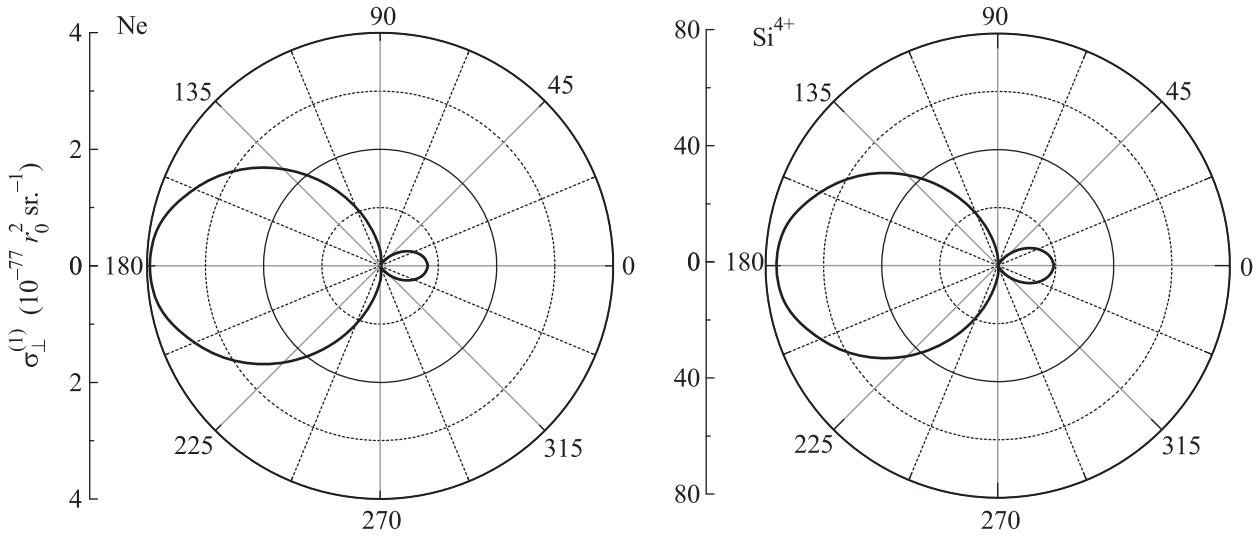


Рис. 3. Индикатрисы слияния для Ne и  $\text{Si}^{4+}$  с полярным радиусом  $\max[\sigma_{\perp}^{(1)}]$  и полярным углом  $\theta$  для фиксированных значений энергии падающего XFEL-фотона  $\hbar\omega = 433.61$  эВ (Ne), 926.10 эВ ( $\text{Si}^{4+}$ ) (см.  $1s \rightarrow 3p$  лидирующий дипольный резонанс на рис. 2)

[5]. Здесь можно предположить следующую физическую аналогию с эффектами рентгеновской оптики [13]. Давление XFEL-излучения деформирует сферически-симметричное основное состояние атома (иона) в форму параболической линзы. В результате основная часть потока XFEL-излучения отражается и “линзируется” в области углов рассеяния  $\theta \sim 180^\circ$ . Прощедшая через атом (ион) часть излучения “линзируется” в узкой области углов рассеяния  $\theta \sim 0^\circ$  (рассеяние вперед). Однако, при переходе от Ne к  $\text{Si}^{4+}$  обнаруживается тенденция к заметному ( $\sim 20\%$ ) перераспределению максимумов интенсивностей слияния  $\zeta(\text{Si}^{4+}) = 0.255 > \zeta(\text{Ne}) = 0.204$ , где  $\zeta = \sigma_{\perp}^{(1)}(0^\circ)/\sigma_{\perp}^{(1)}(180^\circ)$ . Исследование зависимости величины  $\zeta$  от параметров  $Z$  и  $\theta$  требует расширения элементов изоэлектронной последовательности.

Следует ожидать, что планируемый в ближайшие годы уровень яркости (число фотонов в лазерном пульсе,  $N = 10^n$ ) XFEL-излучения позволит экспериментально зарегистрировать предсказываемый квантовый и существенно нелинейный по электромагнитному полю эффект слияния. В самом деле, например, для  $n = 29$  [14],  $\theta = 150^\circ$  и  $\omega = 926.10$  эВ для иона  $\text{Si}^{4+}$  ( $1s \rightarrow 3p$  дипольный резонанс слияния) получаем вполне доступную для измерений оценку абсолютного значения сечения слияния  $C_N^3 \sigma_{\perp}^{(1)} \cong \cong 8.30$  (Гб·ср $^{-1}$ ), где  $C_N^3$  – биномиальный коэффициент.

**4. Заключение.** В рамках нерелятивистской квантовой теории возмущений исследованы абсолют-

ные значения и форма дифференциального сечения процесса слияния трех рентгеновских фотонов в один фотон в поле атомного иона. В лидирующем порядке теории возмущений процесс реализуется через рождение виртуальных электрон-вакансия пар при контактом (нелинейном по электромагнитному полю) взаимодействии рентгеновских фотонов с атомом (ионом) (см. рис. 1). В этом случае атом (ион) подобен вакууму квантовой электродинамики, рождающему виртуальные электрон-позитронные пары. В квантовой теории взаимодействия фотонов оптического диапазона с веществом аналогичный процесс интерпретируется как процесс генерации третьей гармоники через линейный по электромагнитному полю оператор радиационного перехода [15]. Однако лидирующая роль в определении абсолютных значений и формы дифференциального сечения (2) оператора контактного перехода с участием фотонов жесткого рентгеновского диапазона придает термину “слияние” буквальный смысл. На примере иона  $\text{Si}^{4+}$  установлено, что переход от атома Ne к элементу его изоэлектронной последовательности сопровождается (i) возникновением гигантских резонансов слияния через дипольно разрешенные переходы в возбужденные состояния дискретного спектра и (ii) сохранением эффекта сильной угловой анизотропии дифференциального сечения процесса. С увеличением заряда ядра иона следует ожидать значительного (на несколько порядков) усиления эффекта слияния. При этом, в силу требования  $\omega \cong I_{1s}/2$ , должна быть увеличена и энергия падающих XFEL-

фотонов. Конечно, в настоящее время при достигнутом уровне яркости XFEL-излучения  $N \cong 10^{12}$  [16] эффект слияния трех фотонов в один в поле атома (иона) остается недоступным для экспериментальных измерений. В самом деле, для иона  $\text{Si}^{4+}$  при  $N \cong 10^{12}$ ,  $\theta = 150^\circ$  и  $\omega = 926.10 \text{ эВ}$  имеем  $C_N^3 \sigma_{\perp}^{(1)} \cong 0.83 \cdot 10^{-50} (\text{Гб} \cdot \text{ср}^{-1})$ . Однако, оценка абсолютного значения максимума дифференциального сечения слияния указывает на возможность экспериментального обнаружения предсказываемого процесса при ожидаемом в ближайшем будущем уровне яркости XFEL-излучения ( $N \cong 10^{33}$  [14], European XFEL, Германия). Отметим, что мы приводим не более чем оценку значений и формы наблюдаемого сечения слияния. В самом деле, строгое определение параметров этого сечения требует куда более детального анализа условий эксперимента, включая учет квантово-статистических свойств пучка XFEL-излучения [17–20].

1. C. Pellegrini, A. Marinelli, and S. Reiche, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 015006 (2016).
2. A. Di Piazza, K. Z. Hatsagorsyan, and C. H. Keitel, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 010403 (2008).
3. A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, and S. A. Novikov, *Phys. Rev. A* **92**, 052709 (2015).
4. A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, and S. A. Novikov, *Phys. Rev. A* **93**, 052701 (2016).
5. A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, and S. A. Novikov, *J. Phys. B* **50**, 065601 (2017).
6. W. H. Furry, *Phys. Rev.* **51**, 125 (1937).
7. C. Gao, J. Zeng, and J. Yuan, *J. Phys. B* **49**, 044001 (2016).
8. J. M. Bizau, J. P. Mosnier, E. T. Kennedy, D. Cubaynes, F. J. Wuilleumier, C. Blancard, J. P. Champeaux, and F. Folkmann, *Phys. Rev. A* **79**, 033407 (2009).
9. J. Reader, A. Kramida, Y. Ralchenko, W. Wiese, and J. Fuhr, *J. Phys.: Conf. Ser.* **576**, 012007 (2015).
10. A. P. Jucys, E. P. Našlenas, and P. S. Žvirblis, *Int. J. Quantum Chem.* **6**, 465 (1972).
11. 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).
12. A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, D. V. Dzuba, and V. A. Yavna, *J. Phys. B* **38**, 1507 (2005).
13. A. Snigirev, I. Snigireva, G. Vaughan, J. Wright, M. Rossat, A. Bytchkov, and C. Curfs, *J. Phys.: Conf. Ser.* **186**, 012073 (2009).
14. Ph. H. Bucksbaum and N. Berrah, *Physics Today* **68**, 26 (2015).
15. R. Loudon, *The Quantum Theory of Light*, Oxford Science Publications (2001).
16. C. Bostedt, S. Boutet, D. M. Fritz, Z. Huang, H. J. Lee, H. T. Lemke, A. Robert, W. F. Schlotter, J. J. Turner, and G. J. Williams, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 015007 (2016).
17. R. J. Glauber, *Phys. Rev.* **131**, 2766 (1963).
18. E. Wolf and L. Mandel, *Rev. Mod. Phys.* **37**, 231 (1965).
19. J. R. Klauder and E. S. G. Sudarshan, *Fundamentals of Quantum Optics*, Benjamin Inc., N.Y. (1968).
20. S. Yudovich and S. Shwartz, *J. Opt. Soc. Am. B* **32**, 1894 (2015).