

МНОГОЧАСТИЧНЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ НЕУПРУГОМ РАССЕЙАНИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ФОТОНА АТОМОМ

А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, В. А. Явна*

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

Поступила в редакцию 4 марта 2005 г.

На примере атома неона теоретически исследовано влияние многочастичных эффектов на форму и абсолютные величины дважды дифференциального сечения резонансного неупругого рассеяния линейно поляризованного рентгеновского фотона свободным атомом в области энергий K - и KL_{23} -порогов ионизации. Расчеты выполнены в нерелятивистском приближении Хартри – Фока для волновых функций одноэлектронных состояний и дипольном приближении для аномально-дисперсионной части сечения. Аналитическая структура контактной части сечения рассеяния получена вне рамок дипольного приближения. Учтены эффекты радиальной релаксации электронных оболочек, спин-орбитального и мультиплетного расщепления, конфигурационного взаимодействия в состояниях двойного возбуждения атома, а также оже- и радиационного распадов образующихся вакансий. Установлены природа и роль эффекта корреляционных амплитуд как возникновения ненулевых амплитуд вероятностей нерадиационных переходов между промежуточными и конечными одноэлектронными состояниями рассеяния одной симметрии, полученными в разных хартри-фоковских полях. Результаты расчета носят предсказательный характер, а при энергии падающего фотона 5.41 кэВ находятся в хорошем согласии с результатами эксперимента по измерению рентгеновского $K\alpha$ -эмиссионного спектра атома неона.

PACS: 32.80.-t

1. ВВЕДЕНИЕ

Быстрое развитие техники получения синхротронного рентгеновского излучения [1] открывает возможность экспериментального и теоретического изучения высокоинформативной трехмерной (сечение, энергия падающего фотона, энергия рассеянного фотона) квантовомеханической наблюдаемой одного из фундаментальных в микромире процесса неупругого рассеяния фотона свободным атомом — дважды дифференциального сечения рассеяния — в непосредственной близости ($\sim \pm 10$ эВ) энергий порогов ионизации его глубоких оболочек.

Этот процесс практически на порядок менее интенсивен, чем процесс упругого (рэлеевского, электронами атома [2, 3]) рассеяния фотона атомом. Однако следует ожидать того, что по сравнению с рэлеевским рассеянием процесс резонансного неупруго-

го (Ландсберга – Мандельштама – Рамана – Комптона [4–6]) рассеяния фотона атомом несет куда более богатую информацию об исследуемой многоэлектронной системе, в частности, о природе и роли многочастичных эффектов и их квантовой интерференции.

Существующее и пока единственное такое исследование для свободного атома [7] (измерение и расчет трехмерных рентгеновских $L\alpha, \beta$ -эмиссионных спектров атома ксенона) в своей теоретической части, так же как и пионерские теоретические работы Оберга и Туллки (резонансное неупругое рассеяние рентгеновского фотона в области энергий K -порогов ионизации атомов неона, аргона и марганца, см. обзор [8]), выполнено без учета широкой иерархии многочастичных эффектов. В частности, не были учтены эффекты радиальной релаксации электронных оболочек в полях образующихся основных вакансий и кратного возбуждения/ионизации основного состояния атома, сопровождающие и существен-

*E-mail: hopersky_vm_1@rgups.ru

но определяющие процесс взаимодействия фотона с атомом [9].

Более того, наряду с проблемой учета многочастичных эффектов, некоторые другие аналитические аспекты квантовой теории процесса требуют проведения дополнительных исследований. Так, необходимо установить аналитическую структуру контактной части дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния вне рамок дипольного приближения при описании процесса еще в рентгеновском диапазоне энергий падающего и рассеянного фотонов.

В данной работе на примере атома неона (заряд ядра $Z = 10$, электронная конфигурация основного состояния $[0] \equiv 1s^2 2s^2 2p^6 ({}^1S_0)$) проводится первое теоретическое исследование роли многочастичных эффектов в определении абсолютных величин и формы дважды дифференциального сечения резонансного неупругого рассеяния рентгеновского фотона (диапазон энергий фотона $\hbar\omega$ от 600 эВ до 1.5 МэВ) в области энергии порога ионизации глубокой оболочки свободного атома. При этом мы не рассматриваем процессов неупругого рассеяния фотона ядром атома, нуклонами ядра и электрон-позитронными парами, рождаемых кулоновским полем ядра. Их влияние на сечение неупругого рассеяния в рентгеновском диапазоне энергий падающего фотона несущественно [10].

Мы также предпринимаем попытку установления аналитической структуры контактной части дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния фотона атомом вне рамок дипольного приближения.

Такие исследования широко востребованы современной физикой. В частности, они важны в контексте проблем создания рентгеновского лазера на неоподобной плазме как активной среде [11] и получения спектральных данных (например, рентгеновских эмиссионных спектров неоподобных элементов) для астрофизики [12].

2. ТЕОРИЯ МЕТОДА

2.1. Аномально-дисперсионная часть сечения

Конкретизируем аналитическую структуру аномально-дисперсионной части дважды дифференциального сечения процесса резонансного неупругого рассеяния линейно поляризованного фотона в области энергии порога ионизации $1s$ -оболочки атома Ne (здесь и далее при записи конфигурации заполненные электронные оболочки не указаны)

$$\hbar\omega_1 + [0] \rightarrow 1snp({}^1P_1) \rightarrow 2p^5mp({}^1S_0, {}^1D_2) + \hbar\omega_2,$$

в случае схемы предполагаемого эксперимента $\mathbf{e}_{1,2} \perp P$.

Мы не учитываем промежуточных $2snp$ - и $2p^5n(s, d)$ -состояний рассеяния, поскольку энергии порогов ионизации $2s$ - и $2p$ -оболочек сильно отделены от энергии порога ионизации $1s$ -оболочки (например, $I_{1s} - I_{2s} \approx 822$ эВ). Здесь также определены энергии падающего ($\hbar\omega_1$) и рассеянного ($\hbar\omega_2$) фотонов, векторы поляризации падающего (\mathbf{e}_1) и рассеянного (\mathbf{e}_2) фотонов и плоскость P рассеяния, проходящая через волновые векторы падающего (\mathbf{k}_1) и рассеянного (\mathbf{k}_2) фотонов.

В этом случае $(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2 = 1$ и известное общее аналитическое выражение для аномально-дисперсионной части дважды дифференциального сечения резонансного неупругого рассеяния фотона атомом во втором порядке квантовой механической теории возмущений (формула Крамерса–Гейзенберга–Валлера) [8, 10] после суммирования/интегрирования по np -промежуточным и mp -конечным состояниям рассеяния дискретного/сплошного спектра и суммирования по 1S_0 - и 1D_2 -термам принимает вид:

$$\frac{d^2\sigma_{\perp}}{d\omega_2 d\Omega} = r_0^2 \frac{\omega_2}{\omega_1} \rho \sum_{i=1,2} \zeta_i Q_i, \quad (1)$$

$$Q_i = \sum_{m>f}^{\infty} (R_m^2 + I_m^2) L_{mi} + (R_i^2 + I_i^2) \Psi_i, \quad (2)$$

$$R_m = \frac{\pi}{\gamma_{1s}} \sum_{n>f} (\omega_1 - \Delta_n) A_{nm} L_n - R_m^{(e)}, \quad (3)$$

$$I_m = \pi \sum_{n>f} A_{nm} L_n. \quad (4)$$

Физическая интерпретация происхождения и аналитической структуры амплитуды $R_m \sqrt{\rho}$ вероятности рассеяния может быть дана в представлении диаграмм Голдстоуна–Хаббарда–Фейнмана [13] нерелятивистской квантовой теории многих тел. На рис. 1а (рис. 1б, см. п. 2.2) для неупругого рассеяния рентгеновского фотона атомом Ne в области энергии порога ионизации $1s$ -оболочки приведена часть первых (основных) слагаемых бесконечного ряда диаграмм для амплитуды $R_m \sqrt{\rho}$. На рисунке введены следующие обозначения: $\omega_1(\omega_2)$ — падающий (рассеянный) фотон, $i(j) = 1s(2p)$ — вакансия, $m = mp$ — фотоэлектрон конечного, а $n = np$ — фотоэлектрон промежуточного состояний рассеяния, стрелка вправо (влево) — состояние рождается выше (ниже) f -уровня Ферми (совокупность квантовых чисел валентной оболочки атома),

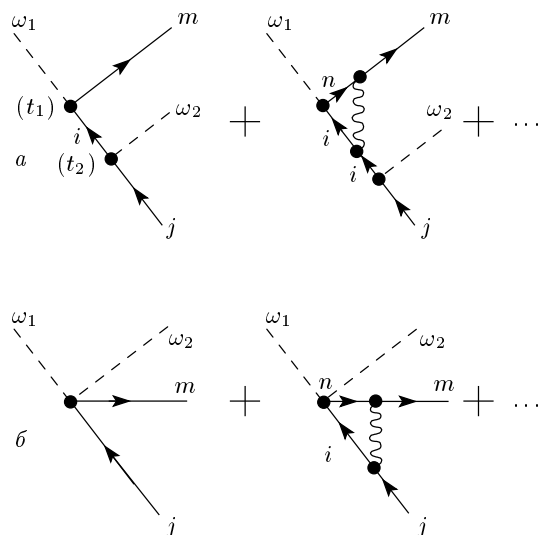


Рис. 1. Представление диаграмм Голдстоуна–Хаббарда–Фейнмана для аномально-дисперсионной (а) и контактной (б) амплитуд вероятности неупругого рассеяния рентгеновского фотона атомом Ne в области энергии порога ионизации 1s-оболочки. Обозначения даны в п. 2.1. Точки обозначают бесконечный ряд диаграмм

волнистая линия — кулоновское взаимодействие, направление времени — слева направо ($t_1 < t_2$). Так, например, первая диаграмма на рис. 1а описывает амплитуду следующего процесса. В момент времени t_1 глубокая 1s-оболочка атома поглощает ω_1 -фотон. В результате радиационного перехода $1s \rightarrow mp$ (с амплитудой вероятности $\sim \langle 1s | \hat{r} | mp \rangle$) возникает $i(1s)$ -вакансия и $m(mp)$ -фотоэлектрон. В момент времени $t_2 > t_1$ излучается ω_2 -фотон при радиационном $1s \rightarrow 2p$ -распаде 1s-вакансии (с амплитудой вероятности $\sim \langle 1s | \hat{r} | 2p \rangle$). В результате $i(1s)$ -вакансия «захлопывается» $2p$ -электроном и образуется валентная $j(2p)$ -вакансия.

В выражениях (3) и (4) амплитуда A_{nm} имеет вид

$$A_{nm} = (\omega_2 - \omega_1 + \Delta_n) \Delta_n \langle 1s_0 | \hat{r} | np_c \rangle \langle np_+ | mp \rangle, \quad (5)$$

$$\langle 1s_0 | \hat{r} | np_c \rangle = \int_0^\infty P_{1s_0}(r) P_{np_c}(r) r dr,$$

$$\langle np_+ | mp \rangle = \int_0^\infty P_{np_+}(r) P_{mp}(r) dr.$$

Амплитуда (5) описывает абсорбционную часть полной амплитуды вероятности рассеяния и определена через амплитуду вероятности радиационного пе-

рехода из начального в промежуточное состояние рассеяния, описываемое корреляционной волновой функцией:

$$|np_c\rangle = |np_+\rangle - |2p_+\rangle \frac{\langle 2p_0 | np_+\rangle}{\langle 2p_0 | 2p_+\rangle}.$$

Здесь, например, $P_{np_+}(r)$ — радиальная часть волновой функции np_+ -электрона.

В свою очередь, структура корреляционной волновой функции определена методами теории неортогональных орбиталей [9] и выражена через нерелятивистские волновые функции одноэлектронных состояний, полученных в разных хартри-фоковских полях.

Появление глубокой nl -вакансии в атомном остове приводит к тому, что, прежде всего, внешние оболочки атомного остатка реагируют на разрушение nl^{4l+2} -экрана между ними и атомным ядром, заметно уменьшая свой средний радиус. Смещение к ядру электронной плотности оболочек атомного остатка сопровождается дополнительной делокализацией волновой функции фотоэлектрона. Следствием такой делокализации является уменьшение амплитуды вероятности фотопоглощения. Описанный эффект известен в литературе как эффект радиальной релаксации волновых функций одноэлектронных состояний при появлении остоновых вакансий [3, 9].

В исследуемой нами задаче эффект радиальной релаксации учтен следующим образом. Волновые функции $(n, 2)p_+$ -электронов получены в поле глубокой 1s-вакансии в результате решения нелинейных интегро-дифференциальных уравнений самосогласованного поля Хартри–Фока для конфигурации промежуточного состояния рассеяния $1snr$. Волновые функции mp -электронов вычислены в поле валентной $2p$ -вакансии решением уравнений Хартри–Фока для конфигурации конечного состояния рассеяния $2p^5mp$. При этом волновые функции $1s_0$ -, $2p_0$ -электронов остова определены с помощью решения уравнений Хартри–Фока для конфигурации начального состояния рассеяния [0].

Заметим, что в приближении игнорирования эффекта радиальной релаксации имеем $|np_c\rangle \rightarrow |np_0\rangle$ и $\langle np_+ | mp \rangle \rightarrow \delta_{nm}$ (символ Кронекера–Вейерштрасса). Здесь волновая функция np_0 -электрона получена решением уравнения Хартри–Фока для конфигурации $1s_0np_0$. Как следствие, амплитуда (5) принимает вид

$$A_{nm} \rightarrow (\omega_2 - \omega_1 + \Delta_n) \Delta_n \langle 1s_0 | \hat{r} | np_0 \rangle \delta_{nm}$$

и операция суммирования/интегрирования в формулах (3) и (4) исчезает, что существенно упрощает аналитическую структуру сечения (1).

В выражениях (1)–(3) также определены спектральные функции:

$$L_{mi} = \frac{\gamma_b}{\pi} \frac{1}{(\omega_1 - \omega_2 - \Delta_{mi})^2 + \gamma_b^2},$$

$$L_n = \frac{\gamma_{1s}}{\pi} \frac{1}{(\omega_1 - \Delta_n)^2 + \gamma_{1s}^2},$$

$$\Psi_i = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctg \frac{\omega_1 - \omega_2 - \Delta_i}{\gamma_b},$$

использована атомная система единиц ($e = \hbar = m_e = 1$) и введены обозначения: r_0 — классический радиус электрона, Ω — пространственный угол (угол вылета рассеянного фотона), $\gamma_{1s(2p)} = \Gamma_{1s(2p)}/2$, $\Gamma_{1s(2p)}$ — полная (сумма оже- и радиационной компонент) ширина распада $1s(2p)$ -вакансии,

$$\Delta_n = E(1snp) - E(0),$$

$$\Delta_{mi} = E(2p_{3/2}^5 mp) - E(0) + \delta_i,$$

$$\Delta_i = E(2p_{3/2}^5) - E(0) + \delta_i,$$

$$\delta_i = \{0, i = 1; \delta_{SO}, i = 2\}, \quad \zeta_i = \{2, i = 1; 1, i = 2\},$$

δ_{SO} — константа спин-орбитального расщепления $2p$ -оболочки атомного остова, E — полные хартри-фоковские энергии соответствующих конфигураций. Символ $\sum_{n>f}$ обозначает суммирование/интегрирование по промежуточным состояниям рассеяния дискретного/сплошного спектра и

$$\sqrt{\rho} = \langle 1s | \hat{r} | 2p_+ \rangle K_{1s} K_{1s2p},$$

где K — произведение интегралов перекрытия радиальных частей волновых функций не участвующих в радиационном переходе электронов одной симметрии из конфигурации основного состояния атома и конфигураций с $1s$ -вакансией (K_{1s}), а также из конфигураций с $1s$ - и $2p$ -вакансиями (K_{1s2p}).

Амплитуда $\sqrt{\rho}$ описывает эмиссионную часть полной амплитуды вероятности рассеяния и определена через амплитуду вероятности радиационного перехода из промежуточного в конечное состояние рассеяния, $\sqrt{\rho} \approx \langle 1s | \hat{r} | 2p_+ \rangle$.

Появление в спектральных функциях L_{mi} и Ψ_i величины $\gamma_b = \Gamma_{beam}/2$ обусловлено результатом интегрирования сечения (1) с экспериментально фиксируемой функцией φ_b распределения по энергии падающего на атом рентгеновского излучения [8]:

$$\frac{d^2 \sigma_{\perp}(\omega_1)}{d\omega_2 d\Omega} = \int_0^{\infty} \frac{d^2 \sigma_{\perp}(\omega)}{d\omega_2 d\Omega} \varphi_b(\omega_1, \omega) d\omega. \quad (6)$$

В данной работе в качестве функции φ_b взята коши-лорентцевская спектральная функция:

$$\varphi_b(\omega_1, \omega) = \frac{\gamma_b}{\pi} \frac{1}{(\omega_1 - \omega)^2 + \gamma_b^2}.$$

Парциальные амплитуды вероятности рассеяния R_i и I_i получаются из формул (3) и (4) заменой волновой функции конечного состояния рассеяния дискретного спектра на волновую функцию состояния сплошного спектра. При этом в силу закона сохранения энергии при неупругом рассеянии фотона атомом энергия электрона сплошного спектра определяется равенством $\varepsilon_i = \omega_1 - \omega_2 - \Delta_i$, $\varepsilon_i \geq 0$.

При интегрировании по промежуточным εp_+ -состояниям рассеяния сплошного спектра в R_i -, I_i -амплитудах мы не учитывали многочастичный эффект послестолкновительного взаимодействия. Таковым в данном случае назван эффект изменения радиальной части волновой функции фотоэлектрона сплошного спектра в результате радиационного перехода $2p \rightarrow 1s$ и электростатического взаимодействия фотоэлектрона с εd -электроном сплошного спектра состояния $1s \rightarrow 2p^4 \varepsilon d$ оже-распада $1s$ -вакансии.

В работе [14] показано, что учет этого эффекта в теоретических спектрах поглощения рентгеновского фотона глубокой оболочкой легкого ($Z \leq 20$) атома практически не изменяет результатов одноэлектронного приближения.

Однако наличие в сечении (1) наряду с абсорбционной и эмиссионной компоненты полной амплитуды вероятности рассеяния оставляет вопрос о роли эффекта послестолкновительного взаимодействия в спектрах резонансного неупругого рассеяния открытым. Изучение этого вопроса является предметом будущих исследований.

Таким образом, полагаем

$$\langle \varepsilon p_+ | \varepsilon_i p \rangle \rightarrow \delta(\varepsilon - \varepsilon_i),$$

где δ — дельта-функция Дирака.

Амплитуда $R_m^{(e)}$ в формуле (3) имеет вид

$$R_m^{(e)} = \sum_{n>f} (\omega_2 + I_n)^{-1} A_{nm}$$

и описывает обменные по фотону процессы неупругого рассеяния (атом возбуждается и излучает рассеянный ω_2 -фотон раньше, чем поглощает падающий ω_1 -фотон).

Как показал наш расчет для атома Ne, вклад амплитуды $R_m^{(e)}$ не превышает 1% от вклада первых слагаемых амплитуды R_m в (3). Следует заметить,

что в случае упругого (рэлеевского) рассеяния фотона атомом роль обменных амплитуд такого типа существенно возрастает. Их игнорирование, например, в случае атома Ne приводит почти к 40 % погрешности расчета абсолютных величин дифференциального сечения упругого рассеяния в области энергии K -порога ионизации [3].

Вклад обменных процессов при определении амплитуды I_m (4) имеет порядок величины $\gamma_{1s}(\omega_2 + I_n)^{-2} \ll 1$ и нами не учитывался. Отметим, что в контактной части (п. 2.2) полной амплитуды вероятности неупругого рассеяния вклады обменного типа отсутствуют.

Парциальные амплитуды A_{nm} (5) определены нами в дипольном приближении для фурье-компонент оператора электромагнитного поля:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j \rightarrow 0 \Rightarrow \exp\{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j)\} \rightarrow 1,$$

где \mathbf{k} — волновой вектор падающего (рассеянного) фотона, \mathbf{r}_j — радиус-вектор j -электрона атома. Как известно [10], дипольное приближение эквивалентно выполнению неравенства $\lambda \gg r_{nl}$, где λ — длина волны фотона и r_{nl} — средний радиус nl -оболочки атома, определяющий радиальный интеграл радиационного перехода. Для рентгеновских областей энергий, исследуемых в данной работе, это неравенство заведомо выполняется. В самом деле, для энергии падающего фотона от 860 эВ до 5.42 кэВ (λ от 14.43 Å до 2.29 Å) имеем $\lambda \gg r_{1s}(\text{Ne}) = 0.08$ Å.

Высшие мультиполи амплитуд вероятностей радиационного перехода при расчете амплитуды A_{nm} мы не учитывали. Однако необходимо заметить следующее. Уменьшение отношения λ/r_{nl} и увеличение угла рассеяния может привести к необходимости выхода за рамки дипольного приближения еще в рентгеновском диапазоне энергий падающего и рассеянного фотонов. Так, в работе [15] показано, что включение высших мультиполей при вычислении дифференциального сечения упругого рассеяния фотона энергии $\omega = 22.1$ кэВ ($\lambda = 0.561$ Å) $1s$ -оболочкой атома алюминия ($r_{1s}(\text{Al}) = 0.063$ Å) при угле рассеяния $\theta = 150^\circ$ изменяет результат дипольного приближения приблизительно в 2 раза.

Расчет всех радиальных интегралов радиационного перехода проведен в форме длины для оператора перехода. Как показало наше исследование, использование формы скорости при расчете интегралов с участием глубокой $1s$ -оболочки для атомов с зарядом ядра $Z \geq 10$ изменяет абсолютные значения таких интегралов не более чем на 1 %. Таким образом, многочастичный эффект корреляций приближения случайных фаз с обменом [16] (в случае

атома Ne смешивание конфигурации $1snp$ с конфигурациями $2smp$ и $2p^5md$ как учет межоболочечных корреляций) оказывается пренебрежимо малым и в данной работе не учитывается.

2.2. Контактная часть сечения

Определенная совокупность конечных состояний неупругого рассеяния фотона атомом не учитывается аномально-дисперсионной частью полной амплитуды вероятности рассеяния, но является результатом так называемого контактного (томпсоновского) рассеяния. В этом случае в формализме диаграмм Голдстоуна–Хаббарда–Фейнмана для амплитуды вероятности рассеяния в вершине взаимодействия сходятся четыре линии (рис. 1б): две фотонные (ω_1 и ω_2), электрона ($ml, m(l \pm 1)$) и вакансии (jl). Так, в случае атома Ne таковыми оказываются конечные $(1s, 2s)ms-$, $(1s, 2s)mp-$ и $2p^5m(s, d)$ -состояния рассеяния.

Найдем аналитическую структуру дважды дифференциального сечения неупругого контактного рассеяния линейно поляризованного фотона атомом вне рамок традиционно используемого в рентгеновском диапазоне [8, 10] дипольного приближения.

Представим известное общее аналитическое выражение для дважды дифференциального сечения неупругого контактного рассеяния фотона атомом во втором порядке квантовомеханической теории возмущений [8, 10] в виде

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega_2 d\Omega} = r_0^2 (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2 \frac{\omega_2}{\omega_1} \sum_{n_1 l_1 \leq f} \sum_{n_2 l_2 > f} S M_{12}^T L_{12}, \quad (7)$$

где

$$M_{12}^T = [J]^{-1} \sum_{T'} \sum_{MM'} \left| A_{TT'}^{MM'}(n_1, n_2) \right|^2, \quad (8)$$

$$A_{TT'}^{MM'}(n_1, n_2) = \langle s_1, TM | \sum_{k=1}^N \exp\{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_k)\} | s_{12}, T'M' \rangle, \quad (9)$$

$$L_{12} = \frac{\gamma_1}{\pi} \frac{1}{(\omega_1 - \omega_2 - \Delta_{12})^2 + \gamma_1^2},$$

$$T \equiv LSJ, \quad \gamma_1 = \frac{\Gamma_1}{2}, \quad [x] \equiv 2x + 1.$$

В формуле (8) проведено суммирование по термам T' фиксированного конечного состояния рассеяния $s_{12} \equiv n_1 l_1^{N_1-1} n_2 l_2$, а также суммирование по M' -проекциям полного момента J' в конечном s_{12}

и усреднение по M -проекциям полного момента J в начальном $s_1 \equiv n_1 l_1^{N_1}$ состояниях рассеяния.

В формуле (7) использованы атомная система единиц и следующие обозначения: Γ_1 — полная ширина распада $n_1 l_1$ -вакансии атомного остатка, N_1 — число заполнения $n_1 l_1$ -оболочки основного состояния атома, N — число электронов в атоме, \mathbf{q} — вектор рассеяния (вектор переданного атому импульса), модуль которого в случае неупругого рассеяния равен

$$q = |\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2| = \frac{\omega_1}{c} \sqrt{1 + \beta^2 - 2\beta \cos \theta}, \quad \beta = \frac{\omega_2}{\omega_1}, \quad (10)$$

θ — угол рассеяния (угол между волновыми векторами падающего и рассеянного фотонов), c — скорость света, \mathbf{r}_k — радиус-вектор k -электрона атома, $\Delta_{12} = E(s_{12}) - E(s_1)$.

Преобразуем выражение (8), используя методы теории неприводимых тензорных операторов [17].

Представим экспоненту в (9) функциональным рядом по сферическим функциям $C^{(t)}$ и сферическим функциям Бесселя j_t первого рода порядка t . Учтем теорему Вигнера–Эккарта для матричного элемента многоэлектронного неприводимого тензорного оператора перехода,

$$Q_p^{(t)} = \sum_{k=1}^N C_p^{(t)}(\mathbf{r}_k) j_t(qr_k),$$

условие ортогональности символов Вигнера и теорему сложения сферических функций.

Тогда для (8) получаем

$$M_{12}^T = [J]^{-1} \sum_{T'} \sum_{t=0}^{\infty} |(s_1, T \| Q^{(t)} \| s_{12}, T')|^2. \quad (11)$$

В (11) выражение для приведенного матричного элемента оператора $Q^{(t)}$ перехода в схеме LS -связи имеет вид

$$\begin{aligned} (s_1, T \| Q^{(t)} \| s_{12} L_1 S_1, T') &= \\ &= (-1)^{l_2 + L_1 - S - J'} \delta(S, S') \times \\ &\times \sqrt{N_1 [L, L', J, J']} (l_1^{N_1} LS \| l_1^{N_1 - 1} (L_1 S_1) l_1) \times \\ &\times \begin{Bmatrix} l_1 & L & L_1 \\ L' & l_2 & t \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & J & S \\ J' & L' & t \end{Bmatrix} \times \\ &\times (l_1 \| C^{(t)} \| l_2) W_t(n_1 l_1, n_2 l_2), \quad (12) \end{aligned}$$

$$W_t(n_1 l_1, n_2 l_2) = \langle n_1 l_1 | j_t(qr) | n_2 l_2 \rangle,$$

где $L_1 S_1$ — терм $n_1 l_1^{N_1 - 1}$ -оболочки атомного остатка.

Выражение (7) с учетом (11) и (12) дает искомого аналитическое представление для дважды

дифференциального сечения неупругого контактного рассеяния фотона атомом вне рамок дипольного ($qr \rightarrow 0$) приближения. При этом для учета эффектов спин-орбитального расщепления $n_1 l_1$ -оболочек ($l_1 \geq 1$) атомного остова необходимо сделать замену

$$M_{12}^T L_{12} \rightarrow \sum_{i=1,2} \zeta_i (M_{12}^T L_{12})_i,$$

а для учета распределения по энергии падающего на атом рентгеновского излучения выполнить операцию интегрирования (6).

Более того, наряду с (7) необходимо также учесть и амплитуды вероятности контактного рассеяния, интерферирующие с аномально-дисперсионной амплитудой. Так, в случае атома Ne в схеме предполагаемого эксперимента ($\mathbf{e}_{1,2} \perp P$) для учета интерференции контактной и аномально-дисперсионной частей полной амплитуды вероятности перехода в конечные $2p^5 mp$ -состояния рассеяния в амплитуде (3) необходимо сделать замену

$$R_m \rightarrow R_m + K_{1s} K_{2p} \rho^{-1/2} W_0(2p, mp). \quad (13)$$

Мы не проводили детального изучения формы и абсолютных величин сечения контактного рассеяния (7) в широких областях рентгеновского и гамма-диапазонов энергий падающего фотона, полагая это предметом будущих исследований.

Однако на примере атома Ne для установления порядка величины вклада контактной части сечения в полное сечение рассеяния в области энергий K - и KL_{23} -порогов ионизации мы исследовали форму и абсолютные величины модификации сечения (7):

$$\frac{d^2 \sigma_{\perp}}{d\omega_2 d\Omega} = r_0^2 \frac{\omega_2}{\omega_1} \sum_{nl \leq f} (4l + 2) K_{nl}^2 \Psi_{nl} \Phi_{nl}, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{nl} &= W_0^2(nl, \varepsilon_n l) + l W_1^2(nl, \varepsilon_n(l - 1)) + \\ &+ (l + 1) W_1^2(nl, \varepsilon_n(l + 1)), \quad (15) \end{aligned}$$

$$\Psi_{nl} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctg \frac{\omega_1 - \omega_2 - I_{nl}}{\gamma_{nl}},$$

$$\varepsilon_n = \omega_1 - \omega_2 - I_{nl}, \quad \gamma_{nl} = \frac{\Gamma_{nl}}{2},$$

где I_{nl} — энергия порога ионизации nl -оболочки основного состояния атома, Γ_{nl} — полная ширина распада nl -вакансии атомного остатка.

Формула (14) следует из (7) с учетом интерференции (13) и следующих упрощений:

1) учитываются лишь переходы в конечные состояния $\varepsilon_n(l, l \pm 1)$ рассеяния сплошного спектра;

2) не учитываются эффекты спин-орбитального расщепления nl -оболочек ($l \geq 1$) атомного остова.

В дипольном приближении для оператора контактного перехода в амплитуде (9) сферические функции Бесселя $j_0(qr) \rightarrow 1$, $j_1(qr) \rightarrow 0$ и выражение (15) принимает вид

$$\Phi_{nl} \rightarrow \langle nl | \varepsilon_n l \rangle^2. \quad (16)$$

Обратим внимание на тот факт развиваемой теории, что в дипольном приближении для фиксированной схемы предполагаемого эксперимента исчезает зависимость сечения контактного рассеяния (7) от угла рассеяния.

Далее с учетом эффекта релаксации электронных оболочек атомного остатка в поле nl -вакансии проведем сравнение результата (15) с результатом (16), формально распространенным на область значений $0 < qr < 1$, и обнаружим их заметное различие для ненулевых углов рассеяния уже в рентгеновской области энергий падающего и рассеянного фотонов.

В данной работе мы не сравнивали результат (14) с результатами других приближений, наряду с дипольным широко используемых в опубликованной литературе при исследовании комптоновского рассеяния (конечное состояние неупругого рассеяния — состояние сплошного спектра) [10, 18].

В частности, мы не рассматривали так называемого импульсного приближения. Причина этого в следующем. Для исследуемых нами энергий падающего ($\omega_1^{max} \sim 5500$ эВ) и рассеянного ($\omega_2^{max} \sim 880$ эВ) фотонов, например, при угле рассеяния $\theta = 90^\circ$ с учетом (10) получаем $qa_0 \approx 1.5$ (a_0 — радиус Бора), что лежит вне области значений основного критерия применимости импульсного приближения $qa_0 \gg 1$ [19, 20].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ОБСУЖДЕНИЕ

В качестве объекта исследования взят свободный атом Ne. Результаты расчета сечений рассеяния (1) и (14) в рентгеновских областях энергий падающего ($\omega_1 = 860$ – 5500 эВ) и рассеянного ($\omega_2 = 760$ – 880 эВ) фотонов представлены на рис. 2–7 и в табл. 1, 2.

Для полных ширин распадов $1s$ - и $2p$ -вакансий приняты значения $\Gamma_{1s} = 0.23$ эВ (измеренное методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, приведенное в работе [21]) и $\Gamma_{2p} = 3.95 \cdot 10^{-8}$ эВ (теоретический результат работы [22]). Для параметра ширины в функции φ_b из (6) принято значе-

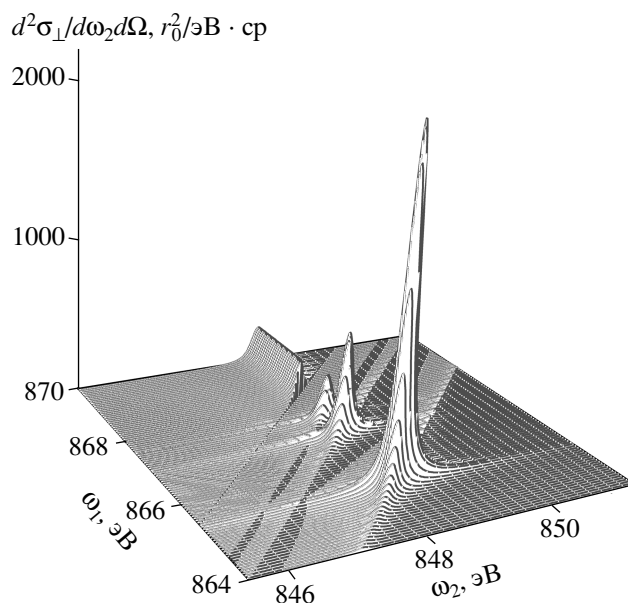


Рис. 2. Дважды дифференциальное сечение резонансного неупругого рассеяния линейно поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния) рентгеновского фотона атомом Ne в области энергии K -порога ионизации $I_{1s} = 868.399$ эВ. $\omega_1(\omega_2)$ — энергия падающего (рассеянного) фотона, Ω — пространственный угол вылета рассеянного фотона, $r_0^2 = 7.941 \cdot 10^{-26}$ см², $\Gamma_{beam} = 0.20$ эВ, $\Gamma_{1s} = 0.23$ эВ, $\Gamma_{2p} = 3.95 \cdot 10^{-8}$ эВ, $\delta_{SO} = 0.094$ эВ

ние $\Gamma_{beam} = 0.20$ эВ. Тем самым мы предположили практически одинаковыми уровни спектрального разрешения эксперимента по энергиям падающего (Γ_{beam}) и рассеянного ($\sim \Gamma_{1s}$) фотонов. Теоретическое значение константы спин-орбитального расщепления $2p$ -оболочки $\delta_{SO} = 0.094$ эВ взято из работы [23].

3.1. Область энергии K -порога ионизации

На рис. 2 представлено сечение (1) в непосредственной близости энергии порога ионизации $1s$ -оболочки, $I_{1s} = 868.399$ эВ (нерелятивистский расчет данной работы).

Волновые функции и энергии начального, промежуточного и конечного состояний рассеяния получены в нерелятивистском одноконфигурационном приближении Хартри–Фока.

В качестве np_+ -промежуточных и mp -конечных состояний рассеяния дискретного спектра учтены состояния с $n, m = 3, 4, 5$. Амплитуды A_{nm} с главными квантовыми числами $n = m$ опре-

деляют лидирующие резонансы формы сечения: $A_{33} > A_{44} > A_{55}$ при энергиях (в эВ) фотонов соответственно $(\omega_1; \omega_2) = (865.420; 848.470), (867.030; 848.515), (867.612; 848.530)$.

Пример аналитического решения проблемы учета полноты набора состояний дискретного спектра ($n, m = 3-\infty$) в случае построения дифференциального сечения резонансного упругого (рэлеевского) рассеяния рентгеновского фотона в области энергии K -порога ионизации атома Ne дан в недавней работе авторов [24]. В случае же резонансного неупругого рассеяния попытка аналитического решения такой проблемы существенно осложнена наличием одновременно двух (абсорбционной и эмиссионной) составляющих полной амплитуды вероятности рассеяния и является предметом будущих исследований.

Канал сплошного спектра конечного состояния рассеяния $2p^5\varepsilon_i p$ открывается при $\omega_1 = I_{1s}$ и $\omega_2 = 848.555$ эВ. При $\omega_1 > I_{1s}$ сечение (1) обретает пространственно протяженную форму рентгеновского (возбужденного фотонным ударом) $K\alpha_{1,2}$ -эмиссионного спектра атома Ne [25].

Учет эффекта радиальной релаксации электронных оболочек состояний рассеяния в полях $1s$ - и $2p$ -вакансий приводит практически к двукратному уменьшению абсолютных значений сечения (1) по сравнению со значениями, рассчитанными без учета этого эффекта.

Результат расчета сечения (1) без учета эффекта релаксации топологически воспроизводит результат, полученный с учетом этого эффекта, и на рис. 2 не приведен во избежание его загромождения.

Расходящиеся под углом 45° на плоскости ($\omega_1; \omega_2$) в обе стороны от каждого резонанса и порога возникновения $K\alpha_{1,2}$ -структуры спектра рассеяния «ребристые» структуры обусловлены наличием в выражении для сечения (1) спектральных L_{mi} -функций (знаменатель минимален на уравнениях прямых $\omega_1 = \omega_2 + \Delta_{mi}$) и минимального ($\varepsilon_i = 0$) значения энергии электрона сплошного спектра (амплитуда вероятности радиационного перехода $\langle 1s_0 | \hat{r} | \varepsilon_i p_+ \rangle$ максимальна на уравнении прямой $\omega_1 = \omega_2 + \Delta_i$).

Малость величины $\delta_{SO} = 0.094$ эВ $< \Gamma_{1s} = 0.23$ эВ в случае атома Ne объясняет то, что на рис. 2 (как и на последующих далее) компоненты $j + 1/2$ и $j - 1/2$ ($j = 1$) дублета спин-орбитального расщепления $2p$ -оболочки практически не разрешены.

Эффект радиальной релаксации электронных оболочек, наряду с возникновением корреляционной волновой функции $|np_c\rangle$ при переходе из началь-

ного в промежуточное состояние рассеяния, приводит также к эффекту возникновения ненулевых $\langle np_+ | \varepsilon p \rangle$, $\langle xp_+ | mp \rangle$ -амплитуд вероятностей нерадиационных переходов между возбужденными одноэлектронными состояниями одной симметрии, полученными в разных хартри-фоковских полях.

Этот эффект не проявляется в процессах поглощения и упругого рассеяния [3], но сопровождает процесс резонансного неупругого рассеяния фотона атомом следующим образом.

1. В выражениях для R_m - и I_m -амплитуд вероятности рассеяния в состоянии дискретного спектра появляются составляющие вида

$$R_m^C = \langle mp | C_R^+ \rangle, \quad I_m^C = \gamma_{1s} \langle mp | C_I^+ \rangle, \quad (17)$$

где определены корреляционные волновые функции:

$$|C_R^+ \rangle = \int_0^\infty (\omega_1 - x_{1s}) |D(x)\rangle dx, \quad (18)$$

$$|C_I^+ \rangle = \int_0^\infty |D(x)\rangle dx, \quad (19)$$

$$|D(x)\rangle = x_{1s}(x_{1s} + \omega_2 - \omega_1) \frac{\langle 1s_0 | \hat{r} | xp_c \rangle}{(\omega_1 - x_{1s})^2 + \gamma_{1s}^2} |xp_+\rangle, \\ x_{1s} = x + I_{1s}.$$

2. В выражениях для R_i - и I_i -амплитуд вероятности рассеяния в состоянии сплошного спектра появляются составляющие вида

$$R_i^C = \langle \varepsilon_i p | S_R^+ \rangle, \quad I_i^C = \gamma_{1s} \langle \varepsilon_i p | S_I^+ \rangle, \quad (20)$$

где определены корреляционные волновые функции:

$$|S_R^+ \rangle = \sum_{n>f}^\infty (\omega_1 - I_{1snp}) |B_n\rangle, \quad (21)$$

$$|S_I^+ \rangle = \sum_{n>f}^\infty |B_n\rangle, \quad (22)$$

$$|B_n\rangle = I_{1snp}(I_{1snp} + \omega_2 - \omega_1) \frac{\langle 1s_0 | \hat{r} | np_c \rangle}{(\omega_1 - I_{1snp})^2 + \gamma_{1s}^2} |np_+\rangle, \\ I_{1snp} = E(1snp) - E(0).$$

Эффект возникновения амплитуд (17) и (20) на корреляционных функциях (18), (19) и (21), (22) назовем эффектом корреляционных амплитуд при резонансном неупругом рассеянии фотона свободным атомом.

Амплитуды (17) описывают эффект перехода сплошного спектра xp_+ промежуточного состояния

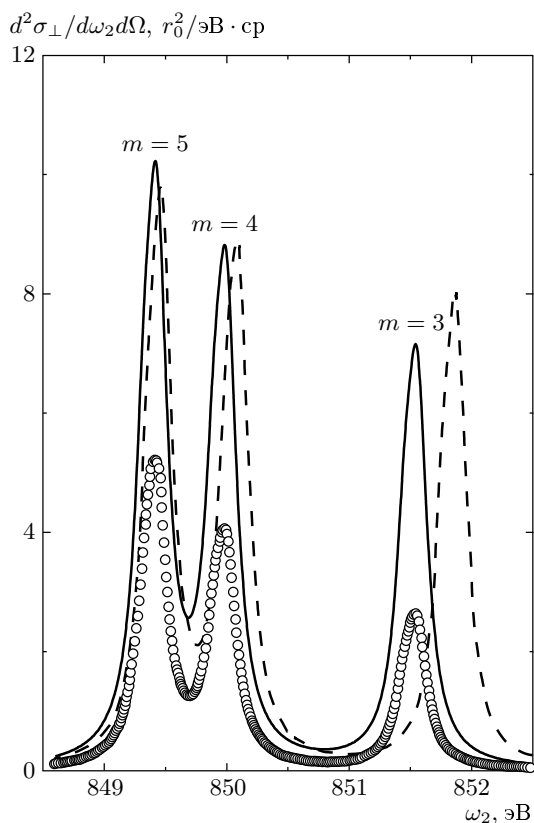


Рис. 3. Эффект корреляционных амплитуд (ЭКА): роль R_m^C - и I_m^C -амплитуд перехода (17) для главного квантового числа конечного состояния рассеяния дискретного спектра $m = 3, 4, 5$. Штриховая кривая — без учета эффектов радиальной релаксации (ЭРР) электронных оболочек, кружки — с учетом ЭРР, сплошная кривая — с учетом ЭРР и ЭКА. Энергия падающего фотона $\omega_1 = 868.5$ эВ. Значения ширины, параметра δ_{SO} и обозначения такие же, как на рис. 2

рассеяния в конечные mp -состояния рассеяния дискретного спектра. Этот эффект практически в два раза увеличивает вероятность рассеяния по сравнению со значением, рассчитанным без его учета. Результаты соответствующего расчета сечения (1) приведены на рис. 3.

Амплитуды (20) описывают эффект перехода сплошного спектра $\varepsilon_i p$ конечного состояния рассеяния в бесконечную ридберговскую серию промежуточных np_+ -состояний рассеяния. Как результат, часть сплошного спектра $\varepsilon_i p$ уходит в область «тени», не реализуясь как конечное состояние рассеяния. Это приводит к уменьшению вероятности рассеяния по сравнению с вероятностью, рассчитанной без учета этого эффекта. Результаты соответствующего

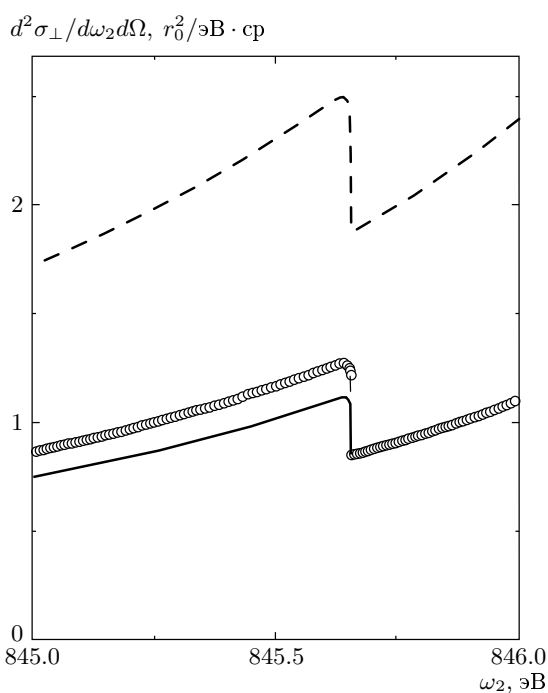


Рис. 4. Эффект корреляционных амплитуд: роль R_i^C - и I_i^C -амплитуд перехода (20) в области проявления лидирующего резонанса $1s_0 \rightarrow 3p_+$ промежуточного состояния рассеяния. Энергия падающего фотона $\omega_1 = 865.6$ эВ. Значения ширины, параметра δ_{SO} и обозначения такие же, как на рис. 2, 3

расчета сечения (1) приведены на рис. 4 и демонстрируют заметную роль указанного эффекта в определении абсолютных величин и формы сечения рассеяния.

Таким образом, совместный учет амплитуд (17) и (20) приводит к перераспределению из длинноволновой в коротковолновую область энергий падающего и рассеянного рентгеновских фотонов вероятности рассеяния относительно рассчитанной без учета эффекта корреляционных амплитуд.

3.2. Область энергии KL_{23} -порога ионизации

Естественно предположить, что учет эффектов кратного возбуждения/ионизации основного состояния атома Ne приведет к появлению ближней тонкой структуры теоретического дважды дифференциального сечения резонансного неупругого рассеяния, рассчитанного в п. 3.1.

В области энергии KL_{23} -порога ионизации ($I_{1s2p} = 914.637$ эВ, нерелятивистский расчет данной работы) мы ограничились рассмотрением эффектов двойного возбуждения/ионизации,

дающих основной вклад в интегральную интенсивность кратного возбуждения/ионизации основного состояния атома Ne.

Утверждение о лидирующей роли каналов двойного возбуждения/ионизации подтверждают, в частности, результаты расчета [26] и измерения [27, 28] в области энергии KL_{23} -порога ионизации, а также расчета и измерения [29] в области энергии KL_1 -порога ионизации спектра поглощения рентгеновского фотона атомом Ne.

На первом этапе при построении амплитуды A_{nm} в выражениях (3) и (4) рассмотрены процессы двойного возбуждения в качестве промежуточных и конечных состояний рассеяния.

Волновые функции и энергии промежуточных состояний рассеяния получены в схеме LS -связи в нерелятивистском многоконфигурационном приближении Хартри–Фока диагонализацией матрицы векового уравнения, построенной на базе волновых функций:

$$|n\rangle = \sum_{LS} \sum_{n_1, 2 > f} \sum_{l_1, 2} a_{12}^{LS} |\zeta n_1 l_1 n_2 l_2 (LS); {}^1P\rangle, \quad (23)$$

$$\zeta \equiv 1s2s^22p^5({}^{2S+1}P),$$

$$n_1 l_1 n_2 l_2 = 3pmp, 3sm(s, d), 3dmd, \quad m = 3, 4, 5,$$

где a_{12}^{LS} — коэффициенты конфигурационного смешивания, LS — терм пары возбужденных $n_1 l_1$ -, $n_2 l_2$ -электронов.

Волновые функции возбужденных $n_1 l_1$ -, $n_2 l_2$ -электронов получены решением уравнений Хартри–Фока, усредненных по ${}^{1,3}P$ -, LS -термам $\zeta n_1 l_1 n_2 l_2$ -конфигурации. Волновые функции $1s$ -, $2s$ -, $2p$ -электронов атомного остатка получены решением уравнений Хартри–Фока, усредненных по ${}^{1,3}P$ -термам ζ -конфигурации.

Волновые функции (23) состояний, дающих основной вклад в интенсивность двойного возбуждения, имеют вид (удержаны компоненты с $|a_{12}^{LS}| \geq 0.40$)

$$\begin{aligned} |1\rangle &= 0.97|\zeta 3p^2({}^3P)\rangle, \\ |2\rangle &= 0.47|\zeta 3p^2({}^1D)\rangle - 0.88|\zeta 3s3d({}^1D)\rangle, \\ |3\rangle &= |\zeta 3p4p[0.70({}^3P) + 0.70({}^3D)]\rangle, \\ |4\rangle &= |\zeta 3p4p[0.70({}^3P) - 0.60({}^3D)]\rangle, \\ |5\rangle &= |\zeta 3p^2[0.70({}^1D) + 0.60({}^1S)]\rangle + \\ &\quad + 0.43|\zeta 3s3d({}^1D)\rangle, \\ |6\rangle &= 0.90|\zeta 3p4p({}^1D)\rangle. \end{aligned} \quad (24)$$

Структуры волновых функций |2) и |5) показывают значительную роль электростатического взаи-

модействия $3p^2 - 3s3d$ в формировании промежуточных состояний неупругого рассеяния рентгеновского фотона атомом Ne.

Резонансные значения энергии падающего фотона (ω_{1n}) как энергии радиационных переходов из основного состояния в состояния (23) рассчитаны по формуле

$$\omega_{1n} = E_n - E(0), \quad (25)$$

где E_n — энергия состояния (23).

Отметим, что формула (25) не учитывает корреляционной энергии, равной $\sim 1-3$ эВ для каждого электрона [30]. Эта величина неучтенной корреляционной энергии дает оценку точности расчета абсолютных значений энергий радиационных переходов (25).

Волновые функции и энергии конечных состояний рассеяния получены в нерелятивистском одноконфигурационном приближении Хартри–Фока. В качестве конфигурации конечного состояния рассеяния как состояния радиационного перехода из промежуточных |1)-, |2)- и |5)-состояний взята конфигурация $2p^4 3p^2$. В качестве конфигурации конечного состояния рассеяния как состояния радиационного перехода из промежуточных |3)-, |4)- и |6)-состояний взята конфигурация $2p^4 3p4p$.

Принято приближение, что энергия эмиссионного фотона для всех радиационных переходов в конечные состояния рассеяния с участием состояний (24) фиксирована величиной

$$\omega_2 = \omega_{11} - E(2p^4 3p^2) + E(0), \quad (26)$$

где $\omega_{11} = 902.42$ эВ (см. табл. 1).

Выход за рамки приближения (26) обусловлен необходимостью учета прежде всего эффектов конфигурационного взаимодействия в конечных состояниях рассеяния и является предметом будущих исследований.

Эффект радиальной релаксации электронных оболочек в полях $1s$ - и $2p$ -вакансий при построении амплитуд вероятностей радиационных переходов из основного состояния в состояния (24) и из состояний (24) в конечные $2p^4(3p^2, 3p4p)$ -состояния рассеяния учтен методами теории неортогональных орбиталей [9, 26].

Так, в случае возбуждения $1s2p \rightarrow 3p^2$ выражение для радиальной (R) части амплитуды вероятности радиационного перехода в форме длины принимает вид (\hat{D} — многоэлектронный оператор радиационного перехода)

$$\langle 0 | \hat{D} | \zeta 3p^2 \rangle_R = M \langle 1s_0 | \hat{r} | \phi_1 \rangle \langle 2p_0 | \phi_2 \rangle, \quad (27)$$

$$M = \langle 1s_0 | 1s \rangle \langle 2s_0 | 2s \rangle^2 \langle 2p_0 | 2p \rangle^5,$$

$$|\phi_1\rangle = |3p\rangle - |2p\rangle \frac{\langle 2p_0 | 3p \rangle}{\langle 2p_0 | 2p \rangle},$$

$$|\phi_2\rangle = (1 - \eta^2)^{-1/2} (|3p\rangle - \eta |2p_+\rangle), \quad \eta = \langle 2p_+ | 3p \rangle.$$

При построении амплитуды (27) с использованием метода ортогонализации Грама–Шмидта [31] учтено общее квантовомеханическое требование [32] ортогональности волновой функции состояния возбуждения $1s2p \rightarrow 3p^2$ волновым функциям нижележащих по энергии состояний возбуждений $1s \rightarrow 3p$ и $2s2p \rightarrow 3p^2$. Волновые функции $1s_0$ -, $2s_0$ -, $2p_0$ -электронов, $1s$ -, $2s$ -, $2p$ -, $3p$ -электронов и $2p_+$ -электрона получены решением уравнений Хартри–Фока, соответственно, для $1s^2 2s^2 2p^6$ -, $\zeta 3p^2$ - и $1s3p$ -конфигураций.

Отметим, что компоненты состояний (24) $\zeta n_1 d n_2 d$ и $\zeta n_1 s n_2(s, d)$ проявляются в сечении рассеяния лишь через их электростатическое смешивание с компонентами $\zeta n_1 p n_2 p$, поскольку в дипольном приближении не дают вклада в матричный элемент оператора радиационного перехода. В самом деле, переходы в состояния $\zeta n_1 d n_2 d$ запрещены правилами отбора по орбитальному квантовому числу l , переходы в состояния $\zeta n_1 s n_2(s, d)$ практически запрещаются при реализации упомянутого выше требования ортогональности волновых функций этих состояний волновым функциям нижележащих по энергии состояний той же симметрии.

Результаты расчета сечения (1) с участием состояний двойного возбуждения в области энергии KL_{23} -порога ионизации атома Ne представлены в табл. 1 и на рис. 5.

На втором этапе при построении амплитуды A_{nm} в выражениях (3) и (4) рассмотрены процессы возбуждения/ионизации ($n = 3, 4$):

$$\omega_1 + [0] \rightarrow \zeta n p \varepsilon p \rightarrow 2p^4 n p \varepsilon p + \omega_2,$$

и двойной ионизации:

$$\omega_1 + [0] \rightarrow \zeta \varepsilon p \varepsilon' p \rightarrow 2p^4 \varepsilon p \varepsilon' p + \omega_2,$$

в качестве промежуточных и конечных состояний рассеяния.

Одноэлектронные волновые функции промежуточных и конечных состояний рассеяния получены решением уравнений Хартри–Фока, усредненных, соответственно, по термам $\zeta n p$ - и $2p^4 n p$ -конфигураций ($n = 3, 4, \varepsilon$).

Полные волновые функции и энергии промежуточных и конечных состояний рассеяния получены

Таблица 1. Абсолютные значения дважды дифференциального сечения процесса резонансного неупругого рассеяния $\omega_1 + [0] \rightarrow |n\rangle \rightarrow |2p^4 n_1 p n_2 p\rangle + \omega_2$ линейно поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния) рентгеновского фотона в области энергии KL_{23} -порога ионизации атома Ne (см. рис. 5)

n	n_1, n_2	$\omega_1, \text{эВ}$	$\frac{d^2\sigma_{\perp}}{d\omega_2 d\Omega}, \frac{r_0^2}{\text{эВ} \cdot \text{ср}}$
1	3, 3	902.42	156.57
2	3, 3	903.62	20.37
3	3, 4	904.92	29.16
4	3, 4	905.52	34.27
5	3, 3	906.02	45.59
6	3, 4	908.02	29.28

Примечание. ω_1 — энергия (в эВ) падающего фотона, $|n\rangle$ — промежуточные (см. формулы (24)) и $|2p^4 n_1 p n_2 p\rangle$ — конечные состояния рассеяния. Для всех n, n_1, n_2 энергия эмиссионного фотона $\omega_2 = 854.80$ эВ (см. формулу (26)).

в схеме LS -связи в нерелятивистском одноконфигурационном приближении Хартри–Фока с учетом эффекта мультиплетного расщепления диагонализацией матриц вековых уравнений, построенных на базисе волновых функций, соответственно, $|\zeta n p\rangle$ и $|2p^4 n p\rangle$.

При расчете энергетической структуры $\zeta \varepsilon p \varepsilon' p$ - и $2p^4 \varepsilon p \varepsilon' p$ -состояний рассеяния с εp -, $\varepsilon' p$ -электронами сплошного спектра мы пренебрегли электростатическими взаимодействиями $1s - \varepsilon p$ и $2p - \varepsilon p$: в матрицах вековых уравнений для слейтеровских интегралов положено $F_2(2p\varepsilon p) = 0, G_{0,2}(2p\varepsilon p) = 0, G_1(1s\varepsilon p) = 0$.

После диагонализации матриц вековых уравнений получено следующее.

1. Из компонентов $\zeta n p$ -мультиплета промежуточных состояний рассеяния практически смешиваются лишь термы $(1,^3P)^2 S$ конфигурации $\zeta 3p$:

$$\begin{aligned} \Psi(1P) &= 0.96|1P,^2S\rangle - 0.28|^3P,^2S\rangle, \\ \Psi(3P) &= 0.28|1P,^2S\rangle + 0.96|^3P,^2S\rangle, \end{aligned} \quad (28)$$

где обозначено $|1,^3P,^2S\rangle = |1s2p^5(1,^3P)3p(^2S)\rangle$.

2. Из компонентов $2p^4 n p$ -мультиплета конечных состояний рассеяния практически смешиваются

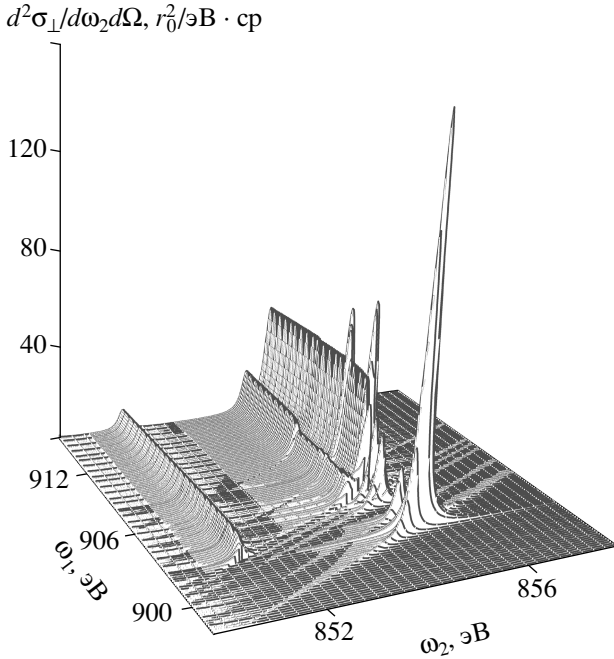


Рис. 5. Дважды дифференциальное сечение резонансного неупругого рассеяния линейно поляризованного рентгеновского фотона атомом Ne в области энергии KL_{23} -порога ионизации, $I_{1s2p} = 914.637$ эВ. Значения ширин, параметра δ_{SO} и обозначения такие же, как на рис. 2. Спектральные характеристики резонансов рассеяния даны в табл. 1, сечения — в табл. 2

лишь термы $(^1S, ^1D, ^3P)^2P$ конфигурации $2p^43p$:

$$\begin{aligned} \phi(^1S) &= 0.998|^1S, ^2P\rangle + 0.057|^3P, ^2P\rangle, \\ \phi(^1D) &= 0.935|^1D, ^2P\rangle + 0.353|^3P, ^2P\rangle, \\ \phi(^3P) &= 0.934|^3P, ^2P\rangle - 0.353|^1D, ^2P\rangle - \\ &\quad - 0.052|^1S, ^2P\rangle, \end{aligned} \quad (29)$$

где обозначено $|LS, ^2P\rangle = |2p^4(LS)3p(^2P)\rangle$.

Энергии падающих фотонов как энергии порогов возникновения пространственно протяженных структур сечения (1), обусловленных переходами в промежуточные состояния возбуждения/ионизации и двойной ионизации, рассчитаны по формулам

$$\omega_1 = E(^{1,3}P) - E(0), \quad n = 3, \quad (30)$$

$$\omega_1 = E(LS, L'S') - E(0), \quad n = 4, \epsilon. \quad (31)$$

Здесь $E(^{1,3}P)$ — энергии состояний (28), $E(LS, L'S')$ — энергии термов $\zeta(LS)np(L'S')$ -мультиплета. Соответствующие энергии эмиссионных фотонов рассчитаны по формуле

$$\omega_2 = E(k_{1n}) - E(k_{2n}) + E_T(k_{1n}) - E_T(k_{2n}), \quad (32)$$

где $E(k_{1n})$ и $E(k_{2n})$ — полные хартри-фоковские энергии состояний $k_{1n} = \zeta np$ и $k_{2n} = 2p^4 np$, E_T — энергии термов (для $n = 3$ энергии состояний (28) и (29)) соответствующих мультиплетов относительно своих центров тяжести.

Результаты расчета сечения (1) с участием состояний возбуждения/ионизации и двойной ионизации в области энергии KL_{23} -порога ионизации атома Ne представлены в табл. 2 и на рис. 5.

3.3. Сравнение теории с экспериментом

С увеличением энергии падающего фотона пространственно-протяженные структуры сечения (1), представленные на рис. 2, 5, эволюционируют соответственно в рентгеновские основной $K\alpha_{1,2}$ и спутный $K\alpha_{3,4}$ эмиссионные спектры атома Ne.

Существование эксперимента по измерению рентгеновского эмиссионного спектра $K\alpha$ атома Ne [25], выполненного при фиксированной энергии падающего фотона $\omega_1 = 5410.17$ эВ, позволяет провести тестирование развиваемых в данной работе теории и методов расчета.

Сравнение результатов расчета данной работы с экспериментом дано на рис. 6.

Экспериментальный эмиссионный спектр $K\alpha$ атома Ne получен в относительных единицах. Поэтому мы привязали его форму к теоретическому значению сечения (1) в области α_3 -структуры спектра эмиссии (см. $N = 4$ в табл. 2). При этом теоретический спектр рассчитан с ширинами $\Gamma_{1s} = 0.50$ эВ в области $\alpha_{1,2}$ -структуры и $\Gamma_{1s} = 0.60$ эВ в области $\alpha_{3,4}$ -структуры спектра эмиссии. Указанные значения полных ширин распада $1s$ -вакансии взяты из работы [27] (синхротронный эксперимент по измерению спектра поглощения фотона атомом Ne в области энергий K - и KL_{23} -порогов ионизации).

Вклад контактной части сечения при $\omega_1 = 5410.17$ эВ составил пренебрежимо малую величину порядка $10^{-6} r_0^2 / \epsilon B \cdot \text{sr}$ и нами не учитывался.

Видим хорошее согласие теоретического расчета данной работы с результатами эксперимента. Причина остающихся расхождений около 16% в области $K\alpha_{1,2}$ -резонанса эмиссионного спектра нами не установлена и является предметом будущих исследований.

Из особенностей эволюции пространственно-протяженных структур сечения (1), см. рис. 5, к структуре спектра эмиссии, см. рис. 6, отметим уменьшение роли эффекта радиальной релаксации электронных оболочек в полях $1s$ - и $2p$ -вакансий при увеличении энергии падающего фотона.

Таблица 2. Волновые функции промежуточных $1s2p^5(L_1S_1)np(L_2S_2)\varepsilon'p$ и конечных $2p^4(L_3S_3)np(L_4S_4)\varepsilon'p$ состояний резонансного неупругого рассеяния линейно поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния) рентгеновского фотона в области энергии KL_{23} -порога ионизации атома Ne и энергии возникновения соответствующих пространственно-протяженных структур (см. рис. 5) дважды дифференциального сечения рассеяния (1)

n	L_1S_1	L_2S_2	L_3S_3	L_4S_4	$\omega_1, \text{эВ}$	$\omega_2, \text{эВ}$	N	$\frac{d^2\sigma_{\perp}}{d\omega_2 d\Omega}, \frac{r_0^2}{\text{эВ} \cdot \text{ср}}$
3	$\Psi(^1P)$		$\phi(^1S)$		902.40	851.32	1	0.0074
	$\Psi(^3P)$		$\phi(^3P)$		905.20	854.12	4	0.0221
	$\Psi(^1P)$		$\phi(^1D)$		905.70	854.61	5	0.0280
4	3P	2S	3P	2P	910.20	854.08	2	0.0074
	1P	2S	1D	2P	911.15	855.03	6	0.0040
ε	3P	2S	3P	2P	914.60	854.11	3	0.0120
	1P	2S	1D	2P	915.68	855.19	7	0.0068

Примечание. ω_1 — энергия падающего фотона, см. формулы (30), (31); ω_2 — энергия эмиссионного фотона, см. формулу (32); $\Psi(LS)$ — см. формулы (28), $\phi(LS)$ — см. формулы (29). N — номер резонанса и $d^2\sigma_{\perp}/d\omega_2 d\Omega$ — абсолютные значения теоретического сечения (1) при $\omega_1 = 5410.17$ эВ в максимумах резонансов N на рис. 6 для рентгеновского $K\alpha_{3,4}$ -эмиссионного спектра атома Ne.

В самом деле, при увеличении ω_1 в амплитуде вероятности радиационного перехода в промежуточное состояние рассеяния ($n = 3, 4$; α_{LS}, β_{LS} — угловые коэффициенты),

$$M_n(LS) \equiv \langle 0|\hat{D}|\zeta(LS)np\varepsilon'p\rangle = \alpha_{LS}a_n + \beta_{LS}b_n,$$

$$a_n = \langle 1s_0|\hat{r}|np_c\rangle\langle 2p_0|\varepsilon'p_+\rangle,$$

$$b_n = \langle 1s_0|\hat{r}|\varepsilon'p_c\rangle\langle 2p_0|n'p_+\rangle,$$

составляющая a_n становится пренебрежимо малой по сравнению с составляющей b_n и значительно уменьшается вклад дополнительного слагаемого в структуре радиального интеграла $\langle 1s_0|\hat{r}|\varepsilon'p_c\rangle$. В результате отношение $M_n(^3P)/M_n(^1P)$ увеличивается и вероятность рассеяния из $K\alpha_4$ -области перераспределяется в $K\alpha_3$ -область спектра эмиссии.

3.4. Расчет контактной части сечения

На рис. 7 представлены результаты расчета контактной части сечения (14) в области энергии K -порога ионизации атома Ne с функцией Φ_{nl} , полученной в данной работе (см. выражение (15)), и в дипольном приближении (см. выражение (16)), формально распространенном на область значений $0 < qr < 1$.

Волновые функции электронов $\varepsilon_n(l, l \pm 1)$ сплошного спектра конечных состояний рассеяния получены решением уравнений Хартри–Фока для конфигурации с nl -вакансией. Волновые функции nl -

электронов начального состояния рассеяния получены решением уравнения Хартри–Фока для конфигурации основного состояния.

При расчете спектральной функции Ψ_{nl} в структуре сечения (14) использованы значения полных ширин распада $\Gamma_{1s} = 0.23$ эВ, $\Gamma_{2s} = 0.05$ эВ (измерено по экспериментальному спектру поглощения фотона $2s$ -оболочкой атома Ne [33]), $\Gamma_{2p} = 3.95 \cdot 10^{-8}$ эВ и энергии порогов ионизации (нерелятивистский расчет данной работы) $I_{1s} = 868.399$ эВ, $I_{2s} = 49.314$ эВ, $I_{2p} = 19.845$ эВ.

Скачки спектра рассеяния на рис. 7 при энергиях эмиссионного фотона 830.866 эВ и 860.155 эВ воспроизводят условия равенства нулю энергии электрона сплошного спектра, соответственно, $\omega_2 = \omega_1 - I_{2s}$ для перехода $2s_0 \rightarrow \varepsilon(s, p)$ и $\omega_2 = \omega_1 - I_{2p}$ для перехода $2p_0 \rightarrow \varepsilon(s, p, d)$.

Как следует из результатов, представленных на рис. 7, с практической точки зрения вклад контактной части сечения в полное сечение процесса в области резонансного рассеяния составляет пренебрежимо малую величину ($\sim 0.07 r_0^2/\text{эВ} \cdot \text{ср}$) по сравнению с вкладом аномально-дисперсионной части ($\sim 250 r_0^2/\text{эВ} \cdot \text{ср}$) в области образования $K\alpha_{1,2}$ -структуры спектра рассеяния.

Однако с теоретической точки зрения уже в рентгеновском диапазоне энергий падающего и рассеянного фотонов для ненулевых углов рассеяния дипольное приближение существенно изменяет не

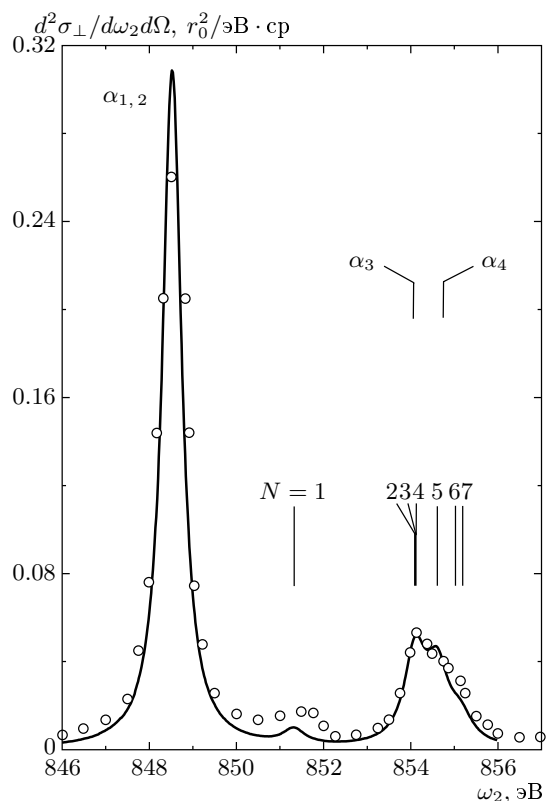


Рис. 6. Рентгеновский эмиссионный $K\alpha$ -спектр атома Ne. Кружки — эксперимент [25] (выполнен в отн. ед.; энергия возбуждающего спектр рентгеновского фотона $\omega_1 = 5410.17$ эВ — монохроматическое $K\alpha$ -излучение атома хрома). Сплошная кривая — теория данной работы: $\Gamma_{1s} = 0.50$ эВ ($K\alpha_{1,2}$), 0.60 эВ ($K\alpha_{3,4}$). Идентификация резонансов теоретической $K\alpha_{3,4}$ -структуры спектра, обозначенных цифрами, дана в табл. 2. Значения ширины Γ_{beam} , Γ_{2p} , параметра δ_{SO} и обозначения такие же, как на рис. 2

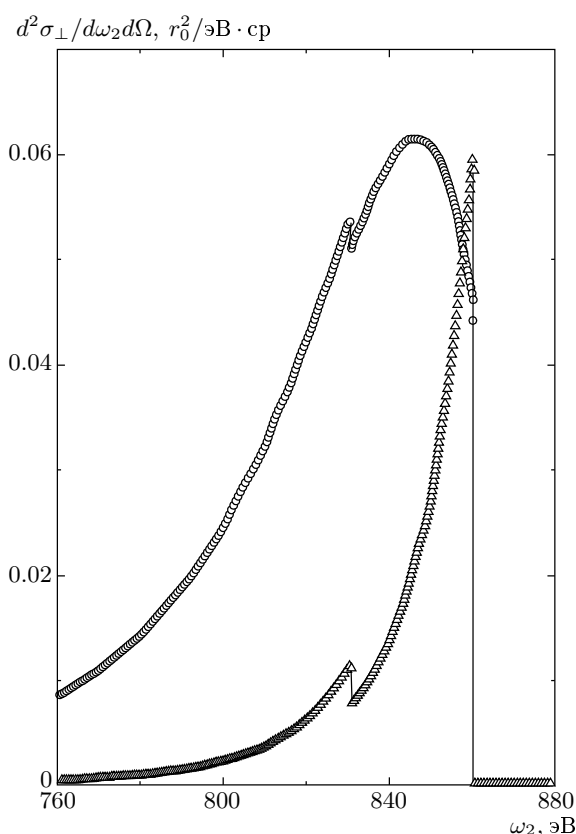


Рис. 7. Контактная часть дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния линейно поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния) рентгеновского фотона атомом Ne в области энергии K -порога ионизации. Кружки — расчет по формуле (14) с функцией Φ_{nl} из выражения (15), треугольники — расчет в дипольном приближении по формуле (14) с функцией Φ_{nl} из выражения (16). Угол рассеяния $\theta = 90^\circ$. Энергия падающего фотона $\omega_1 = 880$ эВ

только абсолютные значения, но и геометрию поверхности контактной части сечения по сравнению с рассчитанными вне его рамок.

Более того, в случае игнорирования эффекта радиальной релаксации электронных оболочек в поле nl -вакансии атомного остатка в дипольном приближении функция $\Phi_{nl} = 0$, тогда как вне его рамок (при $qr > 0$) $\Phi_{nl} \neq 0$.

Учет эффектов конфигурационного взаимодействия и кратного возбуждения/ионизации в начальном и конечном состояниях неупругого контактного рассеяния, а также дополнительных слагаемых в функциях $W_t(n_1l_1, n_2l_2)$ из формулы (12) при учете эффекта радиальной релаксации электрон-

ных оболочек в поле остовных вакансий (например, учет в выражении (15) замены $\langle 1s_0 | j_1(qr) | \varepsilon p_+ \rangle$ на $\langle 1s_0 | j_1(qr) | \varepsilon p_c \rangle$) является предметом будущих исследований.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулируем основные результаты данной работы.

Учет эффекта радиальной релаксации электронных оболочек промежуточных и конечных состояний рассеяния в хартри-фоковских полях глубокой $1s$ - и валентной $2p$ -вакансий практически в два раза уменьшает абсолютные значения (не меняя при

этом топологии поверхности) дважды дифференциального сечения резонансного неупругого рассеяния рентгеновского фотона в области энергии K -порога ионизации атома Ne по сравнению с рассчитанным без учета этого эффекта.

Наряду с эффектами конфигурационного взаимодействия и мультиплетного расщепления в промежуточных и конечных состояниях рассеяния эффект радиальной релаксации существенно определяет абсолютные величины, структуру и форму резонансной и пространственно-протяженной ближней тонкой структуры дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния в области энергии KL_{23} -порога ионизации атома Ne.

При увеличении энергии падающего фотона роль эффекта радиальной релаксации в определении абсолютных величин и формы дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния уменьшается, что определяет особенности эволюции пространственно-протяженных структур сечения в рентгеновский эмиссионный $K\alpha$ -спектр атома Ne.

Эффект радиальной релаксации порождает новый тип многочастичного эффекта — эффект корреляционных амплитуд при резонансном неупругом рассеянии рентгеновского фотона свободным атомом. Этот эффект, в свою очередь, существенно определяет абсолютные величины и форму дважды дифференциального сечения рассеяния в области энергий K -порога ионизации атома Ne.

Методами теории неприводимых тензорных операторов установлена аналитическая структура контактной части дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния фотона свободным атомом. Показано, что переход от установленной структуры, в частности, к дипольному приближению при теоретическом описании контактной части сечения уже в рентгеновском диапазоне энергий падающего и рассеянного фотонов сильно изменяет не только абсолютные значения, но и геометрию поверхности сечения рассеяния.

ЛИТЕРАТУРА

1. C.-C. Kao, K. Hamalainen, M. Krisch et al., *Rev. Sci. Instr.* **66**, 1699 (1995).
2. P. P. Kane, L. Kissel, R. H. Pratt, and S. C. Roy, *Phys. Rep.* **140**, 75 (1986).
3. А. Н. Хоперский, В. А. Явна, *Рассеяние фотона многоэлектронной системой*, Энергоатомиздат, Москва (2004).
4. G. S. Landsberg and L. I. Mandelstam, *Z. Phys.* **50**, 769 (1928).
5. C. V. Raman, *Indian J. Phys.* **2**, 387 (1928).
6. A. H. Compton, *Phys. Rev.* **21**, 483 (1923).
7. M. A. MacDonald, S. H. Southworth, J. C. Levin et al., *Phys. Rev. A* **51**, 3598 (1995).
8. T. Åberg and J. Tulkki, in *Atomic Inner-Shell Physics*, ed. by B. Crasemann, Plenum Press, New York-London (1985), Ch. 10.
9. V. Schmidt, *Rep. Progr. Phys.* **55**, 1483 (1992).
10. P. P. Kane, *Phys. Rep.* **218**, 67 (1992).
11. H. Daido, *Rep. Progr. Phys.* **65**, 1513 (2002).
12. K. Moribayashi, T. Kagawa, and D. E. Kim, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **205**, 334 (2003).
13. Н. Марч, У. Янг, С. Сампантхар, *Проблема многих тел в квантовой механике*, Мир, Москва (1969).
14. A. N. Hopersky and V. V. Chuvencov, *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **36**, 2987 (2003).
15. A. Costescu, P. M. Bergstrom, Jr., C. Dinu, and R. H. Pratt, *Phys. Rev. A* **50**, 1390 (1994).
16. М. Я. Амуся и Н. А. Черепков, *Case Stud. Atom. Phys.* **5**, 47 (1975).
17. Р. Каразия, *Введение в теорию рентгеновских и электронных спектров свободных атомов*, Мокслас, Вильнюс (1987).
18. J. H. Hubbell, *Radiat. Phys. Chem.* **50**, 113 (1997).
19. P. Eisenberger and P. M. Platzmann, *Phys. Rev. A* **2**, 415 (1970).
20. D. A. Owen, *Phys. Rev. A* **16**, 1594 (1977).
21. J. L. Campbell and T. Papp, *Atom. Data Nucl. Data Tables* **77**, 1 (2001).
22. A. Hibbert, M. Le Dourneuf, and M. Mohan, *Atom. Data Nucl. Data Tables* **53**, 23 (1993).
23. K.-N. Huang, M. Aoyagi, M. H. Chen et al., *Atom. Data Nucl. Data Tables* **18**, 243 (1976).
24. A. N. Hopersky, V. A. Yavna, A. M. Nadolinsky, and D. V. Dzuba, *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **37**, 2511 (2004).
25. O. Keski-Rahkonen, *Phys. Scripta* **4**, 173 (1973).
26. V. L. Sukhorukov, A. N. Hopersky, I. D. Petrov et al., *J. Physique (Paris)* **48**, 45 (1987).

27. J. M. Esteva, B. Gauthe, P. Dhez, and R. C. Karnatak, J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. **16**, L263 (1983).
28. L. Avaldi, R. Camilloni, G. Stefani et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **29**, L737 (1996).
29. M. Oura, H. Yamaoka, Y. Senba et al., Phys. Rev. A **70**, 062502 (2004).
30. R. K. Nesbet, Phys. Rev. **155**, 56 (1967).
31. М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики*, т. 1, Мир, Москва (1977).
32. А. Мессиа, *Квантовая механика*, т. 1, Наука, Москва (1978).
33. O. Wilhelmi, G. Mentzel, B. Zimmermann et al., J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom. **101–103**, 155 (1999).