

ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ КОМПТОНОВСКОМ РАССЕЙАНИИ 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 $[0] = 1s^2 2s^2 2p^6 [^1S_0]$). 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:

$$\omega + [0] \rightarrow Q(^1P_1) \rightarrow 2p_j^5 \varepsilon p(^1S_0, ^1D_2) + \omega_C, \quad (1)$$

$$Q(^1P_1) : 1sxp, 2p_j^5 x(s, d). \quad (2)$$

В (1) и ниже принята атомная система единиц ($\hbar = e = m_e = 1$), ω (ω_C) — энергия падающего (рассеянного) фотона, $\omega \geq I_{1s}$ (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

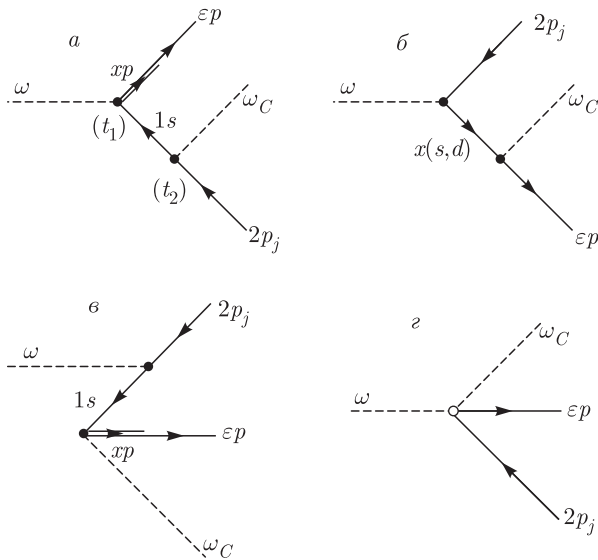


Рис. 1. Амплитуда вероятности процесса резонансного комptonовского рассеяния фотона многоэлектронным атомом (Ne) в представлении диаграмм Фейнмана: *a* — амплитуда вероятности $K\alpha$ -эмиссии, *б* — амплитуда вероятности тормозного излучения, *в* — амплитуда вероятности спонтанного возбуждения основного 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. ω (ω_C) — падающий (рассеянный) фотон, $\omega \geq I_{1s}$. 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 рассеяниях 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 (квадра-

точного 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*)

$$A = \int_0^\infty dx \frac{\langle 0 | \hat{R} | X_S \rangle \langle X_S | \hat{R} | X_P \rangle}{\omega - I_{1s} - x + i\gamma_{1s}} \quad (3)$$

и тормозного излучения (рис. 1*б*)

$$B_l = \int_0^\infty dx \frac{\langle 0 | \hat{R} | \Phi_l \rangle \langle \Phi_l | \hat{R} | X_P \rangle}{\omega - I_{2p_j} - x + i\gamma_{2p_j}} \quad (4)$$

по оператору радиационного перехода в дипольном приближении

$$\hat{R} = -\frac{1}{c} \sum_{n=1}^N \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\rho=1,2} (\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho}) (a_{\mathbf{k}\rho}^\dagger + a_{\mathbf{k}\rho}^-). \quad (5)$$

В (5) c — скорость света в вакууме, N — число электронов в атоме, сделана замена $\exp[\pm i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n)] \rightarrow 1$, \mathbf{p}_n (\mathbf{r}_n) — векторный оператор импульса (радиус-вектор) n -электрона атома, $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho}$ — единичный вектор поляризации, \mathbf{k} — волновой вектор, $a_{\mathbf{k}\rho}^\dagger$ ($a_{\mathbf{k}\rho}^-$) — 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:

$$|0\rangle = |\omega\rangle \otimes |0, {}^1S_0\rangle, \quad (6)$$

$$|X_S\rangle = |0_f\rangle \otimes |1sxp, {}^1P_1, M'\rangle, \quad (7)$$

$$|\Phi_l\rangle = |0_f\rangle \otimes |2p_j^5xl, {}^1P_1, M'\rangle, l = 0, 2, \quad (8)$$

$$|X_P\rangle = |\omega_C\rangle \otimes |2p_j^5\epsilon p, LSJ, M'\rangle, \quad (9)$$

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 $\langle 0 | \hat{R} | X_S \rangle$ 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

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

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

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

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

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,

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

и определим оператор дипольного перехода m -мультипольности как

$$Q_m^{(1)} = \sum_{n=1}^N C_m^{(1)}(e_n) r_n, \quad (15)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$LSJ = {}^1D_2 : \alpha = \sqrt{5}, \quad (23)$$

$$\beta_0 = \sqrt{5/3}, \quad \beta_2 = 1/\sqrt{15},$$

$\Delta_1 = \omega - \varepsilon - I_{1s}$, $\Delta_2 = \omega - \varepsilon - I_{2p_j}$, $\omega_j = I_{1s} - I_{2p_j}$ 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: $|x\rangle \cong \sin(r\sqrt{2x})$. 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 термина 1S_0 конечного состояния рассеяния — согласно теореме сложения сферических функций приводит к анизотропии амплитуды вероятности рассеяния через появление полинома Лежандра первого порядка:

$$P_1(e_1 \cdot e_2) = \sum_{M'} (-1)^{M'} C_{M'}^{(1)}(e_1) C_{-M'}^{(1)}(e_2). \quad (24)$$

Для термина 1D_2 конечного состояния рассеяния при кратном суммировании («*» — символ комплексно-го сопряжения)

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

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 ($1s \rightarrow 2p_j + \omega_C$) 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 ($xl \rightarrow \varepsilon p + \omega_C$) через рождение виртуальных $2p_j^5xl$ -состояний ионизации атома.

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

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

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

где число падающих на атом фотонов $n = 1$, $|F_j|^2$ — 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

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

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

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

$$A_j = a_1 s_j + a_2 d_j, \quad (31)$$

$$B_j = b_1 s_j^2 + b_2 s_j d_j + b_3 d_j^2, \quad (32)$$

$$a_1 = 3.266 - 0.460\mu, \quad (33)$$

$$a_2 = 0.652 + 1.040\mu, \quad (34)$$

$$b_1 = 2.667 - 0.592\mu, \quad (35)$$

$$b_2 = 1.067 - 0.830\mu, \quad (36)$$

$$b_3 = 0.107 + 1.150\mu, \quad (37)$$

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

где r_0 — классический радиус электрона и параметр $\eta_j = 2$ ($j = 3/2$), 1 ($j = 1/2$) воспроизводит коэффициент ветвления $k = (2j_+ + 1) / (2j_- + 1)$, $j_{\pm} = l \pm 1/2$ при фотоионизации nl_j^{4l+2} -оболочки атома. Структурно сечение (28) представлено тремя слагаемыми: резонансное (при $\omega_C \rightarrow \omega_j$) 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

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

$$N_{1s} = \langle 1s_0 | 1s_+\rangle \langle 2s_0 | 2s_+\rangle^2 \langle 2p_0 | 2p_+\rangle^6, \quad (40)$$

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)

$$s_j = \langle 2p_0 | r | \varepsilon_j s \rangle, \quad (41)$$

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

$$N_{2p} = \langle 1s_0 | 1s_{\bullet}\rangle^2 \langle 2s_0 | 2s_{\bullet}\rangle^2 \langle 2p_0 | 2p_{\bullet}\rangle^5, \quad (43)$$

$$d_j = N_{2p} \langle 2p_0 | r | \varepsilon_j d_{\bullet}\rangle, \quad (44)$$

получены в хартри-фовском 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:

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

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

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

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

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

для эксперимента с неполяризованными фотонами.

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

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

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

$$\Lambda_j \rightarrow \frac{\Lambda_j}{1 + i(\gamma_{2p}/\omega_C)} \quad (49)$$

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

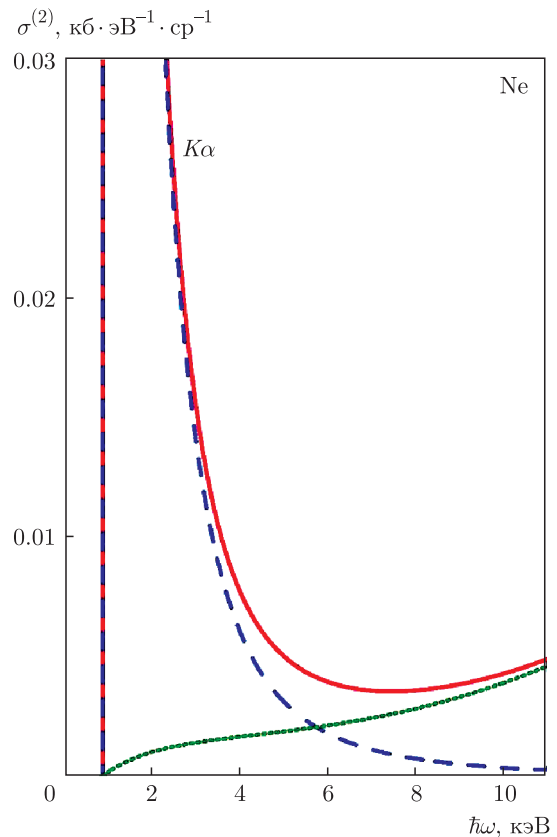


Рис. 2. Дважды дифференциальное сечение процесса резонансного комптоновского рассеяния фотона атомом Ne для \perp -схемы эксперимента ($\mu = 1$) в области $\hbar\omega \in (I_{1s}; 11)$ кэВ: $\hbar\omega_C = 847.1$ эВ (резонанс $K\alpha$ -эмиссии), штриховая кривая — учтена лишь диаграмма рис. 1а, пунктирная кривая — учтена лишь диаграмма рис. 1б и ее интерференция с диаграммой рис. 1а, 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. 1а). 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 $\Lambda_j \rightarrow \infty$ при $\omega \rightarrow \infty$.

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 $[(\omega_C - \omega_j)^2 + \gamma_{1s}^2]^{-1}$ в (29): $M_j \cong B_j \Lambda_j^2$. Результаты расчетов представлены на рис. 3. Переход от рис. 3а к рис. 3б демонстрирует следующее. Для

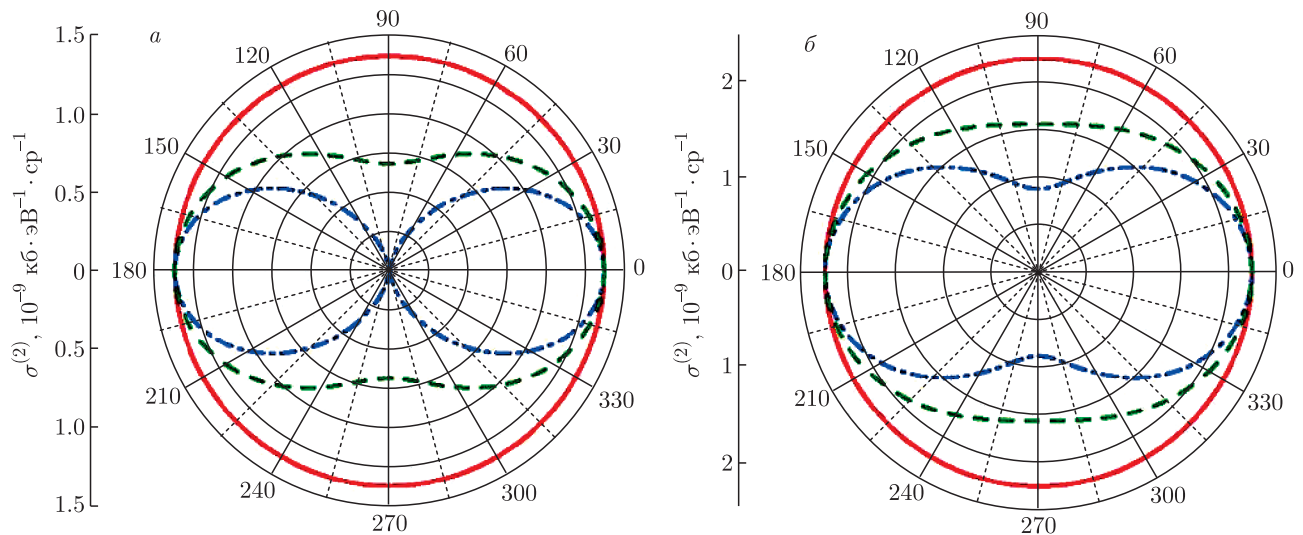


Рис. 3. Индикатрисы рассеяния для атома Ne с полярным радиусом $\rho = \sigma^{(2)}$ и полярным углом θ при фиксированных значениях энергий падающего ($\hbar\omega = 2000$ эВ) и рассеянного ($\hbar\omega_C = 1907$ эВ) фотонов. *a* (*б*) — не учтена (учтена) изотропная часть вклада термина 1D_2 в сечение 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 термина 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 $\theta = \pm 90^\circ$. 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 $0 \leq \mu \leq 1$, 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 $2p \rightarrow \varepsilon d$ намного ($k_j \gg 1$) превосходит амплитуду вероятности ионизации $2p \rightarrow \varepsilon s$, 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 $\theta = \pm 90^\circ$ 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 элект-

ронов 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 $2p \rightarrow xs$ и $2p \rightarrow xd$ 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,

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

и как результат возникновением «результатирующей» естественной полуширины резонанса в M_j из (29): $\gamma_{1s} \rightarrow \gamma_{1s} + \gamma_{2p}$ (теорема Вайскопфа – 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 такому 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. Güdel, M. Audard, A. J. F. den Bogende, 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. I. G. 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. Савукина, *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).