ЖЭТФ, 2020, том 158, вып. 6 (12), стр. 1032–1038

ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ КОМПТОНОВСКОМ РАССЕЯНИИ ФОТОНА АТОМОМ

А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский[*], *И. Д. Петров, Р. В. Конеев*

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

Поступила в редакцию 4 июня 2020 г.,
после переработки 24 июня 2020 г.
Принята к публикации 25 июня 2020 г.

Теоретически предсказаны лидирующая роль и эффект угловой анизотропии тормозного излучения при резонансном комптоновском рассеянии жесткого рентгеновского фотона атомом.

DOI: 10.31857/S0044451020120020

1. ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальному и теоретическому исследованию одного из фундаментальных в микромире процессов резонансного комптоновского рассеяния фотона атомом в области энергий порогов ионизации его глубоких оболочек посвящено большое количество работ (см., например, [1, 2] и ссылки там). В работе авторов [3] формально математически полный нерелятивистский вариант квантовой теории этого процесса [1] впервые конкретизирован на случай учета амплитуды вероятности тормозного излучения в жестком рентгеновском диапазоне конечных состояний рассеяния. Как результат, установлено, что при энергиях падающего на атом фотона, намного превышающих энергию порога ионизации глубокой оболочки, эффект тормозного излучения доминирует над эффектом рентгеновской $K\alpha$-эмиссии. В данной работе мы дополняем результаты [3] теоретическим предсказанием и анализом эффекта угловой анизотропии тормозного излучения и даем более детальное изложение теории процесса. В качестве объекта исследования взят атом неона (Ne; заряд ядра $Z = 10$, конфигурация и терм основного состояния $[0] = 1s^2 2s^2 2p^6 \left[{}^1S_0\right]$). Выбор объекта исследования обусловлен сферической симметрией основного состояния Ne и его доступностью в газовой фазе для проведения высокоточных экспериментов, например, с рентгеновским лазером на свободных электронах [4]. Следует ожидать, что полученные результаты будут востребованы, в частности, при интерпретации $K\alpha, \beta$-спектров рентгеновской эмиссии от горячих астрофизических объектов (см., например, [5]).

2. ТЕОРИЯ

Рассмотрим процесс резонансного комптоновского рассеяния фотона атомом Ne:

$$\omega + [0] \to Q\left({}^1P_1\right) \to 2p_j^5 \varepsilon p\left({}^1S_0, {}^1D_2\right) + \omega_C, \qquad (1)$$

$$Q\left({}^1P_1\right): \quad 1sxp, 2p_j^5 x\,(s, d)\,. \qquad (2)$$

В (1) и ниже принята атомная система единиц ($\hbar = e = m_e = 1$), $\omega\,(\omega_C)$ — энергия падающего (рассеянного) фотона, $\omega \geqslant I_{1s}$ (энергия порога ионизации $1s$-оболочки), $x\,(\varepsilon)$ — энергия электрона сплошного спектра промежуточного (конечного) состояния рассеяния, $j = 1/2, 3/2$, Q — промежуточные (виртуальные) состояния ионизации атома, ${}^1S_0$, ${}^1P_1$, ${}^1D_2$ — результирующие термы состояний рассеяния, заполненные оболочки конфигураций атома не указаны. Формально определенный терм ${}^1P_1$ конечного состояния рассеяния исключается требованием инвариантности интеграла Гаунта [6] при преобразовании инверсии (сохранение четности фиксированного состояния перехода [7]).

Амплитуда вероятности процесса (1) рассмотрена нами в одноконфигурационном приближении Хартри – Фока для полных волновых функций состояний рассеяния. Учитываемые парциальные амплитуды вероятности рассеяния в представлении

[*] E-mail: amnrnd@mail.ru

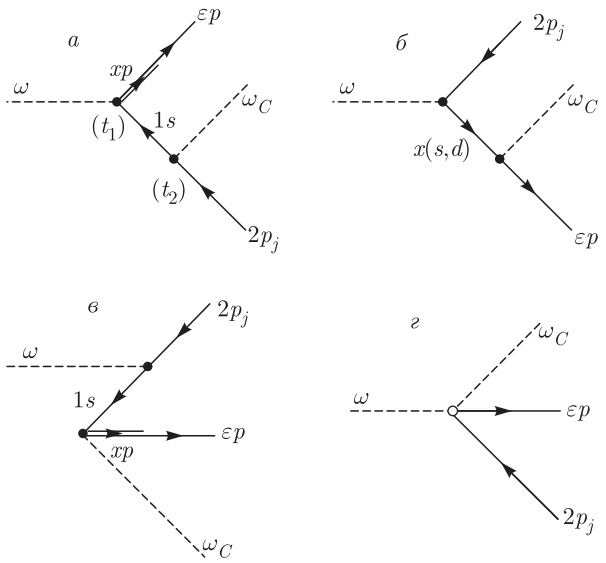

Рис. 1. Амплитуда вероятности процесса резонансного комптоновского рассеяния фотона многоэлектронным атомом (Ne) в представлении диаграмм Фейнмана: *а* — амплитуда вероятности $K\alpha$-эмиссии, *б* — амплитуда вероятности тормозного излучения, *в* — амплитуда вероятности спонтанного возбуждения основного состояния атома, *г* — амплитуда вероятности контактного рассеяния. Стрелка вправо — электрон сплошного спектра, стрелка влево — вакансия ($1s, 2p,\ j = 1/2, 3/2$). Двойная линия — состояние получено в хартри-фоковском поле $1s$-вакансии. Черный (светлый) кружок — вершина взаимодействия по оператору радиационного (контактного) перехода. $\omega\,(\omega_C)$ — падающий (рассеянный) фотон, $\omega \geqslant I_{1s}$. Направление времени — слева направо ($t_1 < t_2$)

диаграмм Фейнмана даны на рис. 1*а,б*. Для описания амплитуды вероятности перехода (1) принят второй порядок теории возмущений по постоянной тонкой структуры. При этом по аналогии с приближением Тамма–Данкова [8, 9] (вне рамок теории возмущений предположение об исчезающе малом вкладе в полную амплитуду вероятности рассеяния состояний с числом виртуальных частиц, превышающим фиксированное значение m_0) учтены лишь амплитуды вероятности рассеяния с не превышающим фиксированного значения числом фотонов, электронов и вакансий в рассечениях соответствующих диаграмм Фейнмана $m_0 = 2$. Например, амплитуда вероятности рассеяния через спонтанное возбуждение основного состояния атома (рождение $1s$-вакансии, xp-электрона сплошного спектра энергий и рассеянного фотона до момента времени поглощения падающего фотона) на рис. 1*в* отброшена в силу неравенства $m = 4 > m_0$. Амплитуда вероятности рассеяния по оператору нелинейного (квадратичного по электромагнитному полю) контактного взаимодействия (рис. 1*г*) не учитывалась, поскольку в исследуемых областях энергий падающего и рассеянного фотонов она на порядок (и более) меньше амплитуд вероятности рассеяния из (1).

Конкретизируем аналитическую структуру амплитуд вероятности процессов эмиссии (рис. 1*а*)

$$A = \int\limits_0^\infty dx\, \frac{\left\langle 0\middle|\hat{R}\middle|X_S\right\rangle \left\langle X_S\middle|\hat{R}\middle|X_P\right\rangle}{\omega - I_{1s} - x + i\gamma_{1s}} \tag{3}$$

и тормозного излучения (рис. 1*б*)

$$B_l = \int\limits_0^\infty dx\, \frac{\left\langle 0\middle|\hat{R}\middle|\Phi_l\right\rangle \left\langle \Phi_l\middle|\hat{R}\middle|X_P\right\rangle}{\omega - I_{2p_j} - x + i\gamma_{2p_j}} \tag{4}$$

по оператору радиационного перехода в дипольном приближении

$$\hat{R} = -\frac{1}{c}\sum_{n=1}^{N}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\rho=1,2}(\mathbf{p}_n\cdot e_{\mathbf{k}\rho})\left(a^\dagger_{\mathbf{k}\rho} + a^-_{\mathbf{k}\rho}\right). \tag{5}$$

В (5) c — скорость света в вакууме, N — число электронов в атоме, сделана замена $\exp\left[\pm i\left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n\right)\right] \to 1$, $\mathbf{p}_n$ ($\mathbf{r}_n$) — векторный оператор импульса (радиус-вектор) n-электрона атома, $e_{\mathbf{k}\rho}$ — единичный вектор поляризации, $\mathbf{k}$ — волновой вектор, $a^\dagger_{\mathbf{k}\rho}$ ($a^-_{\mathbf{k}\rho}$) — оператор рождения (уничтожения) фотона. В (3) и (4) $I_{1s}(I_{2p_j})$ — энергия порога ионизации, γ_{1s} (γ_{2p_j}) — естественная полуширина распада $1s$ ($2p_j$)-вакансии и определены полные волновые функции состояний рассеяния:

$$|0\rangle = |\omega\rangle \otimes \left|0, {}^1S_0\right\rangle, \tag{6}$$

$$|X_S\rangle = |0_f\rangle \otimes \left|1sxp, {}^1P_1, M'\right\rangle, \tag{7}$$

$$|\Phi_l\rangle = |0_f\rangle \otimes \left|2p_j^5 xl, {}^1P_1, M'\right\rangle, l = 0, 2, \tag{8}$$

$$|X_P\rangle = |\omega_C\rangle \otimes \left|2p_j^5\varepsilon p, LSJ, M'\right\rangle, \tag{9}$$

где $|0_f\rangle$ — волновая функция фотонного вакуума, $|\omega\rangle$ ($|\omega_C\rangle$) — волновая функция падающего (рассеянного) фотона в представлении вторичного квантования, проекция полного момента ($J' = 1$) промежуточного состояния рассеяния $M' = -1, 0, 1$, $LSJ = {}^1S_0$, ${}^1D_2$ и M — проекция полного момента J конечного состояния рассеяния.

На примере матричного элемента $\left\langle 0\middle|\hat{R}\middle|X_S\right\rangle$ изложим способ получения матричных элементов в (3) и (4) методами алгебры операторов рождения (уничтожения) фотонов и теории неприводимых тензор-

ных операторов [10, 11]. Учитывая матричные элементы операторов рождения и уничтожения и формулы (5)–(7), имеем

$$\left\langle 0\middle|\hat{R}\middle|X_S\right\rangle = -\left(\frac{2\pi}{V\omega}\right)^{1/2} \times \\ \times \left\langle 0, {}^1S_0\middle|\left(e_1\cdot\hat{P}\right)\middle|1sxp, {}^1P_1, M'\right\rangle, \quad (10)$$

где V — объем квантования электромагнитного поля, e_1 — единичный вектор поляризации падающего фотона и

$$\hat{P} = \sum_{n=1}^{N} \mathbf{p}_n \quad (11)$$

— оператор радиационного перехода в форме скорости. С целью работы с простейшей математической формой оператора радиационного перехода (форма радиуса) учтем связь

$$\left\langle \gamma\middle|\hat{P}\middle|\gamma'\right\rangle = i\left(E_\gamma - E_{\gamma'}\right)\left\langle \gamma\middle|\hat{D}\middle|\gamma'\right\rangle, \quad (12)$$

$$\hat{D} = \sum_{n=1}^{N} \mathbf{r}_n, \quad (13)$$

где E — полные энергии состояний перехода. При этом известное расхождение форм радиуса и скорости в одноконфигурационном приближении Хартри – Фока [12] может быть снято, например, переходом к многоконфигурационному приближению Хартри – Фока при описании полных волновых функций состояний рассеяния. Решение этой задачи является предметом будущих исследований. Рассмотрим представление скалярного произведения разложением по сферическим функциям,

$$e_1\cdot\mathbf{r}_n = \sum_{m=-1}^{1} (-1)^m C^{(1)}_{-m}(e_1)\, C^{(1)}_{m}(e_n)\, r_n, \quad (14)$$

и определим оператор дипольного перехода m-мультипольности как

$$Q^{(1)}_m = \sum_{n=1}^{N} C^{(1)}_m(e_n)\, r_n, \quad (15)$$

где e_n — единичный вектор в направлении $\mathbf{r}_n$ и $r_n = |\mathbf{r}_n|$. Тогда, учитывая теорему Вигнера – Эккарта для матричного элемента оператора (15) из (10), получаем

$$\left\langle 0\middle|\hat{R}\middle|X_S\right\rangle = -2i\left(\frac{\pi}{3V\omega}\right)^{1/2}(x + I_{1s}) \times \\ \times C^{(1)}_{M'}(e_1)\,\langle 1s|r|xp\rangle. \quad (16)$$

Вычисляя оставшиеся матричные элементы в (3) и (4), для полной амплитуды вероятности рассеяния с фиксированными M'-, M-проекциями и LSJ-термом в (7)–(9) получаем

$$A + \sum_l B_l = -\frac{2\sqrt{2}\pi}{V\sqrt{3\omega\omega_C}}\Psi_{JMM'}K, \quad (17)$$

$$\Psi_{JMM'} = C^{(1)}_{M'}(e_1)\sum_{\rho=-1}^{1}(-1)^{\rho+1-M'}\, C^{(1)}_{-\rho}(e_2) \times \\ \times \begin{pmatrix} 1 & 1 & J \\ -M' & \rho & M \end{pmatrix}, \quad (18)$$

$$K = \frac{K_1}{\Delta_1 + i\gamma_{1s}} + \sum_l \frac{K_2}{\Delta_2 + i\gamma_{2p}}, \quad (19)$$

$$K_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\alpha\omega_j\left(\varepsilon + I_{1s}\right)\langle 1s|r|\varepsilon p\rangle\,\langle 1s|r|2p\rangle, \quad (20)$$

$$K_2 = 2i\beta_l\varepsilon\left(\varepsilon + I_{2p}\right)\langle 2p|r|\varepsilon l\rangle, \quad (21)$$

$$LSJ = {}^1S_0:\ \alpha = 1, \quad \beta_0 = 1/3, \quad \beta_2 = 2/3, \quad (22)$$

$$LSJ = {}^1D_2:\ \alpha = \sqrt{5}, \\ \beta_0 = \sqrt{5/3}, \quad \beta_2 = 1/\sqrt{15}, \quad (23)$$

$\Delta_1 = \omega - \varepsilon - I_{1s}$, $\Delta_2 = \omega - \varepsilon - I_{2p_j}$, $\omega_j = I_{1s} - I_{2p_j}$ и e_2 — единичный вектор поляризации рассеянного фотона.

При расчете сингулярных интегралов $\langle xp|\varepsilon p\rangle$ и $\langle xl|r|\varepsilon p\rangle$ для радиальных частей волновых функций электронов сплошного спектра принято приближение плоских волн: $|x\rangle \cong \sin\left(r\sqrt{2x}\right)$. Радиальные части волновых функций электронов сплошного спектра в интегралах $\langle 1s|r|\varepsilon p\rangle$ и $\langle 2p|r|\varepsilon l\rangle$ получены решением уравнений Хартри – Фока для соответствующих конфигураций однократных ионов.

Функция (18) определяет зависимость дважды дифференциального сечения процесса (1) (см. ниже) от угла рассеяния θ (угол между волновыми векторами падающего и рассеянного фотонов). В самом деле, суммирование (18) по $M' = -1, 0, 1$ — проекциям полного момента промежуточных состояний (2) для терма ${}^1S_0$ конечного состояния рассеяния — согласно теореме сложения сферических функций приводит к анизотропии амплитуды вероятности рассеяния через появление полинома Лежандра первого порядка:

$$P_1\left(e_1\ \cdot e_2\right) = \sum_{M'}(-1)^{M'}\, C^{(1)}_{M'}(e_1)\, C^{(1)}_{-M'}(e_2). \quad (24)$$

Для терма $^1D_2$ конечного состояния рассеяния при кратном суммировании («*» — символ комплексного сопряжения)

$$\sum_M \left(\sum_{M'} \Psi_{2MM'} \right) \left(\sum_{M''} \Psi^*_{2MM''} \right) \tag{25}$$

с учетом условия ортогональности $3j$-символов Вигнера и теоремы сложения сферических функций в сечении рассеяния возникают как изотропный, так и анизотропный вклады. Как и следовало ожидать, взаимная компенсация соответствующих радиационному распаду сферически-симметричного состояния $1s$-вакансии ($1s \to 2p_j + \omega_C$) формально анизотропных вкладов от термов $^1S_0$ и $^1D_2$ восстанавливает изотропию вероятности эмиссии. Таким образом, анизотропия по углу рассеяния в процессе (1) возникает лишь по вероятности тормозного излучения ($xl \to \varepsilon p + \omega_C$) через рождение виртуальных $2p_j^5 xl$-состояний ионизации атома.

Установим аналитическую структуру дважды дифференциального сечения процесса (1). Реализуем «золотое правило» Ферми в приближении нулевой ширины распада валентной $2p_j$-вакансии ($\gamma_{2p} \to 0$):

$$d^3\sigma_j = \frac{2\pi V}{cn} \left|F_j\right|^2 \delta\left(\varepsilon - \varepsilon_j\right) d^2 f d\varepsilon, \tag{26}$$

$$d^2 f = \frac{V}{(2\pi c)^3} \omega_C^2 d\omega_C d\Omega_C, \tag{27}$$

где число падающих на атом фотонов $n = 1$, $\left|F_j\right|^2$ — квадрат полной амплитуды вероятности процесса (1), $\varepsilon_j = \omega - \omega_C - I_{2p_j}$, Ω_C — пространственный угол вылета рассеянного фотона. Тогда, учитывая (17), суммируя по $j = 1/2, 3/2$ и интегрируя по энергии ε электрона сплошного спектра конечного состояния рассеяния, для полного (сумма по термам $^1S_0$ и $^1D_2$) дважды дифференциального сечения процесса (1) из (26) получаем

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega_C d\Omega_C} \equiv \sigma^{(2)} = \left(\frac{r_0}{3}\right)^2 \frac{\omega_C}{\omega} \sum_j \eta_j M_j, \tag{28}$$

$$M_j = \frac{\alpha_j \left(\alpha_j + \gamma_{1s} \Lambda_j A_j\right)}{\left(\omega_C - \omega_j\right)^2 + \gamma_{1s}^2} + B_j \Lambda_j^2, \tag{29}$$

$$\alpha_j = 0.816 \left\langle 1s_0 | r | 2p_+ \right\rangle \left\langle 1s_0 | r | \epsilon_j p \right\rangle \omega_j \left(\varepsilon_j + I_{1s}\right), \tag{30}$$

$$A_j = a_1 s_j + a_2 d_j, \tag{31}$$

$$B_j = b_1 s_j^2 + b_2 s_j d_j + b_3 d_j^2, \tag{32}$$

$$a_1 = 3.266 - 0.460\mu, \tag{33}$$

$$a_2 = 0.652 + 1.040\mu, \tag{34}$$

$$b_1 = 2.667 - 0.592\mu, \tag{35}$$

$$b_2 = 1.067 - 0.830\mu, \tag{36}$$

$$b_3 = 0.107 + 1.150\mu, \tag{37}$$

$$\Lambda_j = \varepsilon_j \left(\frac{\omega}{\omega_C} - 1\right), \tag{38}$$

где r_0 — классический радиус электрона и параметр $\eta_j = 2$ ($j = 3/2$), 1 ($j = 1/2$) воспроизводит коэффициент ветвления $k = \left(2j_+ + 1\right) / \left(2j_- + 1\right)$, $j_\pm = l \pm 1/2$ при фотоионизации nl_j^{4l+2}-оболочки атома. Структурно сечение (28) представлено тремя слагаемыми: резонансное (при $\omega_C \to \omega_j$) слагаемое $\propto a_j^2$ соответствует эффекту эмиссии, резонансное слагаемое $\propto a_j A_j$ соответствует интерференции эффектов эмиссии и тормозного излучения и нерезонансное (фоновое) слагаемое $\propto B_j$ соответствует эффекту тормозного излучения.

В одноэлектронной амплитуде вероятности рождения $1s$-вакансии из (30) структура корреляционной функции

$$\left|\epsilon_j p\right\rangle = N_{1s} \left(\left|\varepsilon p_+\right\rangle - \left|2p_+\right\rangle \frac{\left\langle 2p_0 | \varepsilon_j p_+ \right\rangle}{\left\langle 2p_0 | 2p_+ \right\rangle} \right), \tag{39}$$

$$N_{1s} = \left\langle 1s_0 | 1s_+ \right\rangle \left\langle 2s_0 | 2s_+ \right\rangle^2 \left\langle 2p_0 | 2p_+ \right\rangle^6, \tag{40}$$

определена методами теории неортогональных орбиталей [13] и учитывает эффект радиальной релаксации состояний рассеяния в поле $1s$-вакансии. Индексы «0» и «+» определены для радиальных частей волновых функций электронов, полученных решением уравнений Хартри – Фока для конфигураций начального состояния атома ([0]) и однократного иона ($1s_+$) соответственно. Радиальные части волновых функций электронов атомного остатка и сплошного спектра в одноэлектронных амплитудах вероятности рождения $2p_j$-вакансии из (31) и (32)

$$s_j = \left\langle 2p_0 | r | \epsilon_j s \right\rangle, \tag{41}$$

$$\left|\epsilon_j s\right\rangle = N_{2p} \left(\left|\varepsilon_j s_\bullet\right\rangle - \left|2s_\bullet\right\rangle \frac{\left\langle 2s_0 | \varepsilon_j s_\bullet \right\rangle}{\left\langle 2s_0 | 2s_\bullet \right\rangle} \right), \tag{42}$$

$$N_{2p} = \left\langle 1s_0 | 1s_\bullet \right\rangle^2 \left\langle 2s_0 | 2s_\bullet \right\rangle^2 \left\langle 2p_0 | 2p_\bullet \right\rangle^5, \tag{43}$$

$$d_j = N_{2p} \left\langle 2p_0 | r | \varepsilon_j d_\bullet \right\rangle, \tag{44}$$

получены в хартри-фоковском поле $2p$-вакансии (конфигурация $2p_\bullet^5$).

В (33)–(37) с учетом (24) определен аксиально-симметричный (относительно направления вол-

нового вектора падающего фотона) параметр угловой анизотропии тормозного излучения:

$$\mu = P_1^2\,(e_1 \cdot e_2) = (e_1 \cdot e_2)^2\,, \quad \mu \in [0,1]\,. \qquad (45)$$

Параметр μ возникает для термов $^1S_0$ и $^1D_2$. Однако первые слагаемые в коэффициентах (33)–(37) соответствуют лишь изотропному вкладу терма $^1D_2$ в вероятность тормозного излучения. Для экспериментов с линейно поляризованными перпендикулярно ($e_1^{\perp} \cdot e_2^{\perp} = \pm 1$) и параллельно ($e_1^{\parallel} \cdot e_2^{\parallel} = \cos\theta$) плоскости рассеяния фотонами из (45) следует

$$\mu = 1(\perp),\ \cos^2\theta(\parallel). \qquad (46)$$

Плоскость рассеяния определена как плоскость, проходящая через волновые векторы падающего и рассеянного фотонов. Суммируя (28) по поляризациям (46) в конечном и усредняя по поляризациям в начальном состояниях рассеяния, получаем

$$\mu = \frac{1}{2}\left(1 + \cos^2\theta\right) \qquad (47)$$

для эксперимента с неполяризованными фотонами.

Параметр Λ_j из (38) в приближении $\gamma_{2p} \to 0$ воспроизводит так называемую «инфракрасную расходимость» [1, 2] сечения рассеяния:

$$\lim_{\omega_C \to 0} \Lambda_j = \infty \ \Rightarrow\ \lim_{\omega_C \to 0} \sigma^{(2)} = \infty. \qquad (48)$$

Вне приближения нулевой ширины распада валентной $2p_j$-вакансии ($\gamma_{2p} > 0$) вместо (38) имеем

$$\Lambda_j \to \frac{\Lambda_j}{1 + i\,(\gamma_{2p}/\omega_C)} \qquad (49)$$

и формально математически «инфракрасная расходимость» отсутствует. При $\omega_C \to \omega$ (нефизический предел) параметр $\Lambda_j \to 0$ и тормозное излучение «выключается» (наряду с эффектом эмиссии), что воспроизводит закон сохранения энергии ($\varepsilon_j \geqslant 0$) в процессе (1).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты расчетов представлены на рис. 2, 3. Для параметров сечения рассеяния (28) приняты значения (в эВ) $I_{1s} = 870.210$ [14], $\Gamma_{1s} = 2\gamma_{1s} = 0.271$ [15] и $I_{2p_j} = 23.207$ ($j = 1/2$), 23.083 ($j = 3/2$) [16].

Результаты на рис. 2 показывают следующее. При увеличении энергии падающего фотона от 5.72 кэВ до $\omega \gg I_{1s}$ основной вклад в сечение рассеяния в области резонанса $\omega_C \cong \omega_j$ дают эффект тормозного излучения (рис.1*б*) и его интерференция с

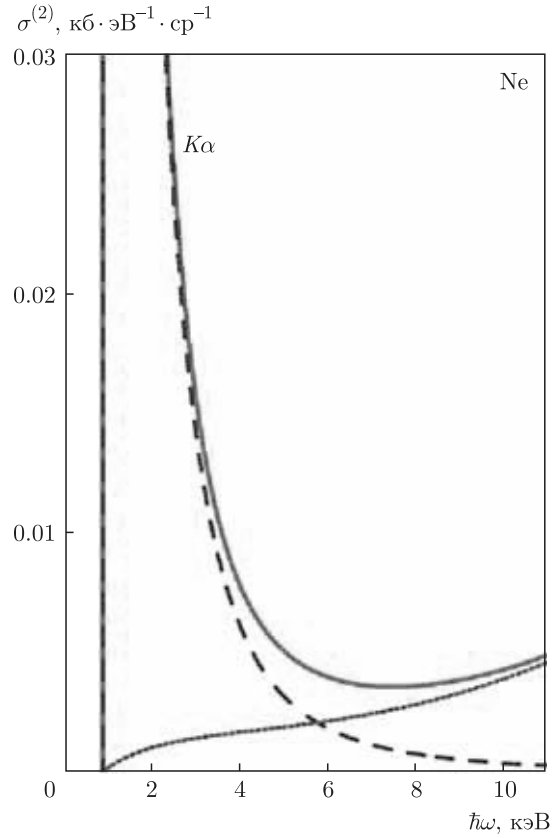

Рис. 2. Дважды дифференциальное сечение процесса резонансного комптоновского рассеяния фотона атомом Ne для $\perp$-схемы эксперимента ($\mu = 1$) в области $\hbar\omega \in (I_{1s}; 11)$ кэВ: $\hbar\omega_C = 847.1$ эВ (резонанс $K\alpha$-эмиссии), штриховая кривая — учтена лишь диаграмма рис. 1*а*, пунктирная кривая — учтена лишь диаграмма рис. 1*б* и ее интерференция с диаграммой рис. 1*а*, сплошная кривая — суммарное сечение. Значения параметров I_{1s}, Γ_{1s} и I_{2p_j} ($j = 1/2, 3/2$) см. в тексте

эффектом эмиссии (рис. 1*а*). Вне области резонанса вклад эффекта тормозного излучения в сечение рассеяния становится доминирующим [3]. С формально математической точки зрения этот результат обусловлен, прежде всего, появлением в амплитуде вероятности тормозного излучения быстро возрастающего с увеличением ω параметра (38): $\Lambda_j \cong \omega^2/\omega_C$ и $\Lambda_j \to \infty$ при $\omega \to \infty$.

При численном исследовании угловой анизотропии тормозного излучения мы ограничились областью спектра рассеяния, где эффект эмиссии и его интерференция с эффектом тормозного излучения практически подавлены энергетическим знаменателем $\left[(\omega_C - \omega_j)^2 + \gamma_{1s}^2\right]^{-1}$ в (29): $M_j \cong B_j \Lambda_j^2$. Результаты расчетов представлены на рис. 3. Переход от рис. 3*а* к рис. 3*б* демонстрирует следующее. Для

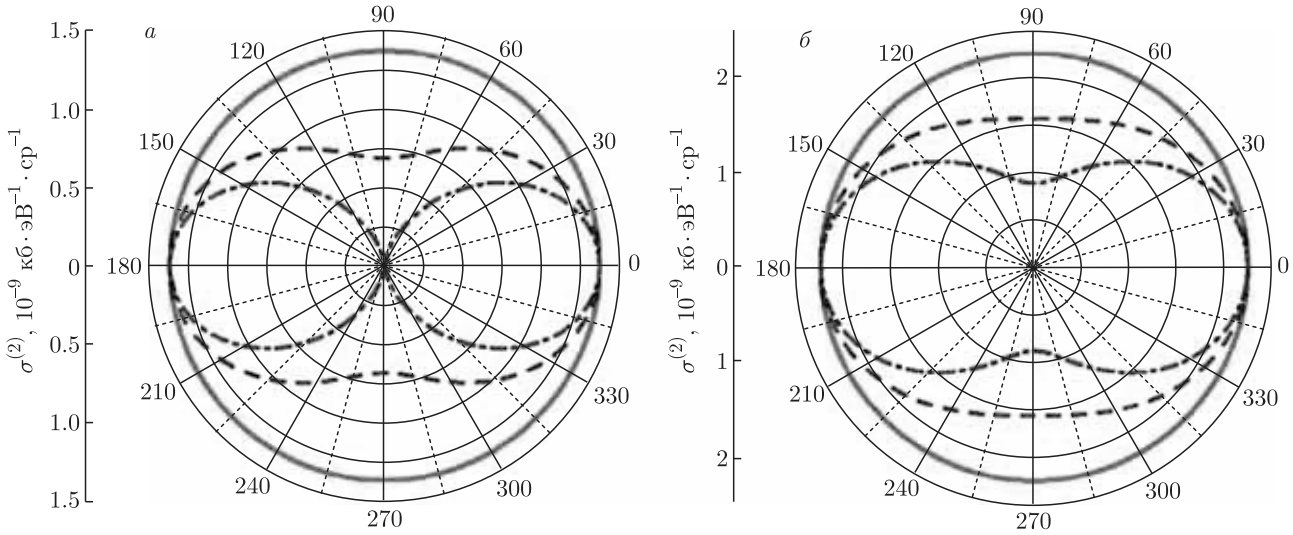

Рис. 3. Индикатрисы рассеяния для атома Ne с полярным радиусом $\rho = \sigma^{(2)}$ и полярным углом θ при фиксированных значениях энергий падающего ($\hbar\omega = 2000$ эВ) и рассеянного ($\hbar\omega_C = 1907$ эВ) фотонов. *а* (*б*) — не учтена (учтена) изотропная часть вклада терма $^1D_2$ в сечение рассеяния. Схема эксперимента: $\perp$ (сплошные кривые), $\parallel$ (штрихпунктирные кривые), неполяризованные фотоны (штриховые кривые). Значения параметров I_{1s}, Γ_{1s}, и I_{2p_j} ($j = 1/2, 3/2$) см. в тексте

соответствующих схем эксперимента учет изотропной части вклада терма $^1D_2$ (угловые коэффициенты в (35), (36) и (37) при $\mu = 0$) в сечение рассеяния приводит к заметному уменьшению степени анизотропии тормозного излучения в окрестности углов рассеяния $\theta = \pm 90°$. В самом деле, для любых энергий падающего и рассеянного фотонов коэффициент участия s-симметрии электрона сплошного спектра в (35) превосходит коэффициент участия d-симметрии в (37) и, в силу неравенства $0 \leqslant \mu \leqslant 1$, слабо зависит от μ. При этом одноэлектронные матричные элементы s_j и d_j для рассматриваемых значений энергий падающего и рассеянного фотонов оказались величинами практически одного порядка: на рис. 3 $k_j = d_j/s_j \approx 3.3$. Как результат, s-симметрия электрона сплошного спектра определила заметное увеличение степени изотропии тормозного излучения как аналога эмиссии из сферически-симметричного состояния. Однако в случае, когда амплитуда вероятности ионизации $2p \to \varepsilon d$ намного ($k_j \gg 1$) превосходит амплитуду вероятности ионизации $2p \to \varepsilon s$, возникает ярко выраженная анизотропия тормозного излучения. Например, вне области эмиссии для $\omega = 2000$ эВ, $\omega_C = 1907$ эВ и произвольно взятого нами значения $k_j = 100$ при $\theta = \pm 90°$ полярный радиус индикатрисы рассеяния в $\parallel$-схеме эксперимента составляет лишь около 2 % от полярного радиуса в $\perp$-схеме эксперимента. Аналогичная конкуренция s- и d-симметрий виртуальных электронов сплошного спектра должна происходить и в области резонанса $\omega_C \cong \omega_j$. В этом случае дополнительно к «фону» тормозного излучения включается его интерференция с эмиссией ($\sim \alpha_j A_j \Lambda_j / \gamma_{1s}$).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлен нерелятивистский вариант квантовой теории эффекта тормозного излучения при резонансном комптоновском рассеянии фотона многоэлектронным атомом. Результаты работы [3] дополнены теоретическим предсказанием и анализом эффекта угловой анизотропии тормозного излучения в соответствующих схемах предполагаемого эксперимента. Установлено, что степень угловой анизотропии существенно определяется конкуренцией амплитуд вероятности виртуальной ионизации $2p \to xs$ и $2p \to xd$ валентной $2p$-оболочки атома. Для атома с зарядом ядра $Z > 10$ изложенная теория рентгеновской $K\alpha$-эмиссии модифицируется, прежде всего, заменой дельта-функции Дирака в (26) на спектральную функцию Коши – Лоренца,

$$\delta(\varepsilon - \varepsilon_j) \to (\gamma_{2p}/\pi) \left[(\varepsilon - \varepsilon_j)^2 + \gamma_{2p}^2 \right]^{-1},$$

и как результат возникновением «результирующей» естественной полуширины резонанса в M_j из (29): $\gamma_{1s} \to \gamma_{1s} + \gamma_{2p}$ (теорема Вайсскопфа – Вигнера).

Процесс (1) рассмотрен нами в одноконфигурационном приближении Хартри – Фока для полных волновых функций состояния рассеяния. Переход к многоконфигурационному приближению Хартри – Фока позволит учесть, помимо состояний Q из (2), дополнительные каналы виртуального возбуждения (ионизации) атома. Следует ожидать, что в результате будет дано теоретическое описание, в частности, эффекта так называемого «поляризационного тормозного излучения», аналогичного таковому при рассеянии заряженной частицы атомом [17]. Наконец, заметим следующее. Параметр μ из (45) формально математически воспроизводит параметр угловой анизотропии упругого томсоновского, аномально-дисперсионного (рэлеевского) [18] и нерезонансного комптоновского [2] рассеяния фотона атомом.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Åberg and J. Tulkki, in *Atomic Inner-Shell Physics*, ed. by B. Crasemann, Plenum, New York (1985), Ch. 10, pp. 419–463.

2. P. P. Kane, Phys. Rep. **218**, 67 (1992).

3. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, И. Д. Петров, Письма в ЖЭТФ **111**, 61 (2020).

4. R. Obaid, Ch. Buth, G. L. Dacovski, 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).

5. A. C. Brinkman, E. Behar, M. Gűdel, M. Audard, A. J. F. den Boggende, G. Branduardi–Raymont, J. Cottam, C. Erd, J. W. den Herder, F. Jansen, J. S. Kaastra, S. M. Kahn, R. Mewe, F. B. S. Paerels, J. R. Peterson, A. P. Rasmussen, I. Sakellion, and C. de Vries, Astron. Astrophys. **365**, L324 (2001).

6. J. A. Gaunt, Phil. Trans. Roy. Soc. A **228**, 151 (1929).

7. L. C. Biedenharn and J. D. Louck, *Angular Momentum in Quantum Physics*, Addison–Wesley Publ. Comp. (1981).

8. Ig. Tamm, J. Phys. (USSR) **9**, 449 (1945).

9. S. M. Dancoff, Phys. Rev. **78**, 382 (1950).

10. I. I. Sobel'man, *An Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Pergamon Press, Oxford (1972).

11. А. П. Юцис, А. Ю. Савукинас, *Математические основы теории атома*, Минтис, Вильнюс (1973).

12. M. Ya. Amusia and N. A. Cherepkov, Case Stud. Atom. Phys. **5**, 47 (1975).

13. A. P. Jucys, E. P. Našlėnas, and P. S. Žvirblis, Int. J. Quant. Chem. **6**, 465 (1972).

14. L. Pettersson, J. Nordgren, L. Selander, C. Nordling, and K. Siegban, J. Electr. Spectr. Rel. Phenom. **27**, 29 (1982).

15. 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).

16. N. Nrisimhamurty, G. Aravind, P. C. Deshmukh, and S. T. Manson, Phys. Rev. A **91**, 013404 (2015).

17. М. Я. Амусья, *Тормозное излучение*, Энергоатомиздат, Москва (1990).

18. P. P. Kane, L. Kissel, R. H. Pratt, and S. C. Roy, Phys. Rep. **140**, 75 (1986).