

专题: 超快原子分子光物理

利用频域理论研究束缚电子在强激光场中的单光子康普顿散射过程*

邱媛媛¹⁾²⁾ 杨玉军^{1)†} 郭迎春³⁾ 魏志义²⁾⁴⁾⁵⁾ 王兵兵^{2)4)‡}

1) (吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012)

2) (中国科学院物理研究所, 北京凝聚态物理国家研究中心, 北京 100190)

3) (华东师范大学物理与电子科学学院, 上海 200241)

4) (中国科学院大学, 北京 100049)

5) (松山湖材料实验室, 东莞 523808)

(2025年4月15日收到; 2025年5月23日收到修改稿)

康普顿散射是指强激光场与物质中电子相互作用导致光子发射的非弹性散射过程. 近年来, 随着 X 射线自由电子激光器迅速发展, X 射线激光的强度逐渐增大, X 射线单光子康普顿散射过程的信号逐渐增强. 本文基于非微扰量子电动力学的频域理论研究强 X 射线激光场下束缚电子的单光子康普顿散射过程. 发现随着入射光子能量的增大, 在背向散射时康普顿散射双重微分概率会逐渐降低. 本工作为高频强激光场中康普顿散射与原子电离之间建立了联系, 为探索高激光强度下的原子结构动力学提供了一个研究平台.

关键词: 康普顿散射, 频域理论, 束缚电子**PACS:** 03.65.-w, 31.30.J-**DOI:** 10.7498/aps.74.20250483**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250483

1 引言

康普顿散射实验因证实了光的量子理论而举世闻名^[1], 康普顿散射可以用于研究原子、分子以及固体内部的电子结构^[2-5], 也可以产生高强度、高偏振的 X 光或 γ 光^[6-8]. 1927 年 Wentzel^[9] 首次对束缚电子的康普顿散射过程进行了理论研究, 在此之后, 更多相关理论方法被相继提出. 其中, 以 Du Mond^[10,11] 在研究光子与固体靶相互作用工作中所提出的束缚电子康普顿散射冲量近似 (impulse approximation, IA) 理论应用最为广泛. 在 IA 理论中, 当电子的束缚能远低于反弹能 (散射后光子

损失的能量) 时, 可将束缚电子看成具有束缚态动量分布的自由电子, 而其散射光谱的峰值位置则与自由电子模型一致, 因此可以通过自由电子的模型公式对散射光谱峰值位置进行预测. 自从 IA 理论被 Eisenberger 和 Platzman^[12] 所证实后, 出现了大量对 IA 理论进行完善和修正的研究工作^[13-15].

目前, X 射线自由电子激光 (X-ray free-electron lasers, XFEL)^[16-20] 因其超高亮度、超短脉冲宽度等优质特性, 成为了探索物质微观结构与超快动力学过程的有力工具. 随着美国 LCLS-II^[21]、欧洲 Eu XFEL^[22] 和中国 SHINE^[23] 等全相干 XFEL 装置相继投入建设, 康普顿散射过程的实验研究也得到了有效推动. Kircher 等^[24] 基于 XFEL 的康普顿散射

* 国家自然科学基金 (批准号: 12474288, 92250303, 12074418) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yangyj@jlu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: wbb@iphy.ac.cn

技术, 精确解释了氦原子单电离与双电离过程中电子动量分布的细微差异. Fuchs 等^[25] 基于 XFEL 研究了在高强度 X 射线照射下固体靶的非线性康普顿散射过程, 发现了散射光子的异常红移现象.

近年来有一些理论研究^[26-28] 涉及到束缚电子的康普顿散射过程. 例如, Krebs 等^[27] 提出了解析求解含时薛定谔方程的非微扰方法, 用来研究单光子及双光子的康普顿散射过程, 发现其结果与自由电子模型预测相一致. 另外, Venkatesh 和 Robicheaux^[28] 利用数值求解含时薛定谔方程的方法研究了束缚电子的单光子康普顿散射过程中双重微分截面与散射角之间的关系. Shi 等^[29] 利用非微扰量子电动力学 (quantum electrodynamics, QED) 方法, 计算了在强激光场下束缚电子的双光子康普顿散射过程, 发现康普顿散射的双重微分概率 (double differential probability, DDP) 谱的峰位小于自由电子模型的预测值, 这一结果与 Fuchs 等^[25] 的实验测量定性一致. 最近, Dai 和 Fu^[30] 利用 QED, 通过数值方法研究了自由电子的单光子及多光子康普顿散射过程, 证明在有效的激光强度范围内, 初始光子数趋于无穷大时结果与半经典理论一致.

本文利用基于非微扰 QED 的频域理论研究强激光场中束缚电子的单光子康普顿散射过程. 其中, 强 X 射线可以增强与物质的相互作用, 提高散射信号强度, 使得实验中能够更容易地检测到康普顿散射信号, 并且可以对信号进行更深入的研究. 康普顿散射对物质的电子动量分布敏感, 而强 X 射线引起的康普顿散射可能会提供更丰富的电子结构信息, 有助于了解物质在高场强下的电子状态和性质.

在频域理论中, 将原子和辐射场作为一个封闭系统来处理, 从而可以应用形式散射理论^[31] 来处理光与物质相互作用的动力学过程. 作为强场激光理论探索过程中所取得的重要成果, 该理论已被成功应用于强激光场中原子和分子电离及高次谐波等过程的研究中^[32-35]. 本文利用强场频域理论, 计算了束缚电子在 X 射线强激光场下单光子康普顿散射过程中的 DDP, 发现随着入射光子能量的增大, 在背向散射时康普顿散射的 DDP 会逐渐降低, 但在前向散射时概率不会随着入射光子能量而改变.

通过分析散射光子的能量和角度分布, 可以得

到基态电子在动量空间中密度分布的变化情况, 从而揭示化学键的性质和分子的振动、旋转等动力学过程, 这对于理解材料的电子结构和性质至关重要, 同时为研究高场强下的光-物质相互作用^[36-44] 提供了新的视角.

2 理论方法

由于原子和辐射场可以作为一个封闭系统来处理, 故可利用形式散射理论求解康普顿散射过程的跃迁矩阵元. 本文应用原子单位, 即 $\hbar = m = e = 1$, 其中, m 为电子质量, e 为单位电荷量. 在线偏振 X 射线激光场与束缚电子的康普顿散射过程中, 原子与辐射场构成整个系统的总哈密顿量, 可以表示为

$$H = H_0 + U(\mathbf{r}) + V, \quad (1)$$

其由哈密顿量中的非相互作用部分 H_0 、原子的结合势 $U(\mathbf{r})$ (\mathbf{r} 为电子的空间坐标) 和电子与光子之间的相互作用势 V 三部分组成, 其中,

$$H_0 = \frac{(-i\nabla)^2}{2} + \omega_1 N_{a_1} + \omega_2 N_{a_2}. \quad (2)$$

入射 (散射) 光子数算符为 $N_{a_1} = (a_1 a_1^\dagger + a_1^\dagger a_1)/2$ ($N_{a_2} = (a_2 a_2^\dagger + a_2^\dagger a_2)/2$); 产生 (湮灭) 算符为 $a_i^\dagger (a_i)$, $i = 1, 2$; 入射 (散射) 光子频率为 $\omega_1 (\omega_2)$. $V = V_1 + V_2 + V_{12}$, V_1 为电离作用势, 对应电离跃迁, V_2 和 V_{12} 为散射作用势, 对应散射跃迁. V_1 , V_2 和 V_{12} 分别为

$$V_1 = \frac{\mathbf{A}_1(\mathbf{r}) \cdot (-i\nabla)}{c} + \frac{\mathbf{A}_1(\mathbf{r})^2}{2c^2}, \quad (3)$$

$$V_2 = \frac{\mathbf{A}_2(\mathbf{r}) \cdot (-i\nabla)}{c}, \quad (4)$$

$$V_{12} = \frac{\mathbf{A}_1(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_2(\mathbf{r})}{c^2}. \quad (5)$$

这里入射光矢势为 $\mathbf{A}_1(\mathbf{r}) = g_1(\epsilon_1 e^{ik_1 \cdot r} a_1 + \epsilon_1^* e^{-ik_1 \cdot r} a_1^\dagger)$, 散射光矢势 $\mathbf{A}_2(\mathbf{r}) = g_2(\epsilon_2 e^{ik_2 \cdot r} a_2 + \epsilon_2^* e^{-ik_2 \cdot r} a_2^\dagger)$, $g_1 = (2V_{\gamma_1} \omega_1)^{-1/2}$, $g_2 = (2V_{\gamma_2} \omega_2)^{-1/2}$, V_{γ_1} 和 V_{γ_2} 为光波模式归一化体积, 入射 (散射) 光的波矢为 $\mathbf{k}_1 (\mathbf{k}_2)$ 、偏振矢为 $\epsilon_1 (\epsilon_2)$. 偏振矢量 (ϵ_1, ϵ_2) 满足:

$$\epsilon \cdot \epsilon = \epsilon^* \cdot \epsilon^* = \epsilon \cdot \epsilon^* = 1. \quad (6)$$

将原子与辐射场看作一个封闭体系, 因此该体系相互作用过程中总能量守恒, 可以应用形式散射理论^[31]. 散射矩阵 (S 矩阵) 元^[33,34] 表示为

$$S_{\bar{n}} = \langle \psi_f^- | \psi_i^+ \rangle = \delta_{\bar{n}} + 2\pi i \delta(E_f - E_i) T_{\bar{n}}, \quad (7)$$

式中,

$$\psi_i^+ = \psi_i + \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} V \psi_i, \quad (8)$$

$$\psi_f^- = \psi_f + \frac{1}{E_f - H' - i\epsilon} U \psi_f, \quad (9)$$

ϵ 是一个非常小 (趋于 0) 的正实数, $H' = H_0 + U(\mathbf{r})$. 在物理上 ψ_i^+ 是 $t = -\infty$ 时系统的波函数, 从碰撞前的状态 ψ_i 演化而来. ψ_f^- 也是 $t = +\infty$ 时系统的波函数, 从碰撞后的状态 ψ_f 演化而来. 跃迁矩阵元 [45,46] $T_{\bar{n}}$ 表示为

$$T_{\bar{n}} = \langle \psi_f | U | \psi_i^+ \rangle = T_1 + T_2, \quad (10)$$

式中 $\langle \psi_f | U | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle$, 一步跃迁矩阵元 $T_1 = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle$, 两步 (高阶) 跃迁矩阵元 $T_2 = \langle \psi_f | V \times \frac{1}{E_f - H' - i\epsilon} V | \psi_i \rangle$.

由于两步跃迁过程对于跃迁概率贡献很小, 所以 T_2 可忽略, 本文只讨论一步过程. 在一步跃迁过程中, $-i\nabla$ 项可忽略, 并且康普顿散射过程不能被电离作用势 V_1 诱发, 因此一步跃迁过程中只考虑 V_{12} 项. 因此, 跃迁矩阵元 $T_{\bar{n}}$ 表示为

$$T_{\bar{n}} = \langle \psi_f | V_{12} | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | \frac{\mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2}{c^2} | \psi_i \rangle. \quad (11)$$

在原子与辐射场构成的封闭体系中, 系统初态表示为 $|\psi_i\rangle = |\Phi_1(\mathbf{r})\rangle \otimes |l\rangle \otimes |0\rangle$, 为 $H_0 + U$ 的本征态, $E_i = (-E_B) + \left(l + \frac{1}{2}\right)\omega_1 + \frac{1}{2}\omega_2$ 为其对应本征能. $\Phi_1(\mathbf{r})$ 是原子中电子的基态波函数, 结合能 $E_B > 0$, $|l\rangle$ 是光子数为 l 的入射光 Fock 态, $|0\rangle$ 是散射光的空态. 系统终态 $|\psi_f\rangle = |\Psi_{\mathbf{P}_f n_f}\rangle \otimes |1\rangle$, 是哈密顿量 $H_0 + V$ 的本征态, 对应本征能量 $E_f = \frac{P_f^2}{2} + \left(n_f + \frac{1}{2} + u_p\right)\omega_1 + \frac{3}{2}\omega_2$. 电子终态动量为 \mathbf{P}_f , 终态激光光子数为 n_f , 有质动力能为 u_p , 以光子能量为单位. $|\Psi_{\mathbf{P}_f n_f}\rangle$ 为激光场中电子的 Volkov 态 [27] (电子与光子在强激光场下的纠缠态), 表示为

$$|\Psi_{\mathbf{P}_f n_f}\rangle = V_e^{-1/2} \sum_{q=-n_f}^{\infty} e^{i[\mathbf{P}_f + (u_p - q)\mathbf{k}_1] \cdot \mathbf{r}} J_q(\zeta, \eta) |n_f + q\rangle, \quad (12)$$

式中, 电子末态动量归一化体积为 V_e ; $J_q(\zeta, \eta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{-q-2n}(\zeta) J_n(\eta)$ 是参量 $\zeta = 2\sqrt{\frac{u_p}{\omega}} P_f \cos\theta_f$ 和 $\eta = u_p/2$ 的广义贝塞尔函数 [47], 其中 \mathbf{P}_f 与 ϵ_1 的夹角为

θ_f , 下标 $q = l - n_f$ 是入射激光场在康普顿散射过程转移光子数, 单光子康普顿散射过程中对应 $q = 1$. 最后, 跃迁矩阵元 $T_{\bar{n}}$ 表示为

$$T_{\bar{n}} = \frac{\Lambda g_2}{c^2} V_e^{-1/2} \epsilon_2^* \epsilon_1 \Phi_1[\mathbf{P}_f + (u_p - 1)\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2] J_0(\zeta, \eta), \quad (13)$$

式中, $\Lambda = \sqrt{\frac{u_p \omega_1}{\alpha}}$, α 为精细结构常数 [48,49]. 康普顿散射过程的 DDP 表达式为

$$\frac{dW_{if}}{d\omega_2 d\Omega} = \int 2\pi |T_{\bar{n}}|^2 \delta(E_i - E_f) \frac{V_{\gamma_2}}{(2\pi)^3} \frac{V_e}{(2\pi)^3} \omega_2^2 d^3 \mathbf{P}_f. \quad (14)$$

3 结果与分析

首先, 为了验证频域理论的正确性, 本文计算了不同核电荷数 (Z) 类氢离子的康普顿散射 DDP 谱图, 并与文献 [12] 结果进行比较. 其中, 入射 X 射线能量为 17.4 keV, 入射光束与散射光束之间的夹角为 133.75° . 实心曲线为本文利用 QED 理论计算得到的结果, 空心曲线是 Eisenberger 和 Platzman [12] 利用 IA 理论计算得到的结果. 由图 1 可知, 随着 Z 值增大康普顿散射 DDP 峰值下降, 频谱展宽. 其原因在于 Z 值的增大导致束缚能增大, 电子的布居会更局域在核附近, 电离概率减小,

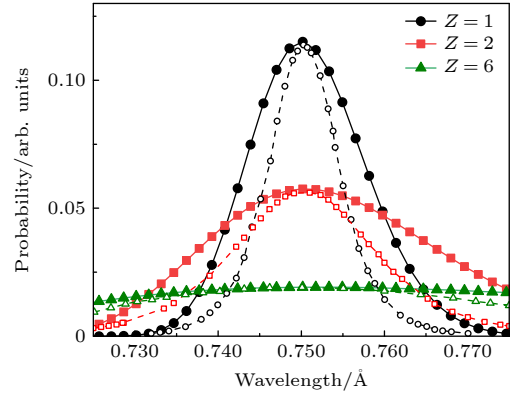


图 1 不同核电荷数类氢离子的波长与康普顿散射 DDP 谱图. 入射光子能量 $\omega_1 = 17.4$ keV, 散射角 $\theta = 133.75^\circ$, 其中实心曲线为 QED 理论计算的结果, 空心曲线是 Eisenberger 利用 IA 理论得到的结果

Fig. 1. Wavelength and double-differential probability spectra of Compton scattering for hydrogen-like ions with different nuclear charge numbers Z . Incident photon energy $\omega_1 = 17.4$ keV, scattering angles $\theta = 133.75^\circ$. The solid curves represent results calculated using QED theory, while the hollow curves are those obtained by Eisenberger using the impulse approximation.

因此峰值下降. 根据海森伯不确定性原理, 电子波函数坐标空间上越局域, 动量空间就越分散, 从而频谱会逐渐增宽. 本文结果与文献 [12] 定性一致, 验证了频域理论方法的正确性及可行性.

其次, 在下文的计算中, 激光强度为 $I = 4 \times 10^{20} \text{ W/cm}^2$, 入射光子能量分别为 $\omega_1 = 500 \text{ eV}$, 1 keV , 10 keV . 入射、散射光的波矢和偏振的几何示意图如图 2(a) 所示, x 轴和 z 轴分别为入射激光场的偏振 (ϵ_1) 和波矢量 (\mathbf{k}_1) 方向, \mathbf{k}_2 方向由球坐标 (θ, ϕ) 表征, 散射角 θ 即 \mathbf{k}_1 与 \mathbf{k}_2 之间的夹角, 散射光波矢 (\mathbf{k}_2) 的方位角为 ϕ , 原子核和电子分别用红色和绿色实心圆表示. 其中, 散射光偏振方向 (ϵ_2) 不是固定的, 因此对散射光的所有偏振方向进行了积分.

图 2(b)–(d) 表示理论计算 X 射线激光照射

在 Be 原子上时束缚电子的单光子康普顿散射 DDP 与散射光子能量 (ω_2) 和散射角之间的关系. 其中白色实心点是由 Kibble 和 Brown 所预测的散射光子能量, 基于自由电子模型 [28,31,50] 公式得到, 即:

$$\omega_2 = \frac{q\omega_1}{1 + q\alpha^2\omega_1(1 - \cos\theta)}. \quad (15)$$

将图 2(b)–(d) 中束缚电子单光子康普顿散射 DDP 对散射光子能量进行积分, 得到康普顿散射 DDP 与散射角之间的关系分别对应图 2(e)–(g). 其中实心曲线是利用 QED 理论计算的结果, 空心曲线由 Klein-Nishina [51] 公式计算, 即:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{FEA}} = \frac{r_0^2}{2} \left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right)^2 \left\{ \frac{\omega_1}{\omega_2} + \frac{\omega_2}{\omega_1} - \sin^2\theta \right\}, \quad (16)$$

式中, $r_0 = \alpha/m$ 是经典电子半径, m 为电子的质量, Ω 为散射光的立体角.

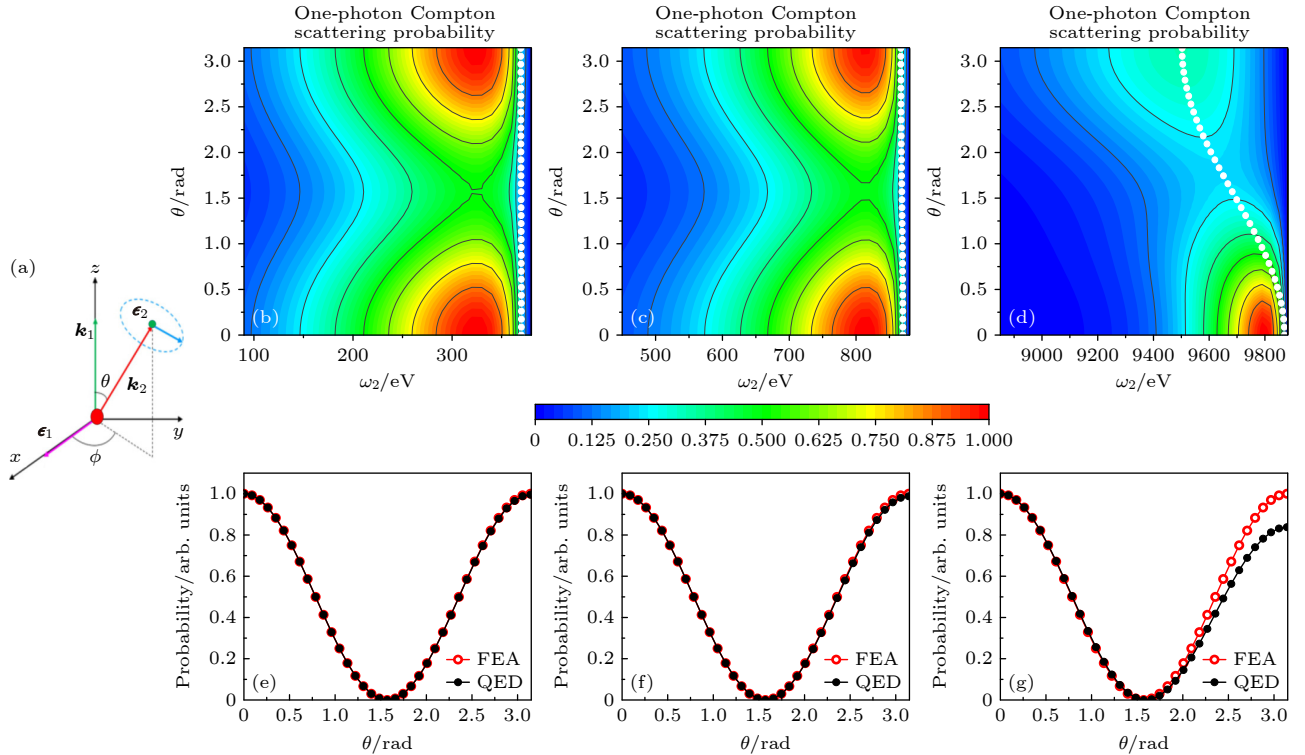


图 2 (a) 入射、散射光的波矢和偏振的几何示意图, xoz 平面由入射激光的偏振 (ϵ_1) 和波矢量 (\mathbf{k}_1) 定义, 散射光子方向由球坐标 (θ, ϕ) 表征; (b)–(d) 康普顿散射的 DDP 关于散射光子能量 ω_2 和散射角 θ 的分布, 白色点表示自由电子模型预测值; (e)–(g) 实心 and 空心曲线分别是利用频域理论和 Klein-Nishina 公式计算得到的康普顿散射微分概率关于散射角的分布; 入射光子能量分别为 500 eV (b), (e), 1 keV (c), (f), 10 keV (d), (g), 激光强度 $I = 4 \times 10^{20} \text{ W/cm}^2$

Fig. 2. (a) Geometric diagram of wave vectors and polarization states of incident and scattered light. The xoz plane is defined by the polarization (ϵ_1) and wave vector (\mathbf{k}_1) of the incident laser, while the direction of the scattered photon is characterized by spherical coordinates (θ, ϕ) . (b)–(d) The double-differential cross-section of Compton scattering as a function of scattered photon energy and scattering angle, with white dots indicating predictions from the free-electron model. (e)–(g) Solid and hollow curves represent differential probability distributions of Compton scattering versus scattering angle, calculated using frequency-domain theory and the Klein-Nishina formula, respectively. The incident photon energies are 500 eV (b), (e), 1 keV (c), (f) and 10 keV (d), (g) with laser intensity $I = 4 \times 10^{20} \text{ W/cm}^2$.

从图 2(b)–(g) 可以发现, 在 $\theta = 90^\circ$ 时康普顿散射 DDP 最低, 随着入射光子能量的增大, 康普顿散射 DDP 由关于 $\theta = 90^\circ$ 对称转变为不对称, 背向散射的 DDP 逐渐降低. 为了解释上文的计算结果, 首先简化跃迁矩阵元表达式 (13). 在目前的激光条件下, $J_0(\zeta, \eta)$ 可以展开为

$$\begin{aligned} J_0(\zeta, \eta) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_{-2m}(\zeta)J_m(\eta) \\ &= J_0(\zeta)J_0(\eta) + J_{-2}(\zeta)J_1(\eta) \\ &\quad + J_{-2}(\zeta)J_{-1}(\eta) + \dots \end{aligned} \quad (17)$$

式中 ζ 和 η 值远小于 1, 由于 $J_0(\zeta, \eta)$ 展开后高阶项为 0, $J_0(\zeta, \eta) \approx J_0(\zeta)J_0(\eta) = 1$, 所以跃迁矩阵元 T_{fi} 可以近似为

$$T_{fi} \approx \frac{A g_2}{c^2} V_e^{-1/2} g_2 \epsilon_1 \cdot \epsilon_2^* P_f \cos \theta_i \Phi_i(P_f - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2), \quad (18)$$

在 $\theta = 90^\circ$ 处, 此时 \mathbf{k}_1 垂直于 \mathbf{k}_2 , \mathbf{k}_2 平行于 ϵ_1 , 使 $\epsilon_1 \perp \epsilon_2$, $\epsilon_1 \cdot \epsilon_2^* = 0$, 此时在 (18) 式中一步跃迁矩阵元较小, 因此 $\theta = 90^\circ$ 时 DDP 最低.

接下来, 考虑基态电子在动量空间中的密度分布对康普顿散射 DDP 谱峰位的影响. 在图 3 中, 将基态电子波函数 $|\Phi_i(P_f - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)|^2$ 对 $P_f - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ 进行积分, 得到电子动量空间密度分布与散射光子能量和散射角的关系. 在图 3(a) 中随着散射角的增大, 动量空间密度谱分布的峰位变化不明显, 趋近于一条直线. 原因在于: 通过分析波函数的自变量 $P_f - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$, 令入射光与出射光的动量

差 $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$. 当 $P_f = \Delta \mathbf{k}$ 时, 基态电子波函数 $|\Phi_i(P_f - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)|^2$ 值最大 (图 3 中插图表示入射光与出射光动量之间的关系). 当 $\omega_1 = 1$ keV 时 ($k_1 = \omega_1/\alpha'$, $\alpha' = 137$, $\Delta k = 2k_1$), $\Delta k = 14.6$. 根据能量守恒可知 $P_f = \sqrt{2(\omega_1 - E_B - \omega_2)}$, $P_f - \Delta \mathbf{k}$ 变化范围较小, 所以动量空间密度分布的峰位随 θ 角的增大趋近于一条直线; 而当 $\omega_1 = 10$ keV 时, $\Delta k = 146$. 即入射光子能量较大时, $P_f - \Delta \mathbf{k}$ 变化范围也较大, 因此随着散射角的增大, 基态电子波函数 $|\Phi_i(P_f - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)|^2$ 逐渐减小, 即电子密度分布随散射光子峰值位置的变化而显著减小, 如图 3(b) 所示. 根据图 3 中插图关系, 当 \mathbf{k}_1 和 \mathbf{k}_2 一定时, 这种动量传递随着散射角的增大而增大, 因此电子在散射过程中获得的能量也增大, 从而导致散射光子的概率减小. 因此随着入射光子能量的增大, 背向散射的康普顿散射 DDP 逐渐降低.

最后, 我们考察汤姆孙散射过程. 图 4 中实心曲线是利用 QED 理论得到的康普顿散射 DDP 与散射角之间的关系, 入射光子能量分别为 1 keV, 5 keV, 10 keV, 散射光能量 $\omega_2 \approx \omega_1 - I_p$. 可以观察到随着入射光子能量的增大, 在背向散射时康普顿散射 DDP 逐渐降低, 在 $\theta = 90^\circ$ 附近的最低点逐渐消失. 说明汤姆孙散射 DDP 谱的峰位对入射光能量存在一定的依赖性, 入射光能量越大, 对角度的依赖性就越大; 入射光能量越小对角度的依赖性就越小. 空心曲线是利用汤姆孙散射 [52] 得到的结果. 由 Klein-Nishina 公式 (17) 可知, 在非相对

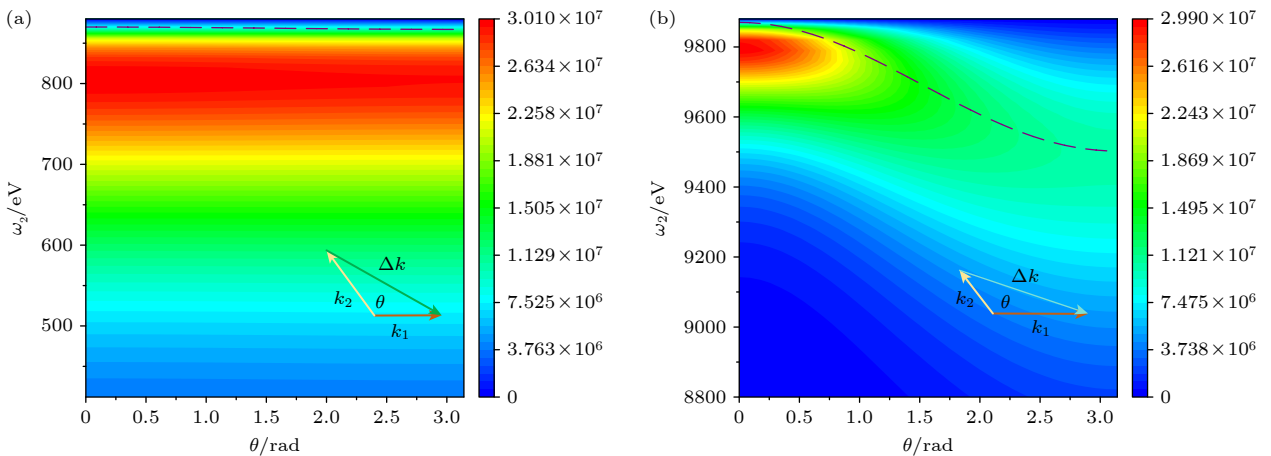


图 3 动量空间中基态电子的密度分布随散射光能量和散射角的变化 (a) $\omega_1 = 1$ keV; (b) $\omega_1 = 10$ keV; 激光强度 $I = 4 \times 10^{20}$ W/cm², 图中虚线表示 (19) 式自由电子模型预测散射光子能量值随散射角的变化

Fig. 3. Variation of the electron density distribution in momentum space for ground-state electrons as a function of scattered photon energy and scattering angle with laser intensity $I = 4 \times 10^{20}$ W/cm²: (a) $\omega_1 = 1$ keV; (b) $\omega_1 = 10$ keV. Dashed lines indicate the scattered photon energy versus scattering angle predicted by the free-electron model in Eq. (19).

论极限情况下, $\omega_2 \ll m$, 出射光子能量 $\omega_2 \approx \omega_1$, 得到汤姆孙公式:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = \frac{r_0^2}{2}(1 + \cos^2\theta). \quad (19)$$

在汤姆孙公式中可以发现康普顿散射 DDP 只与散射角度有关, 而与入射光子和散射光子的能量无关.

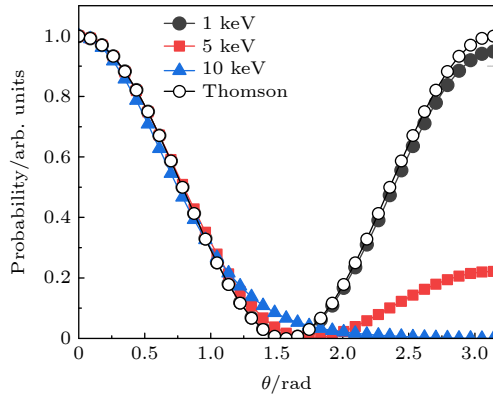


图 4 实心曲线是利用频域理论计算的康普顿散射 DDP 与散射角的关系, 其中 $\omega_1 = 1 \text{ keV}, 5 \text{ keV}, 10 \text{ keV}$, $\omega_2 \approx \omega_1 - I_p$, 空心曲线是利用汤姆孙公式计算的微分概率与散射角的关系

Fig. 4. Dependence of the double-differential probability of Compton scattering on scattering angle, calculated using frequency-domain theory (solid curve). $\omega_1 = 1 \text{ keV}, 5 \text{ keV}, 10 \text{ keV}$, $\omega_2 \approx \omega_1 - I_p$. The hollow curve shows the differential cross-section derived from the Thomson scattering formula as a function of the scattering angle.

4 结 论

本文利用频域理论研究束缚电子在强激光场中的单光子康普顿散射过程, 发现随着入射光子能量的增大, 在背向散射时康普顿散射的 DDP 会逐渐降低. 通过对跃迁矩阵的分析, 这个现象是由基态电子在动量空间中密度分布的变化造成的. 这些结果加深了对束缚电子在强激光场中单光子康普顿散射过程的理解.

感谢吉林大学超算中心的技术支持. 感谢中国科学院物理研究所综合极端条件实验装置用户设施提供支持 (SECUF, <https://cstr.cn/31123.02.SECUF>).

参考文献

[1] Compton A H 1923 *Phys. Rev.* **21** 483
 [2] Cooper M 1971 *Adv. Phys.* **20** 453
 [3] Ching W, Callaway J 1974 *Phys. Rev. B* **9** 5115

[4] Laurent D, Wang C, Callaway J 1978 *Phys. Rev. B* **17** 455
 [5] Jaiswal P, Shukla A 2007 *Phys. Rev. A* **75** 022504
 [6] Kaneyasu T, Takabayashi Y, Iwasaki Y, Koda S 2011 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **659** 30
 [7] Sun C, Wu Y K 2011 *Phys. Rev. Accel. Beams* **14** 044701
 [8] Ge Y C 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3094 (in Chinese) [葛榆成 2009 物理学报 **58** 3094]
 [9] Wentzel G 1927 *Z. Angew. Phys.* **43** 524
 [10] Du Mond J W M 1929 *Phys. Rev.* **33** 643
 [11] Du Mond J W M 1933 *Rev. Mod. Phys.* **5** 1
 [12] Eisenberger P, Platzman P 1970 *Phys. Rev. A* **2** 415
 [13] Florescu V, Pratt R H 2009 *Phys. Rev. A* **80** 033421
 [14] LaJohn L A 2010 *Phys. Rev. A* **81** 043404
 [15] Pratt R H, LaJohn L A, Florescu V, Surić T, Chatterjee B K, Roy S C 2010 *Radiat. Phys. Chem.* **79** 124
 [16] Huang Z, Kim K J 2007 *Phys. Rev. Spec. Top. Accel. Beams* **10** 034801
 [17] Young L, Kanter E P, Krassig B, Li Y, March A M, Pratt S T, Santra R, Southworth S H, Rohringer N, DiMauro L F, Doumy G, Roedig C A, Berrah N, Fang L, Hoener M, Bucksbaum P H, Cryan J P, Ghimire S, Glownia J M, Reis D A, Bozek J D, Bostedt C, Messerschmidt M 2010 *Nat.* **466** 56
 [18] Hoener M, Fang L, Kornilov O, Gessner O, Pratt S T, Gühr M, Kanter E P, Blaga C, Bostedt C, Bozek J D, Bucksbaum P H, Buth C, Chen M, Coffee R, Cryan J, DiMauro L, Glownia M, Hosler E, Kukk E, Leone S R, McFarland B, Messerschmidt M, Murphy B, Petrovic V, Rolles D, Berrah N 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 253002
 [19] Fang L, Hoener M, Gessner O, Tarantelli F, Pratt S T, Kornilov O, Buth C, Gühr M, Kanter E P, Bostedt C, Bozek J D, Bucksbaum P H, Chen M, Coffee R, Cryan J, Glownia M, Kukk E, Leone S R, Berrah N 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 083005
 [20] Yan J W, Qin W L, Chen Y, Decking W, Dijkstal P, Guetg M, Inoue I, Kujala N, Liu S, Long T Y, Mirian N, Geloni G 2024 *Nat. Photon.* **18** 1293
 [21] Halavanau A, Decker F J, Emma C, Sheppard J, Pellegrini C 2019 *J. Synchrotron Rad.* **26** 635
 [22] Pandey S, Bean R, Sato T, Poudyal I, Bielecki J, Villarreal J C, Yefanov O, Mariani V, White T A, Kupitz C, Hunter M, Abdellatif M H, Bajt S, Bondar V, Echelmeier A, Doppler D, Emons M, Frank M, Fromme R, Gevorkov Y, Giovanetti G, Jiang M, Kim D, Kim Y, Kirkwood H, Klimovskaia A, Knoska J, Koua F H M, Letrun R, Lisova S, Maia L, Mazalova V, Meza D, Michelat T, Ourmazd A, Palmer G, Ramilli M, Schubert R, Schwander P, Silenzi A, Dambietz J S, Tolstikova A, Chapman H N, Ros A, Barty A, Fromme P, Mancuso A P, Schmidt M 2020 *Nat. Methods* **17** 73
 [23] Liu T, Huang N S, Yang H X, Qi Z, Zhang K Q, Gao Z F, Chen S, Feng C, Zhang W, Luo H, Fu X X, Liu H, Faatz B, Deng H X, Liu B, Wang D, Zhao Z T 2023 *Front. Phys.* **11** 1172368
 [24] Kircher M, Trinter F, Grundmann S, Kastirke G, Weller M, Vela-Perez I, Khan A, Janke C, Waitz M, Zeller S, Mletzko T, Kirchner D, Honkimäki V, Houamer S, Chuluunbaatar O, Popov Y V, Volobuev I P, Schöffler M S, Schmidt L P H, Jahnke T, Dörner R 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 053001
 [25] Fuchs M, Trigo M, Chen J, Ghimire S, Shwartz S, Kozina M, Jiang M, Henighan T, Bray C, Ndabashimiye G, Bucksbaum P H, Feng Y, Herrmann S, Carini G A, Pines J, Hart P, Kenney C, Guillet S, Boutet S, Williams G J, Messerschmidt M, Seibert M M, Moeller S, Hastings J B, Reis D A 2015 *Nat. Phys.* **11** 964

- [26] Hopersky A N, Nadolinsky A M, Novikov S A 2015 *Phys. Rev. A* **92** 052709
- [27] Krebs D, Reis D A, Santra R 2019 *Phys. Rev. A* **99** 022120
- [28] Venkatesh A, Robicheaux F 2020 *Phys. Rev. A* **101** 013409
- [29] Shi S, Chen J, Yang Y J, Yan Z C, Liu X J, Wang B B 2022 *Opt. Express* **30** 1664
- [30] Dai D J, Fu L B 2022 *Phys. Rev. A* **105** 013101
- [31] Gell-Mann M, Goldberger M L 1953 *Phys. Rev.* **91** 398
- [32] Guo D S, Åberg T, Crasemann B 1989 *Phys. Rev. A* **40** 4997
- [33] Gao L H, Li X F, Fu P M, Freeman R R, Guo D S 2000 *Phys. Rev. A* **61** 063407
- [34] Wang B B, Gao L H, Li X F, Guo D S, Fu P M 2007 *Phys. Rev. A* **75** 063419
- [35] Wang B B, Guo Y C, Chen J, Yan Z C, Fu P M 2012 *Phys. Rev. A* **85** 023402
- [36] Chen Y J, Fu L B, Liu J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 073902.
- [37] Zhong S Y, Liang Y Y, Wang S, Teng H, He X K, Wei Z Y 2022 *Futures* **1** 032201
- [38] He P L, He F 2015 *Phys. Scr.* **90** 045402
- [39] Zhang K, Chen J, Hao X L, Fu P M, Yan Z C, Wang B B 2013 *Phys. Rev. A* **88** 043435
- [40] Jin F C, Li F, Yang Y J, Chen J, Liu X J, Wang B B 2018 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **51** 245601
- [41] Guo Y, Fu P, Yan Z C, Gong J, Wang B B 2009 *Phys. Rev. A* **80** 063408
- [42] Jin F C, Tian Y Y, Chen J, Yang Y J, Liu X J, Yan Z C, Wang B B 2016 *Phys. Rev. A* **93** 043417
- [43] Jin F C, Chen J, Yang Y, Yan Z C, Wang B B 2016 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49** 195602
- [44] Fang Y Q, Sun F X, He Q Y, Liu Y Q 2023 *Phys. Rev. Lett.* **130** 253201
- [45] Åberg T, Guo D S, Ruscheinski J, Crasemann B 1991 *Phys. Rev. A* **44** 3169
- [46] Åberg T 1993 *Phys. Scr.* **1993** 173
- [47] Hu X, Wang H, Guo D S 2008 *Can. J. Phys.* **86** 863
- [48] Guo D S, Drake G W F 1992 *J. Phys. A: Math. Gen.* **25** 3383
- [49] Guo D S, Drake G W F 1992 *J. Phys. A: Math. Gen.* **25** 5377
- [50] Brown L S, Kibble T W B 1964 *Phys. Rev.* **133** A705
- [51] Klein O, Nishina Y 1929 *Z. Angew. Phys.* **52** 853
- [52] Yan W C, Zhu C Q, Wang J G, Feng J, Li Y F, Tan J H, Chen L M 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 084104 (in Chinese) [闫文超, 朱常青, 王进光, 冯杰, 李毅飞, 谭军豪, 陈黎明 2021 *物理学报* **70** 084104]

SPECIAL TOPIC—Ultrafast physics in atomic, molecular and optical systems

Study of single-photon Compton scattering process of bound electrons in intense laser fields by using frequency-domain theory^{*}

QIU Yuanyuan¹⁾²⁾ YANG Yujun^{1)†} GUO Yingchun³⁾

WEI Zhiyi²⁾⁴⁾⁵⁾ WANG Bingbing^{2)4)‡}

1) (*Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130012, China*)

2) (*Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

3) (*School of Physics and Electronic Science, East China Normal University, Shanghai 200241, China*)

4) (*University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

5) (*Songshan Lake Materials Laboratory, Dongguan 523808, China*)

(Received 15 April 2025; revised manuscript received 23 May 2025)

Abstract

Compton scattering is defined as an inelastic scattering process in which the interaction between strong laser fields and electrons in matter leads to photon emission. In recent years, with the rapid development of X-ray free-electron lasers, the intensity of X-ray lasers has steadily increased, and the photon energy in Compton scattering process has risen correspondingly. Previous studies focus on single-photon Compton scattering of free electrons. However, the mechanism of non-relativistic X-ray photon scattering by bound electrons remains to be elucidated. Therefore, we develop a frequency-domain theory based on non-perturbative quantum electrodynamics to investigate single-photon Compton scattering of bound electrons in strong X-ray laser fields. Our results show that the double-differential probability of Compton backscattering decreases with the increase of incident photon energy. This work establishes a relationship between Compton scattering and atomic ionization in high-frequency intense laser fields, thereby providing a platform for studying atomic structure dynamics under high-intensity laser conditions.

Keywords: Compton scattering, frequency-domain theory, bound electron

PACS: 03.65.-w, 31.30.J-

DOI: [10.7498/aps.74.20250483](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250483)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250483](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250483)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12474288, 92250303, 12074418).

[†] Corresponding author. E-mail: yangyj@jlu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: wbb@iphy.ac.cn

利用频域理论研究束缚电子在强激光场中的单光子康普顿散射过程

邱媛媛 杨玉军 郭迎春 魏志义 王兵兵

Study of single-photon Compton scattering process of bound electrons in intense laser fields by using frequency-domain theory

QIU Yuanyuan YANG Yujun GUO Yingchun WEI Zhiyi WANG Bingbing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 150301 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250483

CSTR: 32037.14.aps.74.20250483

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250483>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于微波-电子康普顿背散射的环形正负电子对撞机束流能量测量方案

Circular electron-positron collider beam energy measurement scheme based on microwave-electronic Compton backscattering

物理学报. 2021, 70(13): 131301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202081>

X射线荧光CT成像中荧光产额、退激时间、散射、偏振等关键物理问题计算与分析

Calculation and analysis of key physical problems: Fluorescence yield, deexcitation time, scattering and polarization in X-ray fluorescence CT imaging

物理学报. 2021, 70(19): 195201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210765>

事件顺序重建对康普顿相机成像分辨的影响

Influence of event sequence reconstruction on imaging resolution of Compton camera

物理学报. 2025, 74(10): 100701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241723>

利用质子能损诊断部分电离等离子体靶中的束缚电子密度

Diagnosis of bound electron density by measuring energy loss of proton beam in partially ionized plasma target

物理学报. 2024, 73(7): 073401 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231736>

动态可调谐的频域多功能可重构极化转换超表面

Dynamically tunable frequency-domain multifunctional reconfigurable polarization conversion metasurface

物理学报. 2022, 71(22): 224102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221256>

利用域排列算法设计铌酸锂晶体实现3 μm 中红外波段频域纯态单光子源

Preparation of spectrally pure single-photon source at 3 μm mid-infrared band from lithium niobate crystal with domain sequence algorithm

物理学报. 2022, 71(20): 204201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220739>