Письма в ЖЭТФ, том 110, вып. 2, с. 95 – 98

Резонансное Комптоновское рассеяние двух фотонов многозарядным атомным ионом

А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский[1)]

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

Поступила в редакцию 27 мая 2019 г.
После переработки 27 мая 2019 г.
Принята к публикации 6 июня 2019 г.

Теоретически предсказан ярко выраженный $K\alpha_{1,2}$ спектр рентгеновской эмиссии при резонансном неупругом рассеянии двух фотонов в области энергии порога ионизации $1s$-оболочки свободного многозарядного атомного иона. Дана количественная оценка величины наблюдаемого дважды дифференциального сечения рассеяния. Результаты для иона Fe^{16+} могут оказаться важными при интерпретации спектров рентгеновской эмиссии от галактических кластеров, активных ядер галактик и звезд.

DOI: 10.1134/S0370274X19140054

1. Введение. Ожидаемое повышение яркости излучения рентгеновского лазера на свободных электронах (*X-ray Free-Electron Laser* – XFEL) [1] сделает доступным экспериментальные исследования, в частности, нелинейного процесса рассеяния двух фотонов в области энергий порогов ионизации глубоких оболочек атома (атомного иона). В недавней работе авторов [2] построен нерелятивистский вариант квантовой теории процесса резонансного неупругого (Комптоновского) рассеяния двух фотонов в области энергии порога ионизации $1s$-оболочки свободного многоэлектронного атома. В данном Письме мы даем обобщение этой теории на случай свободного многозарядного атомного иона. В качестве объектов исследования взяты атом неона (Ne; заряд ядра атома $\mathrm{Z} = 10$; конфигурация и терм основного состояния $[0] = 1s^2 2s^2 2p^6[^1S_0]$) и неоноподобный ион атома железа (Fe^{16+}; $\mathrm{Z} = 26$). Выбор обусловлен сферической симметрией основного состояния Ne и Fe^{16+} и их доступностью в газовой и плазменной фазе (Ne [3], Fe^{16+} [4]) для проведения высокоточных XFEL-экспериментов. Спектры эмиссии многозарядных ионов атома Fe широко востребованы, в частности, в контексте задач современной астрофизики. Насколько нам известно, опубликованные для Fe^{16+} результаты (см., например, [4–7]) относятся к процессам возбуждения (фотоном, электроном) $1s$-, $2s$- и $2p$-оболочек в nl-состояния дискретного спектра ($n \geq 3$, $l = s, p, d$). С повышением уровня спектрального разрешения телескопов [8, 9] следует ожидать экспериментальных исследований спектров рентгеновской эмиссии от горячих астрофизических объектов, возникающих при резонансном Комптоновском рассеянии двух фотонов в области энергий порогов возбуждения (ионизации) глубокой $1s$-оболочки иона Fe^{16+}. Для таких исследований результаты данного Письма носят предсказательный характер.

2. Теория. Рассмотрим процесс резонансного неупругого рассеяния двух фотонов в области энергии порога ионизации $1s$-оболочки иона Fe^{16+}:

$$\omega + \omega + [0] \to Q \to 2p_j^5 \varepsilon(s,d) + \omega_C, \tag{1}$$

$$Q : 1sxp + \omega \to 1sy(s,d). \tag{2}$$

В (1) и далее принята атомная система единиц ($\hbar = e = m_e = 1$), ω (ω_C) – энергия падающего (рассеянного) фотона, $2\omega \geq I_{1s}$, I_{1s} – энергия порога ионизации $1s$-оболочки, $j = 1/2,\ 3/2$ и заполненные оболочки конфигурации атома и атомного иона не указаны. Физическая интерпретация амплитуды вероятности процесса (1) в представлении диаграмм Фейнмана дана на рис. 1. Амплитуда вероятности рассеяния с участием оператора контактного взаимодействия (см. формулу (2) и рис. 1a из [2]) значительна лишь в ближней и узкой (~ 50 эВ) запороговой области рассеяния и в данном Письме не учитывалась. Вклад амплитуд вероятности рассеяния в состояния дискретного спектра $[1s \to np,\ np \to m(s,d),\ n, m \in [3,\infty),\ 2\omega < I_{1s}]$ в энергетических масштабах эмиссионных структур на рис. 2, 3 сосредоточен в узкой допороговой области рассеяния: $I_{1s} - I_{1snp} \leq 6$ (Ne), 505 (Fe^{16+}) эВ, I_{1snp} – энергия $1s \to np$ фотовозбуждения. В данном Письме этот вклад не учитывался. Тогда математическими методами работы [2] в третьем порядке (по α-постоянной тонкой структуры) нерелятивистской квантовой теории возмущений

1)e-mail: amnrnd@mail.ru

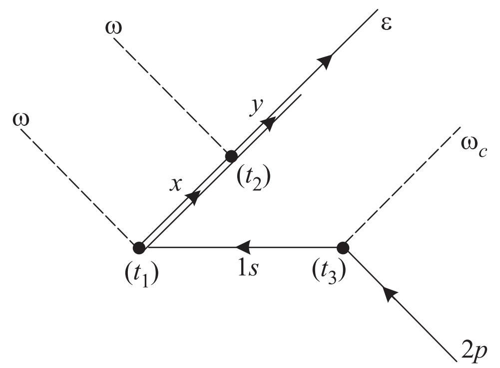

Рис. 1. Амплитуда вероятности процесса резонансного Комптоновского рассеяния двух фотонов неоноподобным атомным ионом в представлении диаграмм Фейнмана. Стрелка вправо – электрон ($x \equiv xp$, $y \equiv \equiv y(s,d)$), стрелка влево – вакансия ($1s, 2p$). Двойная линия – состояние получено в Хартри–Фоковском поле $1s$-вакансии. Черный кружок – вершина взаимодействия по оператору радиационного перехода. $\omega(\omega_C)$ – падающий (рассеянный) фотон, $2\omega \geq I_{1s}$. Направление времени – слева направо ($t_1 < t_2 < t_3$)

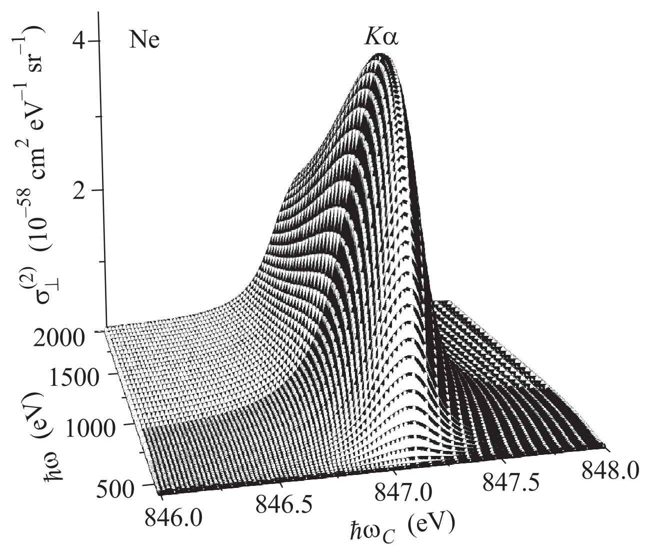

Рис. 2. Дважды дифференциальное сечение процесса резонансного Комптоновского рассеяния двух фотонов атомом Ne в области энергии падающего XFEL-фотона $2\hbar\omega \geq I_{1s}$. $I_{1s} = 870.210$ эВ, $\Gamma_{1s} = 0.271$ эВ, $\delta_{\mathrm{SO}} = 0.124$ эВ

для дважды дифференциального сечения процесса (1) получаем:

$$\frac{d^2\sigma_\perp}{d\omega_C d\Omega_C} \equiv \sigma_\perp^{(2)} = \sum_j \frac{\beta \cdot \omega_C D_j^2}{[(\omega_C - \omega_j)^2 + \gamma_{1s}^2]}, \qquad (3)$$

$$D_j = a_j \omega_j \cdot \left(1 - \frac{I_{1s}}{2\omega}\right) \cdot R, \qquad (4)$$

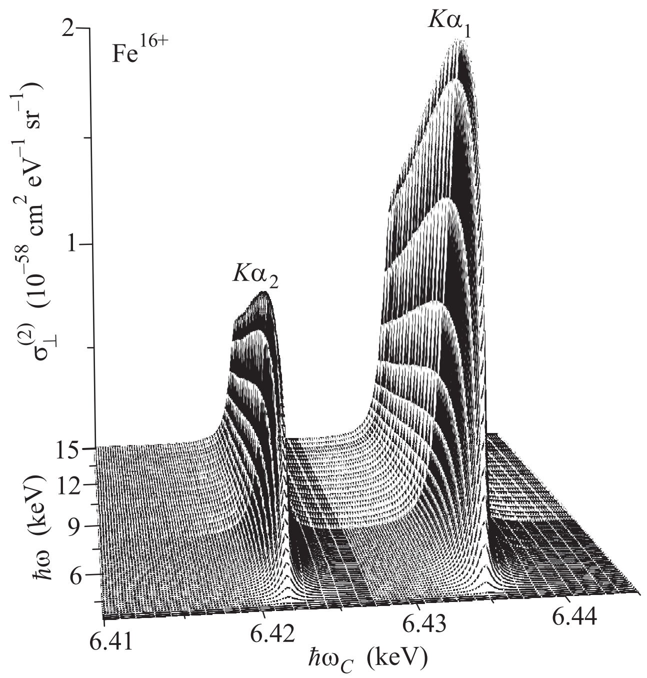

Рис. 3. Дважды дифференциальное сечение процесса резонансного Комптоновского рассеяния двух фотонов атомным ионом Fe^{16+} в области энергии падающего XFEL-фотона $2\hbar\omega \geq I_{1s}$. $I_{1s} = 7698.998$ эВ, $\Gamma_{1s} = 1.046$ эВ, $\delta_{\mathrm{SO}} = 13.120$ эВ

$$R = \langle 1s_0 | r | \in p \rangle \langle 1s_0 | r | 2p_+ \rangle, \qquad (5)$$

$$| \in p \rangle = N_{1s}(| \in p_+ \rangle - \zeta | 2p_+ \rangle), \qquad (6)$$

$$N_{1s} = \langle 1s_0 | 1s_+ \rangle \langle 2s_0 | 2s_+ \rangle^2 \langle 2p_0 | 2p_+ \rangle^6, \qquad (7)$$

$$\zeta = \frac{\langle 2p_0 | \in p_+ \rangle}{\langle 2p_0 | 2p_+ \rangle}. \qquad (8)$$

В (3)–(8) определено: $\beta = 1.592 \cdot 10^{-64}$, $a_j = \sqrt{2}$ ($j = 3/2$), 1 ($j = 1/2$), Ω_C – пространственный угол вылета рассеянного фотона, энергии $K\alpha_1(j = = 3/2)$- и $K\alpha_2(j = 1/2)$-резонансов спектра эмиссии $\omega_j = I_{1s} - I_{2p_j}$, I_{2p_j} – энергия порога ионизации $2p_j$-оболочки, $\in = 2\omega - I_{1s}$ ($\in = \varepsilon$ на рис. 1 при $\omega_C = \omega_j$), $\gamma_{1s} = \Gamma_{1s}/2$ и Γ_{1s} – естественная (полная) ширина распада $1s$-вакансии. Структура корреляционной функции (6) учитывает эффект радиальной релаксации состояний рассеяния в поле $1s$-вакансии. Радиальные части волновых функций l_0 (l_+)-электронов получены решением уравнений самосогласованного поля Хартри–Фока для [0] ($1s_+$)-конфигураций атома и атомного иона. При этом принято приближение $\langle yl_+ | \varepsilon l_\bullet \rangle \cong \delta(y - \varepsilon)$, где δ – дельта-функция Дирака и радиальные части волновых функций $l_\bullet$-электронов ($l = s, d$) сплошного спектра получены в хартри-фоковском поле $2p_j$-вакансии. Символ “$\perp$”

соответствует выбору схемы предполагаемого XFEL-эксперимента: векторы поляризации (линейно поляризованных) падающих (и сонаправленных) и рассеянного фотонов перпендикулярны плоскости рассеяния. Плоскость рассеяния определена как плоскость, проходящая через волновые векторы падающих и рассеянного фотонов. В принятом нами (см. также [2]) дипольном приближении для оператора радиационного перехода сечение рассеяния (3) не зависит от угла рассеяния (угол между волновыми векторами падающего и рассеянного фотонов): $\sigma_{\perp}^{(2)} \to \sigma_{\perp}^{(1)}/4\pi$, $\sigma_{\perp}^{(1)} \equiv d\sigma_{\perp}/d\omega_C$ (изотропное рассеяние).

3. Результаты и обсуждение. Результаты расчета представлены на рис. 2, 3. Для параметров сечения рассеяния (3) приняты значения Γ_{1s} (эВ) = 0.271 (Ne [10]), 1.046 (Fe^{16+} [11]), I_{1s} (эВ) = 870.210 (Ne [12]), 7698.998 (Fe^{16+}, релятивистский расчет данной работы), I_{2p_j} (эВ) = 23.207 ($j = 1/2$), 23.083 ($j = 3/2$) для Ne [13] и 1277.161 ($j = 1/2$), 1264.041 ($j = 3/2$) для Fe^{16+} [13, 14].

Согласно результатам на рис. 2, 3, переход от Ne к Fe^{16+} сопровождается, прежде всего, двумя эффектами. Первый – практически двукратным уменьшением сечения рассеяния (3). При этом, значительное уменьшение радиального параметра R из (5) $[R\,(Fe^{16+})/R\,(Ne) \cong 0.05$ при $\in\, \cong 0]$, обусловленное эффектом локализации волновой функции $1s$-электрона [средний радиус $1s$-оболочки $r_{1s}\,(Fe^{16+}) \cong$ $\cong 0.03\,\text{Å} < r_{1s}\,(Ne) \cong 0.08\,\text{Å}$], отчасти компенсируется увеличением энергетических параметров ω, ω_j и I_{1s}. Второй – увеличением константы спин-орбитального расщепления $2p_{1/2,3/2}$-оболочки ($\delta_{SO} = \omega_{3/2} - \omega_{1/2}$) практически на два порядка. При этом аналитическая зависимость δ_{SO} от заряда ядра атомного иона в водородоподобном приближении ($\delta_{SO} \sim Z^4$) [15] для неоноподобного иона существенно модифицируется. В самом деле, интерполируя теоретические данные работы [13] для Ne, Ar^{8+} и Fe^{16+}, получаем $\delta_{SO} \sim (1 + 2.7 \cdot Z^{-1})Z^5$.

Дадим количественную оценку абсолютного значения наблюдаемого сечения рассеяния (3). В случае иона Fe^{16+} для планируемой в ближайшие годы средней яркости (число фотонов в XFEL-пульсе) излучения $N = 10^{20}$ [1] при, например, $\omega = 9$ кэВ, $\omega_C = 6.435$ кэВ ($K\alpha_1$-резонанс эмиссии) и спектральном разрешении XFEL-эксперимента $\Gamma_{\text{beam}} = 1$ эВ получаем вполне доступное для измерения значение сечения рассеяния $C_N^2\sigma_{\perp}^{(2)} \cong 1$ (Мб $\cdot$ эВ$^{-1}$ $\cdot$ ср.$^{-1}$), где C_N^2 – биномиальный коэффициент.

4. Заключение. Теоретически исследовано дважды дифференциальное сечение резонансного Комптоновского рассеяния двух рентгеновских фотонов в области энергии порога ионизации глубокой $1s$-оболочки свободного многозарядного атомного иона. Оценка абсолютного значения сечения рассеяния указывает на возможность экспериментального обнаружения предсказываемых $K\alpha_{1,2}$-эмиссионных структур при ожидаемом в ближайшем будущем уровне яркости XFEL-излучения. Предсказываемые для иона Fe^{16+} результаты дополняют (а) теоретические результаты работы [16] для дважды дифференциального сечения резонансного неупругого контактного рассеяния одного рентгеновского фотона ионом Fe^{16} вне области образования эмиссионных структур ($\omega \cong 11.46$ кэВ, $\omega_C \cong 3.80 \div 4.40$ кэВ) и (б) существующие результаты для спектральных характеристик иона Fe^{16+} в контексте задач современной астрофизики. Результаты для атома Ne практически воспроизводят относительные величины и энергетическую структуру $K\alpha_{1,2}$-спектра рентгеновской эмиссии, измеренного в работах [3, 17], а также дополняют теоретические результаты работы [18] для дважды дифференциального сечения резонансного Комптоновского рассеяния одного рентгеновского фотона атомом Ne в области основной $K\alpha_{1,2}$- и сателлитной $K\alpha_{3,4}$-структур спектра эмиссии.

1. M. Yabashi and H. Tanaka, Nat. Photon. **11**, 12 (2017).
2. A. N. Hopersky, A. M. Nadolinsky, and S. A. Novikov, Phys. Rev. A **98**, 063424 (2018).
3. R. Obaid, Ch. Buth, G. L. Dakovski, 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).
4. S. Bernitt, G. V. Brown, J. K. Rudolph et al. (Collaboration), Nature (London) **492**, 225 (2012).
5. C. Mendoza, T. R. Kahlman, M. A. Bautista, and P. Palmeri, Astron. Astrophys. **414**, 377 (2004).
6. L. Gu, A. J. J. Raassen, J. Mao, J. de Plaa, Ch. Shah, C. Pinto, N. Werner, A. Simionescu, F. Mernier, and J. S. Kaastra, arXiv: 1905.07871 [astro-ph.HE].
7. P. Beiersdorfer, M. Bitter, S. von Goeler, and K. W. Hill, Astrophys. J. **610**, 616 (2004).
8. K. Mitsuda, R. L. Kelley, H. Akamatsu et al. (ASTRO-H Collaboration), Proc. of SPIE **9144**, 91442 A (2014).
9. F. A. Aharonian, H. Akamatsu, F. Akimoto et al. (Hitomi Collaboration), Nature (London) **535**, 117 (2016).
10. 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).
11. M. H. Chen, B. Crasemann, Kh. R. Karim, and H. Mark, Phys. Rev. A **24**, 1845 (1981).

12. L. Pettersson, J. Nordgren, L. Selander, C. Nordling, and K. Siegban, J. Electr. Spectr. Rel. Phenom. **27**, 29 (1982).
13. M. Nrisimhamurty, G. Aravind, P. C. Deshmukh, and S. T. Manson, Phys. Rev. A **91**, 013404 (2015).
14. N. Haque, H. S. Chakraborty, P. C. Deshmukh, S. T. Manson, A. Z. Msezane, N. C. Deb, Z. Felfli, and T. W. Gorczyca, Phys. Rev. A **60**, 4577 (1999).
15. I. I. Sobel'man, *An Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Pergamon Press, Oxford (1972).
16. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, В. А. Явна, ЖЭТФ **130**, 579 (2006).
17. O. Keski-Rahkonen, Phys. Scripta **7**, 173 (1973).
18. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, В. А. Явна, ЖЭТФ **128**, 698 (2005).