ЖЭТФ, 2007, том 131, вып. 2, стр. 205–213

ЭФФЕКТЫ РАДИАЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ И МЕЖОБОЛОЧЕЧНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ НЕУПРУГОМ РАССЕЯНИИ ФОТОНА АТОМОМ

А. Н. Хоперский[*]*, А. М. Надолинский, В. А. Явна, А. С. Каспржицкий*

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

Поступила в редакцию 22 мая 2006 г.

В нерелятивистском приближении для одноэлектронных волновых функций и дипольном приближении для аномально-дисперсионной амплитуды вероятности рассеяния рассчитаны абсолютные величины и форма дважды дифференциального сечения резонансного неупругого рассеяния линейно-поляризованного фотона в области энергии порога ионизации субвалентной s-оболочки свободных атомов неона и аргона. Учтены эффекты радиальной релаксации, межоболочечных корреляций, тормозного излучения, спин-орбитального расщепления и конечной ширины распада s-вакансии. Получено, что эффекты радиальной релаксации и межоболочечных корреляций существенно определяют интенсивность околопорогового рассеяния, в несколько раз уменьшая вклад лидирующей комптоновской аномально-дисперсионной компоненты полного сечения рассеяния, рассчитанный в одноэлектронном приближении. Результаты расчета носят предсказательный характер.

PACS: 32.80.-t

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе авторов [1] предложены нерелятивистская квантовая теория и методы расчета абсолютных величин и формы дважды дифференциального сечения процесса резонансного неупругого рассеяния рентгеновского фотона мягкого и жесткого диапазонов (энергии падающего $\hbar\omega_1$ и рассеянного $\hbar\omega_2$ фотонов от 300 эВ до 1.5 МэВ, ω — круговая частота фотона) свободным атомом в области энергий порогов ионизации его глубоких оболочек с учетом широкой иерархии многочастичных эффектов.

В данной статье мы распространяем теорию и методы расчета этой работы на область рентгеновского вакуумного ультрафиолетового диапазона (энергии фотонов от 10 до 80 эВ) — область энергий порогов ионизации валентных и субвалентных оболочек свободных атомов.

В качестве объектов исследования взяты простые многоэлектронные системы с $^1S_0$-термом основного состояния — атомы неона (Ne, заряд ядра $Z = 10$, электронная конфигурация основного состояния $[0] = 1s^22s^22p^6$) и аргона (Ar, $Z = 18$, $[0] = 1s^22s^22p^63s^23p^6$).

На примере этих элементов мы проводим первое теоретическое исследование роли многочастичных эффектов радиальной релаксации, межоболочечных корреляций и тормозного излучения в определении абсолютных величин и формы дважды дифференциального сечения резонансного неупругого рассеяния линейно-поляризованного фотона в случае областей энергий L_1(Ne)- и M_1(Ar)-порогов ионизации субвалентной оболочки атома.

Такие исследования востребованы, в частности, в контексте проблем создания рентгеновского лазера на высокотемпературной лабораторной плазме как активной среде [2, 3] с использованием, например, эмиссионного $2p \to 2s$-перехода в атоме Ne [4] и неоноподобных ионах и диагностики эмиссионных линий астрофизических спектров. Так, можно предположить, что эффекты межоболочечных корреляций будут играть важную роль при анализе остающихся значительных расхождений результатов теории и экспериментов с лабораторной плазмой в величинах интенсивностей важных для задач астрофизики

[*]E-mail: hopersky_vm_1@rgups.ru

эмиссионных $3s \to 2p$- и $3d \to 2p$-переходов с участием валентной оболочки многозарядных неоноподобных ионов аргона (Ar^{8+}) [5] и железа (Fe^{16+}) [6].

2. ТЕОРИЯ МЕТОДА

Рассмотрим случай схемы предполагаемого эксперимента $\mathbf{e}_{1,2} \perp P$, где определены векторы поляризации падающего ($\mathbf{e}_1$) и рассеянного ($\mathbf{e}_2$) фотонов и плоскость P рассеяния, проходящая через их волновые векторы.

Учтем основные в области энергий порогов ионизации (аномально-дисперсионная область рассеяния) субвалентных ns-оболочек атомов Ne ($n = 2$) и Ar ($n = 3$) каналы резонансного неупругого рассеяния (здесь и далее при записи конфигурации заполненные электронные оболочки не указаны):

$$\begin{gathered}\hbar\omega_1 + [0] \to \left\{ \begin{array}{c} M(\varepsilon) \\ T(\varepsilon) \end{array} \right\} \to K(\varepsilon) + \hbar\omega_2, \\ M(\varepsilon) = ns\varepsilon p(^1P_1), \quad T(\varepsilon) = np^5\varepsilon d(^1P_1), \\ K(\varepsilon) = np^5\varepsilon p(^1S_0, ^1D_2). \end{gathered} \tag{1}$$

Радиационный переход

$$M \to K + \hbar\omega_2$$

интерпретируется как эмиссионный переход

$$np \to ns.$$

Радиационный переход

$$T \to K + \hbar\omega_2$$

может быть интерпретирован как эффект тормозного излучения при переходе электрона из виртуального состояния сплошного спектра d-симметрии в наблюдаемое состояние сплошного спектра p-симметрии.

Для учета эффекта межоболочечных корреляций (эффект электростатического взаимодействия конфигураций одночастичных возбуждений/ионизации двух и более прежде всего субвалентных и валентных оболочек атома [7]) волновая функция промежуточного M-состояния рассеяния получена во втором порядке квантовомеханической теории возмущений:

$$|\Psi(\varepsilon)\rangle = |M(\varepsilon)\rangle + \int\limits_0^\infty \beta(\varepsilon, x)|T(x)\rangle dx, \tag{2}$$

$$\beta(\varepsilon, x) = V(\varepsilon, x)\left[\mathcal{P}(E_x^{-1}) - i\pi\delta(E_x)\right],$$

$$V(\varepsilon, x) = \langle M(\varepsilon)|\hat{H}|T(x)\rangle, \quad E_x = \hbar\omega_1 - I_{np} - x,$$

где T-состояние выступает не в роли непосредственно (порождающего эффект тормозного излучения, см. далее) промежуточного состояния, а как состояние, виртуально возникающее и электростатически взаимодействующее с M-состоянием. Здесь $\mathcal{P}$ — символ главного значения интеграла в смысле Коши, $\hat{H}$ — оператор электростатического взаимодействия, I_{np} — энергия порога ионизации валентной np-оболочки атома и δ — дельта-функция Дирака.

Волновые функции непосредственно промежуточного T-состояния и конечного K-состояния рассеяния получены в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока.

В уравнении (1) мы ограничились рассмотрением состояний сплошного спектра (резонансное комптоновское рассеяние), полагая учет состояний дискретного спектра собственно резонансной допороговой области рассеяния (рассеяние Ландсберга–Мандельштама–Рамана) предметом будущих исследований.

Тогда полученное в работе [1] аналитическое выражение для аномально-дисперсионной части дважды дифференциального сечения процесса резонансного неупругого рассеяния линейно-поляризованного фотона атомом в атомной системе единиц ($e = m_e = \hbar = 1$, e — заряд электрона и m_e — его масса) с учетом (2) и суммирования по $^1S_0$-, $^1D_2$-термам конечного состояния рассеяния принимает вид

$$\frac{d^2\sigma_\perp}{d\omega_2 d\Omega} = r_0^2\omega_1\omega_2\eta^2 \sum_{i=1,2} \zeta_i W_i \Psi_i, \tag{3}$$

$$W_i = \frac{\Delta_i}{(\omega_2 - \Delta_i)^2 + \Gamma_{ns}^2/4}\left(A^2 + B^2 + \frac{\Gamma_{ns}}{\Delta_i}AC\right) + \left(\frac{C}{\omega_2}\right)^2,$$

$$\Psi_i = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\operatorname{arctg}\left(\frac{\omega_1 - \omega_2 - I_{ns} + \Delta_i}{\gamma_b}\right).$$

Здесь r_0 — классический радиус электрона, Ω — пространственный угол вылета рассеянного фотона, $\zeta_i = \{2, i = 1; 1, i = 2\}$, $\Delta_i = \{\Delta, i = 1; \Delta - \delta_{SO}, i = 2\}$, $\Delta = I_{ns} - I_{np}$, I_{ns} — энергия порога ионизации субвалентной ns-оболочки, δ_{SO} — константа спин-орбитального расщепления валентной np_j-оболочки ($j = 1/2, 3/2$), Γ_{ns} — полная ширина распада ns-вакансии, $\gamma_b = \Gamma_{beam}/2$, Γ_{beam} — параметр ширины аппаратной (экспериментально фиксируемой функции распределения по частоте падающего на атом излучения) функции Коши – Лоренца.

Аналитическая структура сечения (3) обусловлена второй суммой в нерелятивистском операторе взаимодействия (в кулоновской калибровке для поля) электромагнитного поля с атомом:

$$\hat{F} = \frac{1}{c}\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{1}{2c}(\mathbf{A}_i)^2 - (\mathbf{p}_i\cdot\mathbf{A}_i)\right], \quad \mathbf{A}_i \equiv \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, 0),$$

где c — скорость света, N — число электронов в атоме, $\mathbf{A}$ — оператор (в представлении вторичного квантования) электромагнитного поля в момент времени $t=0$, $\mathbf{p}_i$ — оператор импульса и $\mathbf{r}_i$ — радиус-вектор i-го электрона.

Первая сумма в операторе $\hat{F}$ определяет аналитическую структуру амплитуды вероятности так называемого контактного (томпсоновского) рассеяния фотона атомом. Она не является предметом изучения данной работы, а вклад контактного рассеяния в полное сечение рассеяния фотона атомами Ne и Ar будет упомянут лишь при анализе полученных результатов.

Составляющие аномально-дисперсионной амплитуды вероятности рассеяния через эмиссионный переход получены в форме длины для оператора радиационных $p \to s$- и $d \to p$-переходов:

$$\eta = N_{sp}\langle np_+|\hat{r}|ns\rangle, \tag{4}$$

$$A = Q + \frac{1}{3}N_{np}\mathcal{P}\int_0^\infty J(\overline{\omega}, x)E_x^{-1}dx, \tag{5}$$

$$Q = N_{ns}\left(\langle ns_0|\hat{r}|\overline{\omega}p_+\rangle - \frac{\langle ns_0|\hat{r}|np_+\rangle\langle np_0|\overline{\omega}p_+\rangle}{\langle np_0|np_+\rangle}\right), \tag{6}$$

$$J(\overline{\omega}, x) = \langle np_0|\hat{r}|xd\rangle V(\overline{\omega}, x),$$

$$B = \frac{\pi}{3}N_{np}J(\overline{\omega}, \tilde{\omega}), \tag{7}$$

$$\langle nl|ml\rangle = \int_0^\infty P_{nl}(r)P_{ml}(r)\,dr,$$

$$\langle nl|\hat{r}|m(l+1)\rangle = \int_0^\infty P_{nl}(r)P_{m(l+1)}(r)r\,dr,$$

$$\overline{\omega} = \omega_1 - \omega_2 - I_{np} \ge 0, \quad \tilde{\omega} = \omega_1 - I_{np} \ge 0,$$

где $P_{nl}(r)$ — радиальная часть волновой функции nl-электрона.

Аналитическая структура амплитуды (6) получена методами теории неортогональных орбиталей [8, 9] и отражает учет эффекта радиальной релаксации одноэлектронных орбиталей промежуточного и конечного состояний рассеяния в хартри-фоковских полях возникающих ns- и np-вакансий. Именно, одноэлектронные волновые функции (s_0, p_0), p_+ и (d, s) получены путем решения нелинейных интегро-дифференциальных уравнений самосогласованного поля Хартри – Фока для, соответственно, конфигураций [0], ns и np^5. При этом N_{ns}-, N_{np}-, N_{sp}-произведения интегралов перекрывания радиальных частей волновых функций не участвующих в переходе электронов конфигурации основного состояния и конфигураций ns, np^5, $nsnp^5$, соответственно.

В приближении, когда мы игнорируем (замена nl_+, nl на nl_0) эффект радиальной релаксации, интеграл перекрывания $\langle nl|ml\rangle \to \delta_{nm}$ (δ_{nm} — символ Кронекера – Вейерштрасса) и парциальные амплитуды вероятности перехода принимают вид

$$\eta \to \langle np_0|\hat{r}|ns_0\rangle, \quad Q \to \langle ns_0|\hat{r}|\overline{\omega}p_0\rangle,$$

$$\langle np_0|\hat{r}|xd\rangle \to \langle np_0|\hat{r}|xd_0\rangle,$$

что существенно упрощает аналитическую структуру и численный расчет сечения (3).

Составляющая аномально-дисперсионной амплитуды вероятности рассеяния через тормозное излучение получена в форме ускорения для оператора радиационного перехода $d \to p$ между одноэлектронными состояниями сплошного спектра:

$$\eta C = 2ZN_{np}\langle np_0|\hat{r}|\tilde{\omega}d\rangle\langle\overline{\omega}d|\hat{q}|\tilde{\omega}p\rangle, \quad q = r^{-2}. \tag{8}$$

Здесь, в частности, в приближении плоских волн для одноэлектронных волновых функций сплошного спектра амплитуда $\langle\overline{\omega}d|\hat{q}|\tilde{\omega}p\rangle$ оказывается сходящимся несобственным интегралом, в силу того что подынтегральная функция

$$\varphi(r) = q\sin\left(r\sqrt{\overline{\omega}}\right)\sin\left(r\sqrt{\tilde{\omega}}\right)$$

регулярна на интервале $r \in [0;\infty)$ и удовлетворяет граничным условиям

$$\varphi(0) = \sqrt{\overline{\omega}\tilde{\omega}} \ne \pm\infty, \quad |\varphi(r)| \propto r^{-n},$$

$$n = 2 > 1, \quad r \to \infty.$$

Тем самым при построении сечения (3) была снята необходимость [10] тех или иных аналитических аппроксимаций для одноэлектронных волновых функций сплошного спектра при расчете сингулярной

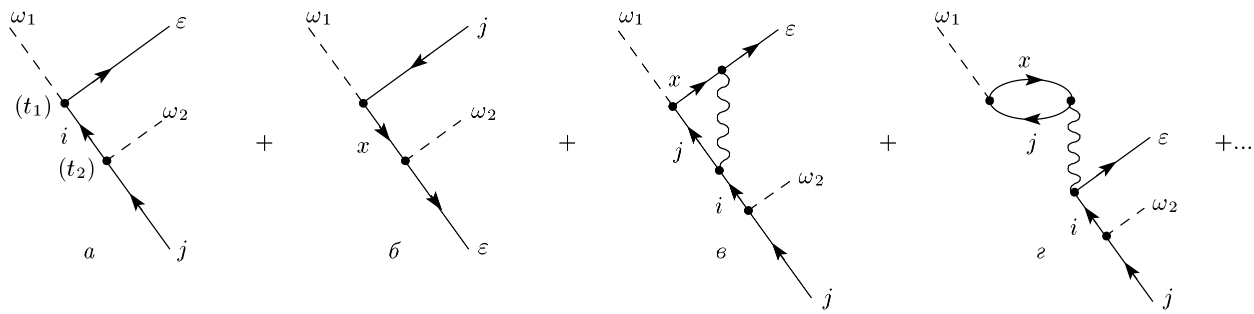

Рис. 1. Представление диаграмм Голдстоуна – Хаббарда – Фейнмана для аномально-дисперсионной амплитуды вероятности процесса резонансного неупругого рассеяния фотона в области энергии порога ионизации субвалентной s-оболочки атомов Ne и Ar. Обозначения даны в тексте. Точки соответствуют бесконечному ряду диаграмм

(при $x = y$) амплитуды вероятности радиационного перехода в форме длины: в частности, в приближении плоских волн имеем

$$\langle xd|\hat{r}|yp\rangle \propto (x-y)^{-2}.$$

Физическая интерпретация происхождения и аналитической структуры составляющих (4)–(8) аномально-дисперсионной амплитуды вероятности рассеяния может быть дана в представлении диаграмм Голдстоуна – Хаббарда – Фейнмана нерелятивистской квантовой теории многих тел [7, 11]. На рис. 1 приведена часть первых (основных) слагаемых бесконечного ряда диаграмм парциальных амплитуд рассеяния для ηQ (рис. 1*а*), ηC (рис. 1*б*) и $\eta(A-Q)$, ηB (рис. 1*в,г*). Введены следующие обозначения: $\omega_1(\omega_2)$ — падающий (рассеянный) фотон; $i(j) = ns(np)$ — вакансия; $\varepsilon = \varepsilon p$ — фотоэлектрон конечного состояния рассеяния, $x = xd$ — фотоэлектрон промежуточного состояния рассеяния; стрелка вправо (влево) — состояние рождается выше (ниже) уровня Ферми (совокупность квантовых чисел валентной np-оболочки атома); волнистая линия — кулоновское взаимодействие; направление времени — слева направо ($t_1 < t_2$). Так, например, диаграмма a описывает амплитуду следующего процесса. В момент времени t_1 субвалентная ns-оболочка атома поглощает ω_1-фотон. В результате радиационного $ns \to \varepsilon p$-перехода возникает $i(ns)$-вакансия и $\varepsilon(\varepsilon p)$-фотоэлектрон. В момент времени $t_2 > t_1$ излучается ω_2-фотон при радиационном $ns \to np$-распаде ns-вакансии. В результате $i(ns)$-вакансия «захлопывается» np-электроном и образуется валентная $j(np)$-вакансия.

Заметим, что при расчете амплитуд вероятности рассеяния мы не обращались к математической технике диаграмм Голдстоуна – Хаббарда – Фейнмана, они приведены лишь с целью иллюстрации квантовой динамики процессов рассеяния на одночастичном уровне. Более того, установление точного соответствия аналитических структур парциальных амплитуд вероятности рассеяния $\eta(A, B, C)$ бесконечным рядам диаграмм представляет собой самостоятельную проблему, решение которой не входило в задачу данной работы.

В заключение этого раздела отметим следующее. В энергетической области ненулевой энергии ω_1 и при $\omega_2 \to 0$ из (3) получаем

$$\frac{d^2\sigma_\perp}{d\omega_2 d\Omega} \propto \frac{1}{\omega_2} C^2 \to \infty. \tag{9}$$

Результат (9) в литературе известен как проблема «инфракрасной катастрофы (расходимости)» при вычислении вероятности излучения электроном длинноволнового фотона [12, 13]. Появление этой расходимости говорит о необходимости в данном случае выхода за рамки квантовомеханической теории возмущений, в которых в работе [1] была построена математическая модель дважды дифференциального сечения процесса резонансного неупругого рассеяния фотона свободным атомом. Таким образом, выражение для сечения (3) при ненулевой энергии ω_1 и при $\omega_2 \to 0$ становится, строго говоря, неприменимым.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты расчета сечения (3) в областях энергий падающего фотона ω_1 от 25 до 100 эВ и рассеянного фотона ω_2 от 16 до 30 эВ приведены на рис. 2–5.

Для ширины распада $2s$-вакансии атома Ne принято значение $\Gamma_{2s} = 0.05$ эВ, измеренное по экс-

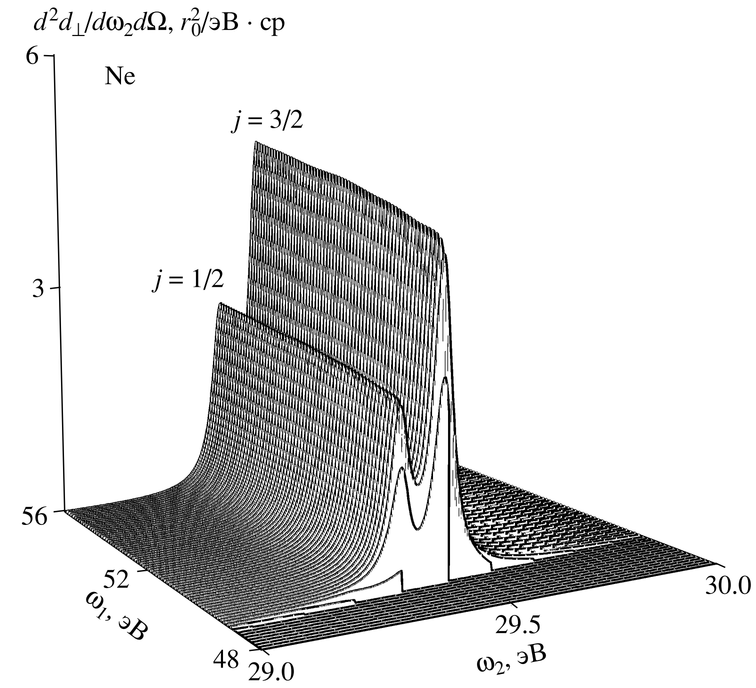

Рис. 2. Дважды дифференциальное сечение (в единицах r_0^2/эВ · ср.; $r_0^2 = 7.941 \cdot 10^{-26}$ см^2) резонансного неупругого рассеяния линейно-поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния) фотона атомом Ne в области энергии L_1-порога ионизации $I_{2s} = 49.314$ эВ. Учтены эффекты радиальной релаксации, межоболочечных корреляций и спин-орбитального расщепления $2p_j$-оболочки ($j = 1/2, 3/2$); $\omega_1(\omega_2)$ — энергия падающего (рассеянного) фотона, Ω — пространственный угол вылета рассеянного фотона. $\Gamma_{2s} = \Gamma_{beam} = 0.05$ эВ, $\delta_{SO} = 0.094$ эВ

периментальному спектру поглощения фотона его $2s$-оболочкой [14]. Для параметра ширины Γ_{beam} аппаратной функции принято значение 0.05 эВ. Тем самым мы предположили, что уровни спектрального разрешения эксперимента по энергиям падающего и рассеянного фотонов одинаковые. Теоретическое значение константы спин-орбитального расщепления $2p$-оболочки $\delta_{SO} = 0.094$ эВ взято из работы [15]. Нерелятивистский расчет энергий порогов ионизации $2s$- и $2p$-оболочек в данной работе дал значения $I_{2s} = 49.314$ эВ, $I_{2p} = 19.845$ эВ.

Измеренное в работе [16] радиационное (распад по оже-каналу запрещен) время жизни метастабильного $3s(^2S_{1/2})$-состояния атома Ar $\tau = 4.684 \pm 0.019$ нс ($\Gamma_{3s} \sim 10^{-7}$ эВ) лежит далеко вне разрешающей способности ($\Gamma \sim 10^{-3}$ эВ) современного синхротронного эксперимента по измерению резонансных структур спектров поглощения или рассеяния фотона свободным атомом. Поэтому в качестве ширины распада $3s$-вакансии атома Ar мы приняли ширину спектрального разрешения по энергии резонансной структуры его экспериментального (при энергии возбуждающего спектр фотона $\hbar\omega = 100$ эВ) $3s$-фотоэлектронного спектра $\Gamma_{beam} = \Gamma_{3s} = 0.137$ эВ из работы [17]. Теоретическое значение константы спин-орбитального расщепления $3p$-оболочки $\delta_{SO} = 0.164$ эВ взято из работы [15]. Нерелятивистский расчет энергий порогов ионизации $3s$- и $3p$-оболочек, проведенный в данной работе, дал значения $I_{3s} = 33.192$ эВ, $I_{3p} = 14.776$ эВ.

При численном расчете A-амплитуды согласно формуле (5) возникает проблема наличия полюса

$$x \to x_0 = \hbar\omega_1 - I_{np}$$

в подынтегральной функции

$$\Psi(x) = f(x)(x - x_0)^{-1}$$

в области интегрирования $x \in [0, \infty)$. В этом случае необходима аналитическая аппроксимация функции $f(x)$ в окрестности полюса. В данной работе в качестве такой аппроксимации мы использовали параболическую аппроксимацию (полиномами Лагранжа)

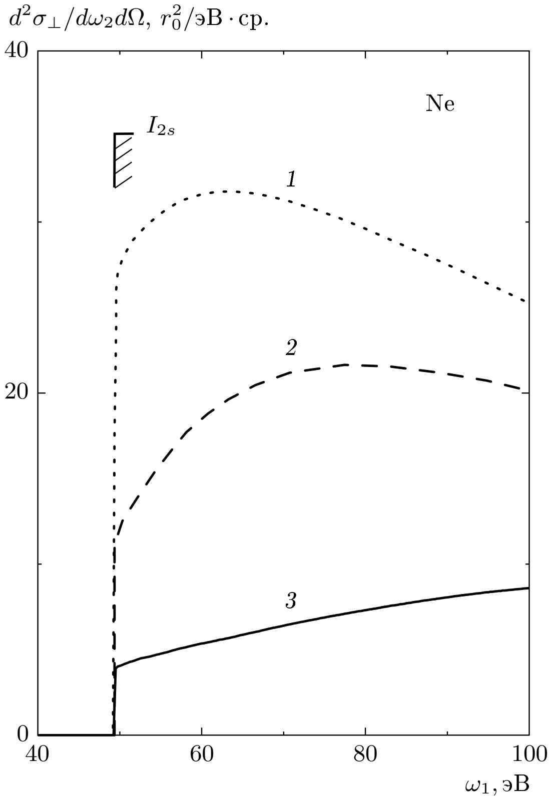

Рис. 3. Роль ЭРР и ЭМК при резонансном неупругом рассеянии линейно поляризованного фотона атомом Ne в области энергии L_1-порога ионизации: одноконфигурационное приближение Хартри–Фока без учета ЭРР и ЭМК (*1*), с учетом ЭРР (*2*), с учетом ЭРР и ЭМК (*3*). Энергия рассеянного фотона $\omega_2 = 29.47$ эВ (резонансное значение ω_2 для $j = 3/2$ на рис. 2). Значения ширин, константы δ_{SO} и обозначения такие же, как на рис. 2

на интервале $x \in [\alpha; \beta)$. Тогда интеграл принимает вид

$$\mathcal{P}\int_0^\infty \Psi(x)\,dx = f(\alpha) - f(\beta) + \left(\int_0^\alpha + \int_\beta^\infty\right)\Psi(x)\,dx,$$

где $\alpha = x_0 - \Delta$, $\beta = x_0 + \Delta$, Δ — фиксируемое малое число ($\Delta \sim 0.10$ эВ).

В аномально-дисперсионной области рассеяния вклад в сечение (3) амплитуды ηC тормозного излучения оказался исчезающе малым и не превысил $10^{-3}\,\%$ для Ne и $10^{-2}\,\%$ для Ar от вклада амплитуд ηA и ηB. Причина этого явления прежде всего в том, что, согласно выражению для сечения (3), амплитуда вероятности тормозного излучения в аномально-дисперсионной области рассеяния подавляется малыми множителями Γ_{ns} и $1/\omega_2$.

В этом случае с высокой степенью точности можно положить $C = 0$, тогда аналитическая структура и численный расчет сечения (3) существенно упрощаются. Можно предположить, что этот результат сохранится и для областей энергий порогов ионизации валентных и субвалентных оболочек других атомов таблицы Менделеева с $^1S_0$-термом основного состояния.

Для сечения (3) в области энергий порогов ионизации $2s$(Ne)- и $3s$(Ar)-оболочек в качестве «фоновых» мы учли вклады неупругой контактной (в представлении диаграмм Голдстоуна–Хаббарда–Фейнмана в вершине взаимодействия сходятся четыре линии — две фотонные, электрона и вакансии) [1] и упругой рэлеевской (упругое рассеяние фотона электронами атома) [18, 19] частей полного дважды дифференциального сечения рассеяния при угле рассеяния (угол между волновыми векторами падающего и рассеянного фотонов) $\theta = 90°$. Отметим, что в принятой схеме предполагаемого эксперимента сечение (3) (аномально-дисперсионная область рассеяния) не зависит от угла рассеяния. В этом случае угловая зависимость полного дважды дифференциального сечения рассеяния возникает через указанные контактную и рэлеевскую части сечения.

Для контактного (в данном случае нерезонансного комптоновского) рассеяния с учетом эффектов радиальной релаксации в качестве конечных учтены состояния $ns\varepsilon(s,p)$ и $np^5\varepsilon(s,p,d)$. При этом, как и в случае аномально-дисперсионного рассеяния, конечные состояния $1s \to \varepsilon(s,p)$-перехода не учитывались в силу значительной отделенности энергии порога ионизации $1s$-оболочки от величин $I_{ns,np}$ (например, для атома Ne $I_{1s} - I_{2s} \approx 822$ эВ). Для рэлеевского рассеяния с учетом эффектов радиальной релаксации и межоболочечных корреляций рассчитано сечение по каналу

$$\hbar\omega_1 + [0] \to [0] + \hbar\omega_1.$$

Суммарный вклад эффектов контактного и рэлеевского рассеяния не превысил величины 0.7 % от вклада сечения (3) и на рис. 2–5 не приведен.

Сформулируем основные результаты данной работы.

Учет эффекта радиальной релаксации (ЭРР) одноэлектронных орбиталей промежуточных состояний рассеяния в хартри-фоковском поле возникающей субвалентной s-вакансии приводит к практически двукратному уменьшению абсолютных вели-

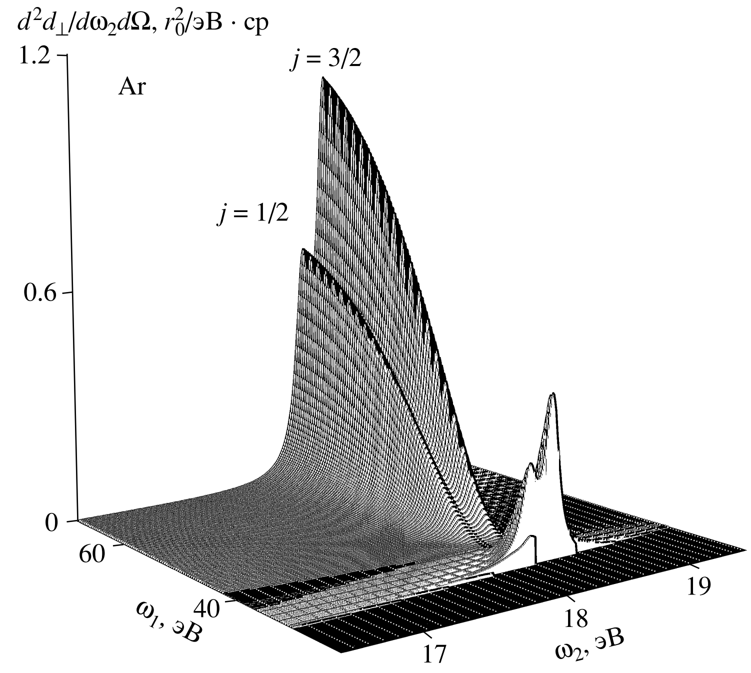

Рис. 4. Дважды дифференциальное сечение резонансного неупругого рассеяния линейно-поляризованного фотона атомом Ar в области энергии M_1-порога ионизации $I_{3s} = 33.192$ эВ. Учтены ЭРР, ЭМК и эффект спин-орбитального расщепления $3p_j$-оболочки; $\Gamma_{3s} = \Gamma_{beam} = 0.137$ эВ, $\delta_{SO} = 0.164$ эВ. Остальные обозначения такие же, как на рис. 2

чин дважды дифференциального сечения резонансного неупругого рассеяния фотона атомами Ne и Ar в области энергии порога ионизации субвалентной s-оболочки, рассчитанного без учета этого эффекта (кривые *1* и *2* на рис. 3, 5).

Учет эффекта межоболочечных корреляций (ЭМК) — в данном случае электростатического взаимодействия конфигураций $ns\varepsilon p$ и np^5xd в промежуточном состоянии рассеяния — практически в два раза уменьшает абсолютные величины дважды дифференциального сечения резонансного неупругого рассеяния фотона атомами Ne и Ar в области энергии порога ионизации субвалентной s-оболочки, рассчитанного с учетом лишь эффекта радиальной релаксации (кривые *2* и *3* на рис. 3, 5).

Более того, в случае атома Ar учет эффекта межоболочечных корреляций приводит также и к заметному качественному изменению геометрии кривой теоретического сечения рассеяния одноэлектронного приближения — образованию глубокого минимума сечения (3) в запороговой области энергий падающего фотона $\omega_1 \approx 40 \pm 5$ эВ (кривая *3* на рис. 5). Причина этого явления в том, что в указанной области энергий падающего фотона как реальная, так и мнимая части амплитуды вероятности радиационного перехода (с поглощением фотона ω_1) в состояние с волновой функцией $|\Psi(\varepsilon)\rangle$ из (2) проходят через нуль. Этот результат воспроизводит результаты, теоретически предсказанные и физически интерпретированные еще в ранней работе [20] по исследованию спектра поглощения фотона атомом Ar в области энергии порога ионизации $3s$-оболочки.

Общий вывод данной работы для, в частности, попыток реализации концепции создания рентгеновского лазера на эмиссионных переходах $2p \to 2s$ (Ne, неоноподобные ионы) [4] и $3p \to 3s$ (Ar, аргоноподобные ионы) можно сформулировать следующим образом. В области энергии порога ионизации субвалентной s-оболочки атомов Ne и Ar учет эффектов радиальной релаксации и межоболочечных корреляций приводит к сильному подавлению интенсивности резонансного ($\omega_2 \to \Delta_i$ в функции W_i из (3)) комптоновского рассеяния, рассчитанной в одноэлектронном приближении «неперестроенного» атомного остатка. При этом указанные эффекты оказываются одного порядка и, таким образом, при теоретическом описании абсолютных величин и формы дважды дифференциального сечения резо-

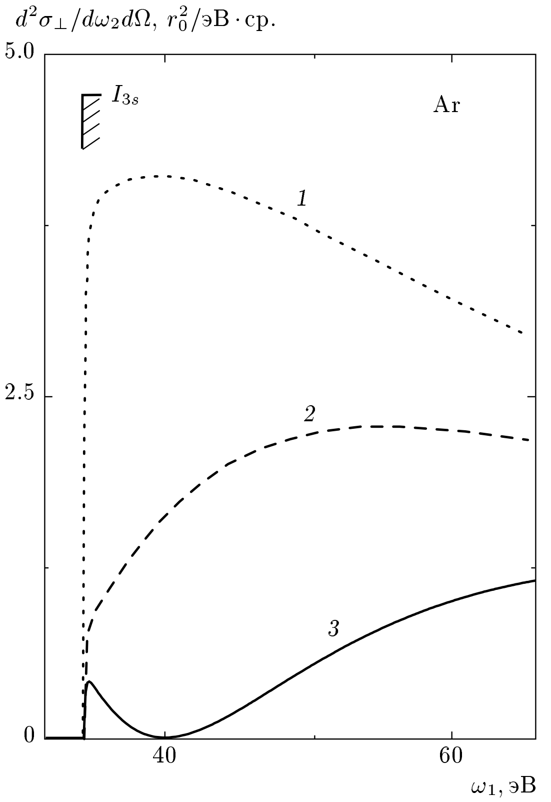

Рис. 5. Роль ЭРР и ЭМК при резонансном неупругом рассеянии линейно-поляризованного фотона атомом Ar в области энергии M_1-порога ионизации. Энергия рассеянного фотона $\omega_2 = 18.41$ эВ (резонансное значение ω_2 для $j = 3/2$ на рис. 4). Значения ширин и константы δ_{SO} такие же, как на рис. 4. Остальные обозначения такие же, как на рис. 2, 3

нансного неупругого рассеяния должны учитываться одновременно.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено первое теоретическое исследование роли многочастичных эффектов при определении абсолютных величин и формы дважды дифференциального сечения резонансного неупругого рассеяния фотона рентгеновского вакуумного ультрафиолетового диапазона в области энергии порога ионизации субвалентной ns-оболочки на примере свободных атомов Ne ($n = 2$) и Ar ($n = 3$).

Установлено, что вероятность эмиссионного перехода $np \to ns$ в исследуемых областях энергий падающего фотона существенно определяется прежде всего эффектом радиальной релаксации состояний рассеяния и эффектом межоболочечных корреляций, учет которых в несколько раз уменьшает интенсивность резонансного комптоновского (в данном случае аномально-дисперсионного) рассеяния, полученную в одноэлектронном приближении.

При этом вклады эффектов тормозного излучения аномально-дисперсионного типа, контактного неупругого рассеяния (как типа рассеяния Ландсберга–Мандельштама–Рамана, так и комптоновского типа) и рэлеевского (упругого) рассеяния оказываются практически подавленными и могут не учитываться при теоретической интерпретации эмиссионных спектров.

В настоящее время эксперимент по измерению дважды дифференциального сечения резонансного неупругого рассеяния фотона атомами Ne и Ar в области энергии порога ионизации субвалентной s-оболочки в литературе отсутствует. Таким образом, пока отсутствует возможность прямого сравнения результатов данной работы с экспериментом. Однако результаты данной работы (кривые *2* и *3* на рис. 3, 5) качественно воспроизводят результаты многочисленных экспериментальных и теоретических исследований формы спектров фотопоглощения в области энергии порога ионизации субвалентной s-оболочки атомов Ne и Ar (см., например, детальный обзор [21]).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, В. А. Явна, ЖЭТФ **128**, 698 (2005).
2. H. Daido, Rep. Prog. Phys. **65**, 1513 (2002).
3. K. A. Janulewicz, A. Lucianetti, G. Priebe, and P. V. Nickles, X-Ray Spectrom. **33**, 262 (2004).
4. P. L. Hagelstein, Plasma Phys. **25**, 1345 (1983).
5. J. K. Lepson, P. Beiersdorfer, E. Behar, and S. M. Kahn, Astrophys. J. **590**, 604 (2003).
6. P. Beiersdorfer, E. Behar, K. P. Boyce et al., Astrophys. J. **576**, L169 (2002).
7. M. Ya. Amusia and N. A. Cherepkov, Case Stud. Atom. Phys. **5**, 47 (1975).
8. P.-O. Löwdin, Phys. Rev. **97**, 1474 (1955).
9. А. П. Юцис, А. Ю. Савукинас, *Математические основы теории атома*, Минтис, Вильнюс (1973).
10. М. Я. Амусья, *Тормозное излучение*, Энергоатомиздат, Москва (1990).

11. Н. Марч, У. Янг, С. Сампантхар, *Проблема многих тел в квантовой механике*, Мир, Москва (1969).

12. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1969).

13. V. Florescu and M. Gavrila, Phys. Rev. A **68**, 052709 (2003).

14. O. Wilhelmi, G. Mentzel, B. Zimmermann et al., J. Electr. Spectr. Rel. Phen. **101–103**, 155 (1999).

15. K.-N. Huang, M. Aoyagi, M. H. Chen et al., At. Data Nucl. Data Tables. **18**, 243 (1976).

16. S. Lauer, H. Liebel, F. Vollweiler et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **32**, 2015 (1999).

17. A. Kikas, S. J. Osborne, A. Ausmees et al., J. Electr. Spectr. Rel. Phen. **77**, 241 (1996).

18. А. Н. Хоперский, В. А. Явна, *Рассеяние фотона многоэлектронной системой*, Энергоатомиздат, Москва (2004).

19. R. H. Pratt, Radiat. Phys. Chem. **74**, 411 (2005).

20. М. Я. Амусья, В. К. Иванов, Н. А. Черепков, Л. В. Чернышева, ЖЭТФ **66**, 1537 (1974).

21. М. Я. Амусья, В. К. Иванов, УФН **152**, 185 (1987).