Упругое рассеяние двух фотонов многозарядным атомным ионом

А. Н. Хоперский¹⁾, А. М. Надолинский

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

Поступила в редакцию 11 декабря 2017 г.

Теоретически исследован процесс упругого рассеяния двух рентгеновских фотонов многозарядным атомным ионом. В области энергий рассеянного фотона $\hbar\omega \pm I_{1s}$ ($\hbar\omega$ – энергия падающего фотона, I_{1s} энергия порога ионизации 1*s*-оболочки иона) предсказаны ярко выраженная протяженная резонансная структура и сильная угловая анизотропия дифференциального сечения рассеяния. Дана количественная оценка абсолютного значения наблюдаемого сечения.

r

DOI: 10.7868/S0370274X1805003X

1. Введение. В работе [1] впервые теоретически исследован нелинейный квантовый процесс резонансного упругого рассеяния двух фотонов атомом (на примере атома гелия, Не). Теория работы [1] обобщена в [2] на случай многоэлектронного атома (на примере атома неона, Ne). В данном Письме мы строим обобщение теории работы [2] на случай многозарядного атомного иона. В качестве объекта исследования взят неоноподобный ион атома аргона (Ar⁸⁺; заряд ядра иона Z = 18; конфигурация и терм основного состояния [0] $= 1s^22s^22p^6[^1S_0]$). Выбор обусловлен сферической симметрией основного состояния иона Ar⁸⁺ и его доступностью для проведения высокоточных экспериментов [3].

2. Теория. Рассмотрим процесс упругого рассеяния двух фотонов ионом Ar^{8+} :

$$\omega + \omega + [0] \to X \to [0] + \omega_1 + \omega_2, \tag{1}$$

где ω (ω_m , m = 1, 2) – угловая частота падающего (рассеянного) фотона, $\omega_1 + \omega_2 = 2\omega$, X – промежуточные (виртуальные) состояния системы "атомный ион \bigoplus фотоны" и принята атомная система единиц: $\hbar = e = m_e = 1$, \hbar – постоянная Планка, e – заряд и m_e – масса электрона.

Ограничимся исследованием областей энергии $2\omega \gg I_{1s}$ и $\omega_1 \cong \omega \pm I_{1s}$. Тогда, в силу неравенства (расчет данной работы) $I_{1s} = 3380.80 \text{ эВ} \gg I_{2s} = 495.65 \text{ эВ}$, рассеянием 2s- и 2p-оболочек остова иона можно пренебречь. В качестве схемы предполагаемого эксперимента с рентгеновским лазером на свободных электронах (XFEL; [4]) выберем случай компланарного ($\mathbf{k}, \mathbf{k}_m \in P$) и аксиально-симметричного ($\theta_1 = -\theta_2 \equiv \theta$) рассеяния линейно поляризованных падающих (параллельно друг другу) и рассеянных фотонов ($\mathbf{e}, \mathbf{e}_m \perp P$). Здесь $\mathbf{k}(\mathbf{k}_m) - \mathbf{k}_m$

волновой вектор и **е** (**e**_m) – вектор поляризации падающего (рассеянного) фотона, P – плоскость рассеяния и θ_m – угол рассеяния (угол между **k** и **k**_m). Как результат, во втором (лидирующем) порядке нерелятивистской квантовой теории возмущений для трижды дифференциального сечения процесса (1) получаем:

$$\frac{d^3\sigma_{\perp}}{d\omega_1 d\Omega_1 d\Omega_2} = \frac{cr_0^4}{128\pi} \beta_1 \beta_2 |M|^2 \equiv \sigma_{\perp}^{(3)}, \qquad (2)$$

$$M = \sum_{l=0}^{\infty} S_{x>F} \left(\frac{1}{\eta_1} + \frac{1}{\eta_2}\right) Q_l, \qquad (3)$$

$$\eta_m = \omega - \omega_m + E(0) - E(1sxl) + i\gamma_{1s}, \qquad (4)$$

$$Q_l = B_l^{(1)} B_l^{(2)} P_l(\cos \psi),$$
 (5)

$$B_l^{(m)} = \sqrt{4l+2} \langle 1s|j_l(q_m r)|xl\rangle, \tag{6}$$

$$q_m = (\omega/c)\sqrt{1 + \beta_m^2 - 2\beta_m \cdot \cos\theta}.$$
 (7)

$$\cos \psi = \frac{1 - 2\cos\theta + \beta_1\beta_2\cos(2\theta)}{\sqrt{(1 + \beta_1^2 - 2\beta_1\cos\theta)(1 + \beta_2^2 - 2\beta_2\cos\theta)}}$$

Здесь определены величины: c – скорость света в вакууме, r_0 – классический радиус электрона, Ω_m – пространственный угол вылета рассеянного фотона, $\beta_m = \omega_m/\omega$, E – полные Хартри–Фоковские энергии состояний иона, $2\gamma_{1s} = \Gamma_{1s}$ – естественная ширина распада 1*s*-вакансии, xl – одноэлектронные состояния возбуждения (ионизации) 1*s*-оболочки, j_l – сферическая функция Бесселя первого рода порядка l, P_l – классический сферический полином Лежандра, ψ – угол между векторами \mathbf{q}_1 и \mathbf{q}_2 ($\mathbf{q}_m = \mathbf{k} - \mathbf{k}_m$), S – символ суммирования (интегрирования) по состояниям дискретного (сплошного) спектра и F – уровень Ферми (набор квантовых чисел валентной оболочки основного состояния иона).

¹⁾e-mail: hopersky vm 1@rgups.ru

Появление глубокой 1*s*-вакансии в остове иона сопровождается эффектом монопольной (без изменения симметрии возбужденного состояния иона) перестройки радиальных частей волновых функций остовных и возбужденных одноэлектронных состояний. Соответствующая аналитическая модификация $B_l^{(m)}$ -амплитуды вероятности $1s \rightarrow xl$ перехода по j_l -оператору контактного взаимодействия проведена нами методами теории неортогональных орбиталей [5].

3. Результаты и обсуждение. Результаты расчета дифференциального сечения рассеяния (2) даны в табл. 1 и на рис. 1, 2. Для величины Γ_{1s} принято теоретическое значение 0.59 эВ [6]. При расчете дискретной части спектра рассеяния учтены лишь n(s, p, d, f)-состояния возбуждения с $n \leq 15$ (см. табл. 1). При расчете сплошной части спектра рассеяния учтены лишь орбитальные симметрии $l \in [0; 17]$. Для энергии падающих на ион XFEL-фотонов принято значение 5 кэВ.

Таблица 1. Спектральные характеристики лидирующих резонансов дифференциального сечения рассеяния (2) для иона ${\rm Ar}^{8+}$

nl	$\hbar\omega_1$ (э B)	Q_l
3s	8208.80	-2.71 [-6]
3p	8225.81	1.45 [-3]
4p	8299.54	4.77 [-4]
5p	8330.66	2.20 [-6]
$\overline{3d}$	8251.77	3.28 [-6]
4f	8311.81	7.83 [-10]

(см. область "горячих" фотонов на рис. 1). $\hbar\omega=5\,{\rm KBB}$, $\theta=90^\circ,$ $I_{1s}=3380.80\,{\rm BB},$ $\Gamma_{1s}=0.59\,{\rm BB},$ Q_l – см. (5), $[-m]\equiv10^{-m}$

Рис. 1 демонстрирует появление ярко выраженных протяженных резонансных структур в областях рождения "холодных" ($\omega_1 \cong \omega - I_{1s}$) и "горячих" ($\omega_1 \cong \omega + I_{1s}$) фотонов. "Зеркальность" этих структур обусловлена законом сохранения энергии $(\omega_1 + \omega_2 = 2\omega)$ в процессе рассеяния и выбором схемы предполагаемого XFEL-эксперимента. Возникновение структур типа профилей Фано [7] обусловлено интерференцией амплитуд вероятностей переходов в состояния дискретного и сплошного спектров в полной амплитуде вероятности рассеяния (3). При этом, в отличие от теории автоионизации Фано [интерференция волновых функций состояний возбуждения (ионизации) двух оболочек остова], интерферируют амплитуды вероятности переходов из одной 1sоболочки в состояния с орбитальными симметриями $l \in [0; \infty)$. Заметим здесь, что при рэлеевском рассеянии одного фотона электронами атома (атомного иона) по оператору радиационного перехода (l = 1)



Рис. 1. Дифференциальное сечение резонансного упругого рассеяния двух XFEL-фотонов ионом Ar^{8+} . $\hbar\omega = 5 \, \kappa \Rightarrow B$, $I_{1s} = 3380.80 \, \Rightarrow B$, $\Gamma_{1s} = 0.59 \, \Rightarrow B$, $\theta = 90^\circ$. Спектральные характеристики лидирующих резонансов рассеяния даны в табл. 1. Штриховой линией показан вклад сплошного спектра



Рис. 2. Индикатриса процесса рассеяния (1) для иона Ar^{8+} с полярным радиусом $\max[\sigma_{\perp}^{(3)}]$ и полярным углом θ для $\hbar\omega = 5000$ эВ и $\hbar\omega_1 = 8225.81$ эВ (см. $1s \to 3p$ лидирующий дипольный резонанс на рис. 1)

такая интерференция отсутствует. Между лидирующими $1s \to np$ резонансами спектра рассеяния возникают широкие "окна прозрачности" ($\sigma_{\perp}^{(3)} \to 0$) для падающего на ион XFEL-излучения. При этом, переход от многоэлектронного атома к элементу его изоэлектронной последовательности сопровождается (i) усилением роли высших симметрий [$Q_2 = 6.35$ [-9] (Ne), 3.28 [-6] (Ar⁸⁺) для $1s \to 3d$ резонанса и $Q_3 = 6.46$ [-13] (Ne), 7.83 [-10] (Ar⁸⁺) для $1s \to 4f$ резонанса] в становлении спектра рассеяния и (ii) заметным увеличением энергии рождаемых "горячих" фотонов [$\omega_1 \cong \omega + I_{1s} = 5870.17$ (Ne), 8380.80(Ar⁸⁺) эВ при $\omega = 5$ кэВ]. Таким образом, процесс (1) может стать экспериментальным методом заметного перераспределения энергии в XFEL-пульсе излучения через рождение "холодных" и "горячих" фотонов. В частности, для тяжелого атома криптона (Kr; $Z = 36; I_{1s} = 14.327 \text{ кэВ}$ [8]) при $\omega = 15 \text{ кэВ}$ получаем практически двукратное увеличение энергии XFELфотона: $\omega \to \omega_1 \cong 29.327 \text{ кэB}$.

Наряду с полученным результатом (см. рис. 1), установлен эффект сильной угловой анизотропии процесса (см. рис. 2): в области энергий порога ионизации глубокой 1*s*-оболочки два падающих на ион ХFEL-фотона с наибольшей вероятностью рассеиваются "назад" (эффект отражения XFEL-излучения: $\theta \approx 120^{\circ} \div 180^{\circ}$). Рассеяние "вперед" практически подавлено [$\sigma_{\perp}^{(3)}(\theta = 0^{\circ}) = 0.29 \cdot 10^{-50} (r_0^2 \cdot 3B^{-1} \cdot cp^{-2})$]. Однако переход от атома Ne к иону Ar⁸⁺ сопровождается увеличением вероятности рассеяния "вперед" [$\sigma_{\perp}^{(3)}(\theta = 0^{\circ}) = 1.43 \cdot 10^{-53}$ (Ne), $0.29 \cdot 10^{-50}$ (Ar⁸⁺) ($r_0^{2} \cdot 3B^{-1} \cdot cp^{-2}$)] и, таким образом, изменением как формы, так и направленности индикатрисы рассеяния.

В заключение дадим количественную оценку возможности экспериментального обнаружения предсказываемых эффектов. Например, для $\omega = 5000$ эВ. $\omega_1 = 8225.81 \, \mathrm{sB}, \, \theta = 180^\circ \, (1s \rightarrow 3p \, \mathrm{pesohahc}) \, \mathrm{u}$ ожидаемой средней яркости XFEL-излучения N = $= 10^{25}$ (число фотонов в XFEL-пульсе) [9] получаем вполне доступное для измерения абсолютное значение дифференциального сечения рассеяния $C_N^2 \sigma_{\perp}^{(3)} \cong 0.79 \ (b \cdot 3B^{-1} \cdot cp^{-2}),$ где C_N^2 – биномиальный коэффициент. Процесс (1), физически интерпретируемый как процесс фотон-фотонного рассеяния через атом (атомный ион), оказывается аналогом процесса фотон-фотонного рассеяния через вакуум квантовой электродинамики [10, 11]. Попытки экспериментального обнаружения последнего как в оптическом $(\omega \simeq 0.8$ эВ, Ті-лазер [12]), так и в рентгеновском $(\omega \simeq 6.5 \, \text{кэВ}, \, \text{XFEL}, \, N = 10^{11} \, [13])$ диапазонах энергий рассеиваемых фотонов пока остаются безуспешными. Однако, теоретическое предсказание [14, 15] и экспериментальное наблюдение (квази) фотон -(квази) фотонного рассеяния на Большом адронном коллайдере (периферийное столкновение ультрарелятивистских ядер свинца: Pb; Z = 82) [16] дают основание надеяться на открытие эффектов фотонфотонного упругого рассеяния через атом (атомный ион) и вакуум квантовой электродинамики в экспериментах с XFEL при ожидаемой в будущем яркости излучения [9].

- A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, and S. A. Novikov, Phys. Rev. A 93, 052701 (2016).
- 2. A.N. Hopersky, A.M. Nadolinsky, and S.A. Novikov (направлено в Phys. Lett. A).
- M. C. Simon, M. Schwarz, S. W. Epp, C. Beilmann, B. L. Schmitt, Z. Harman, T. M. Baumann, P. H. Mokler, S. Bernitt, R. Ginzel, S. G. Higgins, C. H. Keitel, R. Klawitter, K. Kubiček, V. Mäckel, J. Ullrich, and J. R. C. López-Urrutia, J. Phys. B 43, 065003 (2010).
- C. Pellegrini, A. Marinelli, and S. Reiche, Rev. Mod. Phys. 88, 015006 (2016).
- 5. P.-O. Löwdin, Phys. Rev. 97, 1474 (1955).
- M. H. Chen, B. Crasemann, Kh. R. Karim, and H. Mark, Phys. Rev. A 24, 1845 (1981).
- 7. U. Fano, Phys. Rev. 124, 1866 (1961).
- A. Kodre, I. Arčon, J. Padežnik Gomilšek, R. Prešeren, and R. Frahm, J. Phys. B 35, 3497 (2002).
- 9. M. Yabashi and H. Tanaka, Nat. Photon. 11, 12 (2017).
- 10. R. Karplus and M. Neuman, Phys. Rev. 83, 776 (1951).
- 11. B. De Tollis, Nuovo Cimento 35, 1182 (1965).
- D. Bernard, F. Moulin, F. Amiranoff, A. Braun, J. P. Chambaret, G. Darpentigny, G. Grillon, S. Ranc, and F. Perrone, Eur. Phys. J. D 10, 141 (2000).
- T. Inada, T. Yamaji, S. Adachi, T. Namba, S. Asai, T. Kobayashi, K. Tamasaku, Y. Tanaka, Y. Inubushi, K. Sawada, M. Yabashi, and T. Ishikawa, Phys. Lett. B 732, 356 (2014).
- D. d'Enterria and G. G. Silveira, Phys. Rev. Lett. 111, 080405 (2013) [Erratum 116, 129901 (2016)].
- M. Kłusek–Gavenda, P. Lebiedowicz, and A. Szczurek, Phys. Rev. C 93, 044907 (2016).
- M. Aaboud, G. Aad, B. Abbo et al. (ATLAS Collaboration), Nat. Phys. 9, 852 (2017).