

ЭФФЕКТ РЕЗОНАНСНОГО НЕУПРУГОГО КОНТАКТНОГО РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ФОТОНА АТОМОМ И ИОНОМ

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

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

Поступила в редакцию 14 февраля 2006 г.

Теоретически предсказано существование вне областей рентгеновской эмиссии протяженной резонансной структуры полного дважды дифференциального сечения рассеяния линейно поляризованного фотона свободным атомом (ионом), обусловленной практически лишь контактным типом неупругого рассеяния. Для амплитуды вероятности контактного неупругого рассеяния использовано аналитическое выражение, полученное вне рамок дипольного и импульсного приближений для нерелятивистского оператора перехода в работе [4]. Исследовано резонансное неупругое контактное рассеяние рентгеновского фотона атомом неона и неоноподобными ионами аргона, титана и железа. Расчеты выполнены в нерелятивистском приближении для волновых функций состояний рассеяния. Учтены многочастичные эффекты радиальной релаксации одноэлектронных орбиталей в хартри-фоковском поле глубокой $1s$ -вакансии и (в случае атома неона) двойного возбуждения/ионизации основного состояния атома.

PACS: 32.80.-t

1. ВВЕДЕНИЕ

Ограничение дипольным приближением (см., например, обзоры [1, 2]) при расчете амплитуды вероятности процесса неупругого рассеяния мягкого и жесткого рентгеновских (энергии падающего $\hbar\omega_1$ и рассеянного $\hbar\omega_2$ фотонов от 300 эВ до 1.5 МэВ) фотонов свободным атомом приводит к следующему результату. Дважды дифференциальное сечение процесса вне энергетических областей образования эмиссионных (аномально-дисперсионных) структур практически обращается в нуль. Вследствие этого в литературе до сих пор отсутствуют описания экспериментальных и теоретических исследований внеэмиссионных рентгеновских областей сечения процесса. Однако, как будет показано в данной работе, на самом деле эти области обнаруживают сложную протяженную резонансную структуру спектра рассеяния. Таким образом, они несут богатую информацию об исследуемой рассеивающей фотон многоэлектронной системе, в частности о природе и роли многочастичных эффектов и их квантовой интерференции.

Здесь под термином «область протяженной резонансной структуры» понимается область значений сканируемого по энергиям $\hbar\omega_1$ и $\hbar\omega_2$ дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния рентгеновского фотона атомом (ионом), где сечение обнаруживается как совокупность резонансных максимумов. При этом причиной возникновения таких резонансов оказывается факт совпадения определенных частот

$$\nu = \frac{\omega_1 - \omega_2}{2\pi}$$

прежде всего, контактного (см. далее) перехода с собственными частотами $nl \rightarrow m(s, p, d, f, \dots)$ -возбуждения ($m \geq n$) остоной nl -оболочки атома (иона).

Можно предположить, что осуществление проекта создания рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL: X-Ray Free-Electron Laser) с генерацией перестраиваемого по длине волны λ от 60 до 1.0 Å ($\hbar\omega$ от 0.2 до 12.4 кэВ) фотона [3] откроет возможность детального экспериментального исследования протяженных резонансных внеэмиссионных структур сечения рассеяния фотона многоэлектронной системой.

Выход за рамки дипольного приближения при

*E-mail: hopersky_vm_1@rgups.ru

теоретическом описании амплитуды вероятности неупругого контактного рассеяния рентгеновского фотона атомом осуществлен с помощью методов теории неприводимых тензорных операторов в недавней работе авторов [4]. Заметим, что в случае, когда игнорируют многочастичные эффекты в состояниях рассеяния и ограничиваются учетом лишь комптоновского рассеяния (конечное состояние рассеяния — состояние сплошного спектра), аналитические результаты работы [4] для амплитуды вероятности контактного рассеяния сводятся в нерелятивистском приближении для оператора перехода к результатам, полученным вне рамок дипольного приближения еще в ранней работе [5].

В данной работе на примере свободных атома неона (Ne, заряд ядра $Z = 10$, электронная конфигурация основного состояния $[0]1s^22s^22p^6(^1S_0)$) и многозарядных неоподобных ионов аргона (Ar^{8+} , $Z = 18$), титана (Ti^{12+} , $Z = 22$) и железа (Fe^{16+} , $Z = 26$) конкретизируются аналитические результаты работы [4] и устанавливается следующее: вне областей рентгеновской эмиссии также возникают протяженные резонансные структуры полного дважды дифференциального сечения процесса, обусловленные практически лишь контактным типом неупругого рассеяния.

Мы не рассматриваем, в частности, широко используемое в литературе (при изучении как в жестком рентгеновском, так и в гамма-диапазонах энергий падающего фотона контактного комптоновского рассеяния) так называемое импульсное приближение [6, 7], поскольку при исследуемых нами энергиях падающего и рассеянного фотонов, например для угла рассеяния $\theta = 90^\circ$, произведение qa_0 (q — модуль вектора рассеяния, a_0 — радиус Бора) принимает значения в интервале от 0.4 (Ne) до 3.4 (Fe^{16+}), а эти значения лежат вне области применимости импульсного приближения, $qa_0 \gg 1$.

Мы также не учитываем процессы неупругого рассеяния фотона ядром атома (иона), нуклонами ядра и лептон-антилептонными парами, которые рождаются кулоновским полем ядра, поскольку их влияние на сечение неупругого рассеяния в рентгеновском диапазоне энергий падающего фотона несущественно [1].

Полученные результаты могут быть востребованы, в частности, в контексте проблем создания, наряду с XFEL, рентгеновского лазера на неоподобной плазме как активной среде с генерацией на $3p \rightarrow 3s$ -переходе (см., например, результаты по экспериментальному обнаружению лазерного эффекта для ионов Ar^{8+} [8], Ti^{12+} [9], Fe^{16+} [10] и обзор [11]),

наблюдения и уточнения интерпретации важного для астрофизики эмиссионного $K\alpha$ -спектра атома железа и его многозарядных ионов (см., например, [12] для Fe и [13] для Fe^{16+}), а также при теоретическом описании процессов резонансного неупругого (Ландсберга — Мандельштама — Рамана — Комптона [14–16]) рассеяния рентгеновского фотона такими многоэлектронными системами, как атомы, ионы, молекулы [17] и простые кластеры [18].

2. ТЕОРИЯ МЕТОДА

Построение аналитической структуры дважды дифференциального сечения изучаемого процесса мы будем проводить во втором порядке стационарной квантовомеханической теории возмущений. В этом случае нерелятивистский оператор взаимодействия электромагнитного поля с атомом (ионом) в кулоновской калибровке для поля дается известным выражением:

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

$$\mathbf{A}_i \equiv \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, 0),$$

где c — скорость света, e — заряд электрона, m_e — его масса, N — число электронов в атоме (ионе), \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 атома (иона).

Вторая сумма в операторе \hat{W} определяет аналитическое выражение для аномально-дисперсионной амплитуды вероятности неупругого рассеяния фотона атомом (ионом) (формула Крамерса — Гейзенберга — Уоллера) и дает теоретическое описание эмиссионных структур сечения процесса [1, 2, 4]. Эти структуры не являются предметом изучения данной работы и будут упомянуты лишь при анализе полученных результатов.

Первая сумма в формуле (1) определяет аналитическое выражение для амплитуды вероятности неупругого контактного рассеяния фотона атомом (ионом).

Как было впервые показано Ахиезером и Берестецким в 1969 г. [19], в рамках квантовой электродинамики (лагранжиан взаимодействия линеен по оператору электромагнитного поля A_μ , $L = j_\mu A_\mu$, где j_μ — оператор, например, электронного тока, $\mu = 0, 1, 2, 3$) первая сумма в выражении для оператора \hat{W} возникает в результате перехода к нерелятивистскому пределу ($\hbar\omega_1, \hbar\omega_2, ||E_n| - m_e c^2| \ll m_e c^2$,

где n — промежуточные состояния с энергией $E_n < 0$ в выражении для релятивистской амплитуды вероятности неупругого рассеяния фотона континуумом заполненных вакуумных n -состояний с отрицательными частотами («море Дирака»). Такое же выражение для первой суммы в формуле (1) возникает [19] и в нерелятивистском пределе ($|\varepsilon - m_e c^2| \ll m_e c^2$, $|\Psi_1| \ll |\Psi_2|$, где ε — энергия электрона, Ψ_1, Ψ_2 — двухкомпонентные спиноры, составляющие четырехкомпонентный спинор — волновую функцию электрона) для релятивистского уравнения Дирака, преобразующегося в уравнение Паули с гамильтонианом, содержащим оператор

$$\frac{(\mathbf{p}_i - \frac{e}{c}\mathbf{A}_i)^2}{2m_e}.$$

Тогда, коль скоро установлена аналитическая структура нерелятивистского оператора взаимодействия \hat{W} , его «дипольная» или «недипольная» формы определяются лишь выбором соответствующего приближения для фурье-компонент оператора электромагнитного поля \mathbf{A}_i .

Заметим, что в литературе контактную часть амплитуды в рассматриваемом нами случае неупругого рассеяния традиционно называют томпсоновской амплитудой [18].

Понятие «контактности» рассеяния иллюстрируется тем, что в формализме диаграмм Голдстоуна–Хаббарда–Фейнмана нерелятивистской квантовой теории многих тел [20] для амплитуды вероятности контактного рассеяния в вершине взаимодействия электромагнитного поля с атомной (ионной) подсистемой сходятся четыре линии [18]: две фотонные линии, линия возбужденного электрона и линия вакансии атомного (ионного) остова.

Рассмотрим процессы неупругого контактного рассеяния линейно поляризованного фотона атомом Ne и неоноподобным ионом вида

$$\hbar\omega_1 + [0] \rightarrow 1sml(^1L_J) + \hbar\omega_2, \quad ml > f, \quad J = L \quad (2)$$

(здесь и далее при записи атомной (ионной) конфигурации заполненные электронные оболочки не указаны), где f — уровень Ферми (совокупность квантовых чисел валентной оболочки атома (иона)). В случае схемы предполагаемого эксперимента $\mathbf{e}_{1,2} \perp P$, где \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 — векторы поляризации падающего и рассеянного фотонов, а P — плоскость рассеяния, проходящая через волновые векторы падающего (\mathbf{k}_1) и рассеянного (\mathbf{k}_2) фотонов.

В выражении (2) в схеме LS -связи 1L_J — результирующий терм открытых $1s$ - и ml -оболочек. Равен-

ство полного и орбитального моментов, $J = L$, отражает тот факт, что для 1S_0 -терма основного состояния атома (иона) указанные процессы идут с сохранением полного спина атомной (ионной) подсистемы ($\Delta S = 0$).

Мы не учитываем конечных $2sml$ - и $2p^5ml$ -состояний рассеяния, поскольку энергии порогов ионизации субвалентной ($2s$) и валентной ($2p$) оболочек сильно отделены от энергии порога ионизации глубокой $1s$ -оболочки (например, для атома Ne имеем $I_{1s} - I_{2s} \approx 822$ эВ).

Учтем, что для перехода (2) выполняются соотношения (см. формулы (7), (11) и (12) работы [4])

$$\left\{ \begin{matrix} l_1 & L & L_1 \\ L' & l_2 & t \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & J & S \\ J' & L' & t \end{matrix} \right\} \rightarrow \left\{ \begin{matrix} 0 & 0 & 0 \\ t & t & t \end{matrix} \right\}^2 = \frac{1}{2t+1},$$

$$\left(l_1^{N_1} LS \parallel l_1^{N_1-1} (L_1 S_1) l_1 \right) \rightarrow (s^2 {}^1S \parallel s({}^2S)s) = 1, \\ \left(0 \parallel C^{(t)} \parallel l \right) = (-1)^t \delta_{tl},$$

где t — мультипольность перехода.

Тогда полученное вне рамок дипольного и импульсного приближений для нерелятивистского оператора перехода в работе [4] общее аналитическое выражение для дважды дифференциального сечения неупругого контактного рассеяния линейно поляризованного фотона атомом (ионом) в атомной системе единиц ($e = m_e = \hbar = 1$) приводится к виду

$$\frac{d^2\sigma_{\perp}}{d\omega_2 d\Omega} = r_0^2 \left(\frac{\omega_2}{\omega_1} \right) \sum_{l \geq 0}^{\infty} (4l+2) Q_l, \quad (3)$$

$$Q_l = \sum_{ml > f} R_{ml}^2 G(\omega_{12}, \omega_m) + \int_0^{\infty} G(\omega_{12} - I_{1s}, \varepsilon) R_{\varepsilon l}^2 d\varepsilon, \quad (4)$$

$$R_{ml} = \langle 1s | j_l | ml \rangle = \int_0^{\infty} P_{1s}(r) j_l(qr) P_{ml}(r) dr, \quad (5)$$

$$G(x, y) = \frac{1}{\gamma_b \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ - \left(\frac{x-y}{\gamma_b \sqrt{2}} \right)^2 \right\}.$$

Обратим внимание на то, что теперь, в отличие от работы [4], в качестве аппаратной функции (экспериментально фиксируемой функции распределения по энергии падающего на атом (ион) рентгеновского излучения) мы взяли не коши-лоренцевскую,

а G -гауссову спектральную функцию. Здесь до процедуры интегрирования сечения (3) с G -функцией ее аргументы переопределены следующим образом: $x \rightarrow \omega$ — распределенная по «пучку» энергия падающих на атом (ион) фотонов и $y \rightarrow \omega_1$ максимальная энергия фотона в «пучке». В выражениях (3)–(5) j_l — сферическая функция Бесселя первого рода порядка l (интегральное представление Пуассона):

$$j_l(x) = \frac{1}{2^{l+1}l!} x^l \int_{-1}^{+1} (1-y^2)^l \cos(xy) dy,$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} j_l(x) = \delta_{l0}, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} j_l(x) = 0;$$

q — модуль вектора рассеяния (вектора переданного атому (иону) импульса):

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

$$\beta = \omega_2/\omega_1$$

(θ — угол рассеяния, т. е. угол между векторами \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2); $P_{ml}(r)$ — радиальная часть волновой функции ml -электрона; Ω — пространственный угол вылета рассеянного фотона; r_0 — классический радиус электрона; $\omega_{12} = \omega_1 - \omega_2$; энергия электрона сплошного спектра $\varepsilon \geq 0$; I_{1s} — энергия порога ионизации $1s$ -оболочки; ω_m — энергия $1s \rightarrow ml$ -перехода:

$$\omega_m = E(1sml) - E(0)$$

(E — полные хартри-фоковские энергии соответствующих конфигураций);

$$\gamma_b = \Gamma_{beam}/2$$

(Γ_{beam} — параметр профиля аппаратной гауссовой функции G).

Переход в конечное $1sml$ -состояние рассеяния сопровождается многочастичным эффектом радиальной релаксации волновых функций электронов атомного (ионного) остатка и возбужденных состояний в хартри-фоковском поле $1s$ -вакансии. В самом деле, появление $1s$ -вакансии приводит к тому, что, прежде всего, внешние оболочки атомного (ионного) остатка реагируют на разрушение $1s^2$ -экрана между ними и ядром, уменьшая свой средний радиус. Смещение к ядру электронной плотности оболочек атомного (ионного) остатка сопровождается дополнительной делокализацией волновой функции возбужденного электрона. Следствием такой делокализации является уменьшение в области энергии порога ионизации $1s$ -оболочки (например, для атома Ne практически

в 1.5 раза) амплитуды вероятности контактного перехода.

В данной работе этот эффект учтен с помощью методов теории неортогональных орбиталей [21]. Так, в случае атома Ne и неоподобного иона амплитуда вероятности контактного перехода (5) модифицируется следующим образом:

1. $^1S_0 \rightarrow ^1S_0$ -переход ($l = 0$):

$$R_{ms} \rightarrow N_{1s} \langle 1s_0 | j_0 | ms_c \rangle, \quad N_{1s} = \langle 1s_0 | 1s_+ \rangle \langle 2s_0 | 2s_+ \rangle^2 \langle 2p_0 | 2p_+ \rangle^6. \quad (6a)$$

2. $^1S_0 \rightarrow ^1P_1$ -переход ($l = 1$):

$$R_{mp} \rightarrow N_{1s} \langle 1s_0 | j_1 | mp_c \rangle. \quad (6б)$$

3. $^1S_0 \rightarrow ^1L_J$ -переход ($J = L = l \geq 2$):

$$R_{ml} \rightarrow N_{1s} \langle 1s_0 | j_l | ml_+ \rangle. \quad (6в)$$

Здесь определена корреляционная волновая функция перехода ($l = 0, 1$):

$$|ml_c\rangle = |ml_+\rangle - |2l_+\rangle \frac{\langle 2l_0 | ml_+\rangle}{\langle 2l_0 | 2l_+\rangle},$$

$$\langle 2l_0 | ml_+\rangle = \int_0^\infty P_{2l_0}(r) P_{ml_+}(r) dr.$$

Радиальные части волновых функций одноэлектронных $1s_0$ -, $2s_0$ -, $2p_0$ -состояний получены путем решения нерелятивистских нелинейных интегро-дифференциальных уравнений самосогласованного поля Хартри–Фока для конфигурации основного состояния атома (иона). Радиальные части волновых функций одноэлектронных $1s_+$ -, $2s_+$ -, $2p_+$ -, ml_+ -состояний получены решением усредненных по термам уравнений Хартри–Фока для конфигурации $1sml$ (в поле $1s$ -вакансии).

Отметим, что в силу конечности своего времени жизни ($\tau_{1s} = \hbar \Gamma_{1s}^{-1}$) как метастабильного состояния, $1s$ -вакансия не сохраняется в конечном состоянии рассеяния. Этот факт аналитически выражается в том, что до процедуры интегрирования сечения (3) с аппаратной G -гауссовой функцией спектральная функция плотности возбужденных $(m, \varepsilon)l$ -состояний имеет коши-лоренцевский вид:

$$L(x, \omega_1) = \frac{\Gamma_{1s}}{2\pi} \frac{1}{(\omega_1 - I_{1s} - x)^2 + \Gamma_{1s}^2/4},$$

где x — энергия возбужденного из $1s$ -оболочки атома (иона) одноэлектронного $(m, \varepsilon)l$ -состояния, Γ_{1s} — ненулевая полная (по каналам радиационного и автоионизационного типов) ширина распада

1s-вакансии (естественная ширина рентгеновского 1s-уровня). Здесь на примере xl -состояний сплошного спектра функция $L(x, \omega_1)$ возникает как спектральная функция плотности xl -состояний на интервале энергий $(x, x + dx)$ в выражении (золотое правило Ферми) для дифференциала dW_{ij} -вероятности контактного $i \rightarrow j$ -перехода в области энергии порога $1s(i) \rightarrow xl(j)$ -ионизации (I_{1s}) при неупругом рассеянии рентгеновского фотона ω_1 атомом (ионом):

$$dW_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} |C_{ij}|^2 L(x, \omega_1) dx,$$

где C_{ij} — амплитуда вероятности перехода.

В приближении, при котором мы игнорируем эффект радиальной релаксации амплитуды, выражение (5) принимает вид

$$R_{ml} \rightarrow \langle 1s_0 | j_l | ml_0 \rangle, \quad l \geq 0,$$

что существенно упрощает аналитическую структуру и численный расчет функции Q_l (4).

В дипольном приближении, $qr \rightarrow 0$, для оператора контактного перехода \hat{C} имеем

$$\hat{C} = \sum_{k=1}^N \exp \{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_k)\} \rightarrow N,$$

при этом сферические функции Бесселя $j_0 \rightarrow 1$, $j_l \rightarrow 0$ для $l \geq 1$ и в сечении (3) ненулевыми оказываются лишь амплитуды (6а):

$$R_{ms} \rightarrow N_{1s} \langle 1s_0 | ms_c \rangle. \quad (7)$$

Последующий переход к приближению, при котором мы игнорируем эффект радиальной релаксации, ($ms_+ \rightarrow ms_0$), приводит к тому, что и амплитуды (7) обращаются в нуль в силу взаимной ортогональности радиальных частей волновых функций одноэлектронных $1s_0$ -, $2s_0$ - и ms_0 -состояний. Этот результат [1, 2] и был отмечен во Введении.

В области энергии порога ионизации 1s-оболочки атома (иона) эффект радиальной релаксации приводит к уменьшению (например, для атома Ne практически в 2 раза) вероятности контактного перехода, рассчитанной в приближении Хартри–Фока для волновых функций электронов «неперестроенного» атомного (ионного) остатка. Теряемая таким образом вероятность восстанавливается прежде всего при учете процессов кратного возбуждения/ионизации основного состояния атома (иона).

В данной работе мы ограничились рассмотрением процессов двойного возбуждения/ионизации, которые по порядку величины интенсивности

следуют за процессами однократного возбуждения/ионизации, и на примере атома Ne учли эффект дополнительного возбуждения $2p$ -оболочки основного состояния:

$$\begin{aligned} \hbar\omega_1 + [0] &\rightarrow 1s2pmlnp + \hbar\omega_2, \\ l = 0, 1, \quad m = 3, 4, \varepsilon, \quad n = 3, 4. \end{aligned} \quad (8)$$

Волновые функции состояний рассеяния в выражении (8) получены в схеме LS -связи в нерелятивистском одноконфигурационном приближении Хартри–Фока. В этом случае амплитуда (5) принимает вид

$$R_{ml} \rightarrow A_{mn}^{lp} R_{ml} \langle 2p_0 | np \rangle, \quad (9)$$

$$N_{1s} \rightarrow N_{1s2p} = \langle 1s_0 | 1s \rangle \langle 2s_0 | 2s \rangle^2 \langle 2p_0 | 2p \rangle^5.$$

Здесь A_{mn}^{lp} — дополнительная к множителю $\sqrt{4l+2}$ в сечении (3) угловая часть амплитуды вероятности перехода (8), полученная как степенная средняя второго порядка по угловым частям амплитуд вероятности переходов в фиксированные T_1 - и T_2 -термы ($T \equiv LS$) состояния $1s2p(T_1)mlnp(T_2)$. Радиальные части волновых функций одноэлектронных $1s$ -, $2s$ -, $2p$ -, ml -, np -состояний получены путем решения усредненных по термам уравнений Хартри–Фока для конфигурации $1s2pmlnp$ (в поле $1s$ - и $2p$ -вакансий). При этом аналитическая структура дважды дифференциального сечения рассеяния сохраняет вид (3) с тем отличием, что величина I_{1s} заменяется на энергию $1s2p \rightarrow \varepsilon lnp$ -перехода,

$$I_{1s} \rightarrow I_{1s2pnp} = E(1s2pnp) - E(0) \quad \text{при} \quad \varepsilon = 0,$$

а величина ω_m заменяется на энергию $1s2p \rightarrow mlnp$ -перехода,

$$\omega_m \rightarrow \omega_{mn} = E(1s2pmlnp) - E(0).$$

Учет мультиплетных эффектов, эффектов конфигурационного взаимодействия в состояниях двойного возбуждения/ионизации из (8) и, как следствие, аналитических модификаций амплитуд (9), а также эффектов двойного возбуждения/ионизации основного состояния неоподобных ионов требует отдельного исследования.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты нерелятивистского расчета абсолютных величин, структуры и формы дважды дифференциального сечения резонансного неупругого контактного рассеяния (3) для атома Ne и ионов Ar^{8+} , Ti^{12+} , Fe^{16+} приведены в табл. 1, 2 и на рис. 1–3.

Таблица 1. Спектральные характеристики резонансов $1s \rightarrow ml$ дважды дифференциального сечения неупругого контактного рассеяния линейно поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния) рентгеновского фотона атомом Ne (рис. 1а, 2а) и неоноподобными ионами Ar^{8+} , Ti^{12+} , Fe^{16+} (рис. 3)

l	m	ω_2				σ_{\perp}			
		Ne	Ar^{8+}	Ti^{12+}	Fe^{16+}	Ne	Ar^{8+}	Ti^{12+}	Fe^{16+}
s	3	461.40	1801.13	2987.46	4356.58	3.3(-6)	7.7(-7)	1.7(-8)	9.9(-7)
	4	458.47	1716.92	2830.29	4105.23	7.7(-7)	2.5(-7)	1.5(-9)	2.6(-7)
	5	457.60	1682.44	2763.93	3997.13	2.9(-7)	1.1(-7)	3.4(-10)	1.1(-7)
p	3	459.58	1784.12	2963.25	4325.25	2.7(-5)	4.0(-4)	4.4(-4)	7.0(-4)
	4	457.97	1710.43	2820.75	4092.63	8.1(-6)	1.2(-4)	1.8(-4)	2.2(-4)
	5	457.39	1679.30	2759.23	3990.86	3.7(-6)	5.5(-5)	8.5(-5)	9.9(-5)
d	3	458.12	1758.15	2926.08	4277.20	4.4(-11)	5.1(-7)	1.8(-6)	4.0(-6)
	4	457.46	1701.10	2807.23	4074.99	2.6(-11)	2.3(-7)	8.1(-7)	1.7(-6)
	5	457.16	1674.86	2752.74	3982.35	1.5(-11)	1.2(-7)	4.0(-7)	8.5(-7)
f	4	457.45	1698.16	2801.80	4066.91	3.7(-15)	6.6(-11)	4.8(-10)	1.6(-9)
	5	457.15	1673.34	2749.98	3978.30	3.3(-15)	4.8(-11)	3.3(-10)	1.1(-9)

Примечание. Расчет проведен вне рамок дипольного приближения для оператора контактного перехода с учетом эффекта радиальной релаксации. Энергия (в эВ) падающего фотона $\omega_1 = 1325$ (Ne), 5010 (Ar^{8+}), 7950 (Ti^{12+}), 11460 (Fe^{16+}). Угол рассеяния $\theta = 90^\circ$. Параметр (в эВ) профиля G -гауссовой спектральной функции $\Gamma_{beam} = 0.20$ (Ne), 0.59 (Ar^{8+}), 0.78 (Ti^{12+}), 1.05 (Fe^{16+}). Обозначения: $\sigma_{\perp} \equiv d^2\sigma_{\perp}/d\omega_2 d\Omega$ в единицах $r_0^2/\text{эВ}\cdot\text{ср}$ ($r_0^2 = 7.941 \cdot 10^{-26} \text{ см}^2$); ω_2 — энергия (в эВ) рассеянного фотона; Ω — пространственный угол вылета рассеянного фотона; $(-n) \equiv 10^{-n}$.

Таблица 2. Спектральные характеристики резонансов $1s2p \rightarrow mlnp$ дважды дифференциально сечения неупругого контактного рассеяния линейно поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния) рентгеновского фотона атомом Ne (рис. 1б, 2б)

l	m	n	ω_2	σ_{\perp}	N
p	4	4	417.37	2.3(-7)	1
	4(3)	3(4)	422.13	2.0(-6)	2
	3	3	424.63	3.6(-6)	4
s	4	3	422.68	2.9(-8)	3
	3	4	425.55	1.2(-8)	5
	3	3	428.05	8.5(-8)	6

Примечание. Расчет проведен вне рамок дипольного приближения с учетом эффекта радиальной релаксации. Энергия падающего фотона $\omega_1 = 1325$ эВ. Значения параметров θ , Γ_{beam} и обозначения даны в Примечании к табл. 1. N — номер резонанса на рис. 2б.

Исследованы внеэмиссионные области энергий падающего и рассеянного фотонов: для Ne ω_1 от 1320 до 1330 эВ и ω_2 от 450 до 465 эВ, для Ar^{8+} ω_2 от 1625 до 1800 эВ при $\omega_1 = 5010$ эВ, для Ti^{12+} ω_2 от 2650 до 3000 эВ при $\omega_1 = 7950$ эВ, для Fe^{16+} ω_2 от 3840 до 4350 эВ при $\omega_1 = 11460$ эВ.

Для ширины распада $1s$ -вакансии атома Ne принято значение $\Gamma_{1s} = 0.23$ эВ (измеренное методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и приведенное в работе [22]). Для ионов приняты результаты релятивистского расчета работы [23]: $\Gamma_{1s} = 0.590$ (Ar^{8+}), 0.778 (Ti^{12+}) и 1.046 (Fe^{16+}) эВ.

Для параметра профиля аппаратной G -гауссовой функции приняты значения $\Gamma_{beam} = 0.20$ (Ne), 0.59 (Ar^{8+}), 0.78 (Ti^{12+}) и 1.05 (Fe^{16+}) эВ. Тем самым мы предположили практически одинаковыми уровни спектрального разрешения предполагаемого эксперимента по энергиям падающего ($\sim \Gamma_{beam}$) и рассеянного ($\sim \Gamma_{1s}$) фотонов.

При расчете суммы функционального ряда по возбужденным состояниям дискретного спектра в функции Q_l (4) мы ограничились учетом $1s \rightarrow ml$ -переходов с главным квантовым числом

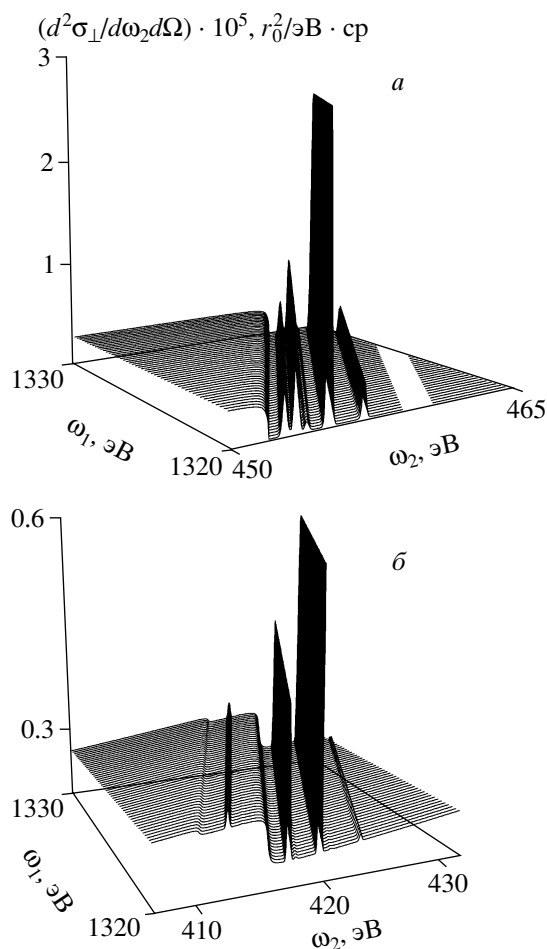


Рис. 1. Дважды дифференциальное сечение резонансного неупругого контактного рассеяния линейно поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния) рентгеновского фотона атомом Ne вне области образования эмиссионных структур: *a* — учтены $1s \rightarrow ml$ -переходы; *b* — учтены $1s \rightarrow ml$ - и $1s2p \rightarrow mlnp$ -переходы. Расчет проведен вне рамок дипольного приближения с учетом эффекта радиальной релаксации. Значения параметров θ , Γ_{beam} и обозначения даны в Примечании к табл. 1

$m \leq 5$, орбитальным квантовым числом $l \leq 3$ и $1s2p \rightarrow mlnp$ -переходов с $m, n \leq 4$ и $l = 0, 1$. Учет полноты набора (условия замкнутости [24]), например, ml -состояний ($l \leq 2$) рассеяния дискретного спектра (m от 3 до ∞) и, как следствие, снятие нефизического минимума теоретического сечения рассеяния в окрестности прямой $\omega_1 = \omega_2 + I_{1s}$ на плоскости (ω_1, ω_2) (рис. 1*a*) представляет собой относительно самостоятельную задачу и является предметом отдельного исследования.

В качестве «фоновых» для сечения (3) учте-

ны вклады эмиссионной $K\alpha_{1,2}$ -структуры и рэлеевской (упругое рассеяние фотона электронами атома (иона) [25–27]) части полного дважды дифференциального сечения рассеяния при угле рассеяния $\theta = 90^\circ$. Отметим здесь, что нерелятивистский расчет основной $K\alpha_{1,2}$ - и сателлитной $K\alpha_{3,4}$ -структур дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния фотона, например, атомом Ne в областях энергий ω_1 от 864 до 915 эВ и ω_2 от 846 до 858 эВ выполнен в работе авторов [4]. Нерелятивистский расчет дифференциального сечения рэлеевского рассеяния, например, атомом Ne в области энергий фотона от 865 до 920 эВ и ионом Ar^{8+} в области от 3125 до 3940 эВ выполнен в работе авторов [28].

Расчет показал, что суммарный вклад $K\alpha_{1,2}$ -структуры (канал резонансного неупругого рассеяния через образование промежуточного состояния: $\omega_1 + [0] \rightarrow 1snp \rightarrow 2p^5mp + \omega_2$) и рэлеевского рассеяния (канал упругого рассеяния: $\omega_1 + [0] \rightarrow [0] + \omega_1$), например, для атома Ne не превысил исчезающе малой величины порядка $10^{-16} [r_0^2/\text{эВ} \cdot \text{ср}]$. Таким образом, в исследуемых областях энергий падающего и рассеянного фотонов для атома Ne и ионов Ar^{8+} , Ti^{12+} , Fe^{16+} теория данной работы предсказывает появление протяженной резонансной структуры полного дважды дифференциального сечения рассеяния, обусловленной практически лишь контактным типом неупругого рассеяния. При этом переход от атома Ne к его изоэлектронной последовательности сопровождается следующими эффектами.

1. Энергетические области резонансов рассеяния заметно расширяются. Согласно данным табл. 1 и рис. 2*a*, 3, для атома Ne величина $\omega_{34} = \omega_2(1s \rightarrow 3p) - \omega_2(1s \rightarrow 4p) = 1.61$ эВ, тогда как для ионов $\omega_{34} = 73.69$ (Ar^{8+}), 142.50 (Ti^{12+}), 232.62 (Fe^{16+}) эВ.

2. Лидирующие резонансы сечения (3) приобретают характер гигантских резонансов рассеяния. Согласно данным табл. 1 и рис. 2*a*, 3, вероятность возникновения $1s \rightarrow 3p(4p)$ -резонансов для ионов практически на порядок превышает таковую для атома Ne: $\zeta_3(\zeta_4) = 15.07$ (15.00) (Ar^{8+}), 21.92 (22.73) (Ti^{12+}), 27.27 (27.00) (Fe^{16+}). Здесь

$$\zeta_m = \frac{\sigma_{\perp}^{ion}(1s \rightarrow mp)}{\sigma_{\perp}^{Ne}(1s \rightarrow mp)}.$$

3. Заметно возрастает относительный вклад в сечение рассеяния высших мультиполей ($l \geq 2$). Согласно данным табл. 1, для атома Ne величины $\alpha_d = 0.16 \cdot 10^{-3}$ и $\beta_f = 0.14 \cdot 10^{-3}$, тогда как для ионов они возрастают практически на три–четыре поряд-

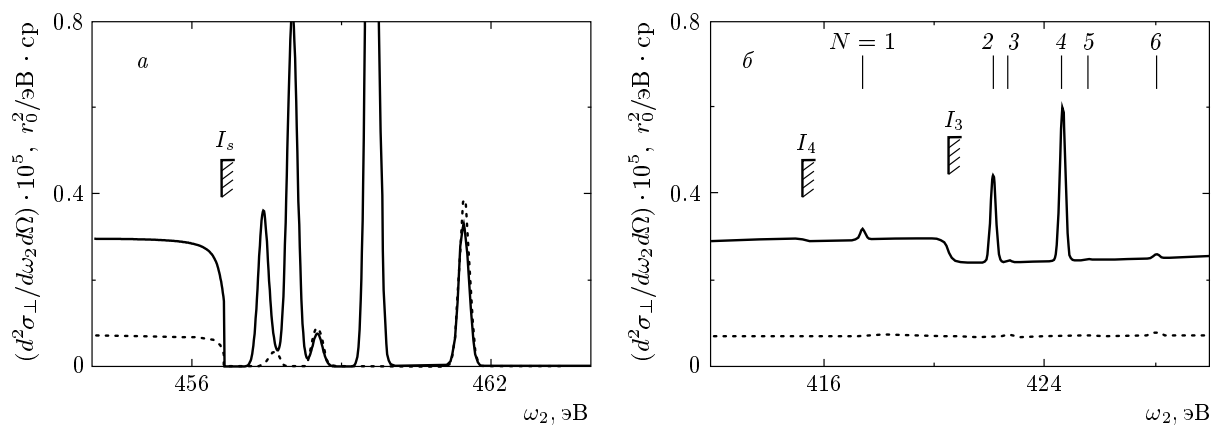


Рис. 2. См. рис. 1 при $\omega_1 = 1325$ эВ. Сплошная кривая — расчет вне рамок дипольного приближения с учетом эффекта радиальной релаксации; пунктирная кривая — в рамках дипольного приближения с учетом эффекта радиальной релаксации. $I_s = \omega_1 - I_{1s}$, $I_{1s} = 868.40$ эВ (нерелятивистский расчет данной работы) — энергия порога ионизации $1s$ -оболочки, $I_n = \omega_1 - I_{1s2pnp}$, $I_{1s2pnp} = 904.52$ ($n = 3$), 909.76 ($n = 4$) эВ (нерелятивистский расчет данной работы) — энергия порога $1s2p \rightarrow \varepsilon(s, p)np$ возбуждения/ионизации. Спектральные характеристики $1s \rightarrow ml$ -резонансов рассеяния, значения параметров θ , Γ_{beam} и обозначения даны в Примечании к табл. 1. Спектральные характеристики и идентификация $1s2p \rightarrow mlnp$ -резонансов рассеяния даны в табл. 2

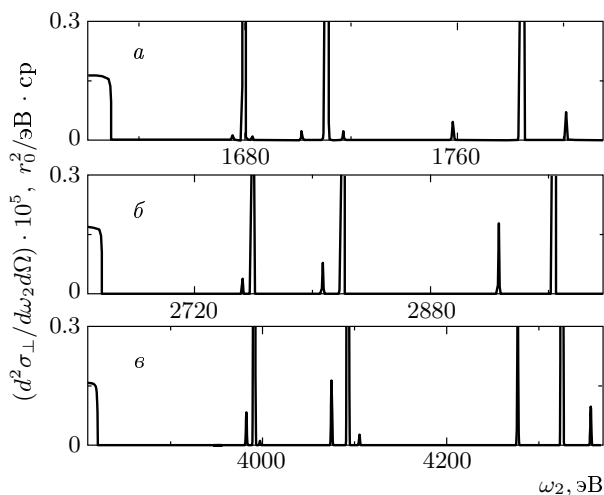


Рис. 3. Дважды дифференциальное сечение резонансного неупругого контактного рассеяния (учтены лишь $1s \rightarrow ml$ -переходы) линейно поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния) рентгеновского фотона неоподобными ионами Ar^{8+} ($\omega_1 = 5010$ эВ) (а), Ti^{12+} ($\omega_1 = 7950$ эВ) (б), Fe^{16+} ($\omega_1 = 11460$ эВ) (в) вне области образования эмиссионных структур. Расчет проведен вне рамок дипольного приближения с учетом эффекта радиальной релаксации. Спектральные характеристики резонансов рассеяния, значения параметров θ , Γ_{beam} и обозначения даны в табл. 1

ка: $\alpha_d(\beta_f) = 0.13$ (0.17) (Ar^{8+}), 0.31 (0.81) (Ti^{12+}), 0.58 (2.26) (Fe^{16+}). Здесь

$$\alpha_d = \left[\frac{\sigma_{\perp}(1s \rightarrow 3d)}{\sigma_{\perp}(1s \rightarrow 3p)} \right] \cdot 10^2,$$

$$\beta_f = \left[\frac{\sigma_{\perp}(1s \rightarrow 4f)}{\sigma_{\perp}(1s \rightarrow 3p)} \right] \cdot 10^6.$$

В качестве методического результата данной работы на примере атома Ne отметим, что, согласно выражению для амплитуды (7), ограничение дипольным приближением при теоретическом описании оператора контактного перехода приводит к нефизическому «эффекту исчезновения» лидирующих в сечении (3) $1s \rightarrow (m, \varepsilon)p$ -переходов (а также переходов с мультипольностью $l \geq 2$) с сохранением лишь (при учете эффекта радиальной релаксации) вклада куда менее вероятных $1s \rightarrow (m, \varepsilon)s$ -переходов (рис. 2а). Аналогичный вывод верен и в случае $1s2p \rightarrow mlnp$ -переходов (рис. 2б).

В заключение отметим следующие особенности расчета.

1. Согласно данным табл. 1, вероятность «заселения» $3p$ -состояния (P_{3p}) в атоме Ne в 8.2 раза превышает таковую для $3s$ -состояния (P_{3s}). С увеличением заряда ядра иона отношение

$$\eta = P_{3p}/P_{3s}$$

заметно возрастает (в случае Ti^{12+} аномальным образом): $\eta = 8.2$ (Ne), 523.8 (Ar^{8+}), 39024 (Ti^{12+}),

703.7 (Fe¹⁶⁺). При этом заметно уменьшается длина волны излучаемого при радиационном $1s(3p \rightarrow 3s)$ -переходе фотона: $\lambda = 6817$ (Ne), 729.4 (Ar⁸⁺), 512.5 (Ti¹²⁺), 396.0 (Fe¹⁶⁺). Здесь использовано соотношение

$$\lambda [\text{Å}] = 12406.764 (\omega_{ps} [\text{эВ}])^{-1},$$

где в нашем случае

$$\omega_{ps} = \omega_2(1s \rightarrow 3s) - \omega_2(1s \rightarrow 3p).$$

Заметим, что замена в атомном (ионном) остатке глубокой $1s$ -вакансии валентной $2p$ -вакансией приводит к уменьшению длины волны фотона, излучаемого при $3p \rightarrow 3s$ -переходе. Так, для наиболее интенсивного из наблюдаемых лазерных переходов, $2p^5(3p \rightarrow 3s)$, $J = 0 \rightarrow 1$, эксперимент для ионов (см. обзор [11]) дает $\lambda_{exp} = 468.8$ (Ar⁸⁺), 326.3 (Ti¹²⁺), 254.9 (Fe¹⁶⁺) Å. Теоретические результаты (среднее по термам схемы LS -связи) работы [29] и экспериментальные результаты (среднее по термам схемы jj -связи) работы [30] для атома Ne дают соответственно $\lambda_{th} = 6462$ Å и $\lambda_{exp} = 6474$ Å.

Высоковозбужденные состояния оказываются менее чувствительными к положению основной вакансии. Это и объясняет тот факт, что для высоковозбужденных состояний результаты наших расчетов хорошо согласуются с многочисленными известными из литературы экспериментальными и теоретическими результатами (см., например, [30–33]). Например, в случае иона Ti¹²⁺ наши значения $\lambda = 74.42$ ($4p \rightarrow 3s$), 79.52 ($4d \rightarrow 3p$), 93.31 ($4s \rightarrow 3p$), 99.83 ($4f \rightarrow 3d$) для переходов $1s(l \rightarrow l \pm 1)$ хорошо согласуются с соответствующими теоретическими значениями (усредненными по термам схемы jj -связи) работы [31] для $2p^5(l \rightarrow l \pm 1)$ -переходов: $\lambda_{th} = 74.11, 80.62, 95.61, 100.07$ Å.

2. Согласно данным табл. 2, вероятность «заселения» $3p^2$ -состояния (P_{3p^2}) в атоме Ne в 42.2 раза превышает таковую для $3s3p$ -состояния (P_{3s3p}) и, таким образом,

$$P_{3p^2}/P_{3s3p} > \eta(\text{Ne}).$$

При этом длина волны излучаемого при радиационном $1s2p(3p^2 \rightarrow 3s3p)$ -переходе фотона $\lambda = 3628$ Å и заметно уменьшается по сравнению с таковой при радиационном $1s(3p \rightarrow 3s)$ -переходе. Можно предположить, что такая динамика сохранится и при переходе от атома Ne к неоноподобным ионам.

3. При изменении угла рассеяния изменяются (через функции Бесселя) вероятности «заселения» уровней. Так, например, для перехода $1s \rightarrow 3p$ в атоме Ne при $\omega_1 = 1325$ эВ имеем

$10^4 \sigma_{\perp} [r_0^2/\text{эВ} \cdot \text{ср.}] = 0.27$ ($\theta = 90^\circ$), 0.15 ($\theta = 45^\circ$). В результате интенсивность излучения I при переходе $3p \rightarrow 3s$ в конечных состояниях контактного рассеяния (\hat{r} — одноэлектронный оператор дипольного перехода),

$$I \approx AB \left(1 - \frac{1}{2}C\right), \quad (10)$$

$$A \approx |(3p_+|\hat{r}|3s_+)|^2, \quad B \approx R_{3p}^2, \quad C \approx R_{3s}^2,$$

на фиксированной длине волны излучаемого фотона оказывается зависящей от угла рассеяния (наблюдения). Аналитическая оценка (10) следует из теоремы о полной вероятности, примененной к совокупности контактных $1s \rightarrow 3p$, $1s \rightarrow 3s$ - и радиационного $3p \rightarrow 3s$ -переходов. Множитель $1/2$ перед величиной C обусловлен принципом запрета Паули. Заметим, что в схеме «заселения» $3p$ -состояния фотовозбуждением K -оболочки величина $C = 0$, а в величине B функция Бесселя j_1 заменяется на \hat{r} и интенсивность излучения при переходе $3p \rightarrow 3s$ не зависит от угла наблюдения.

Полученные в данной работе результаты, по-видимому, могут служить основанием для рассмотрения процесса резонансного неупругого контактного рассеяния рентгеновского фотона многозарядными неоноподобными атомными ионами (широко исследуемыми в настоящее время — от Si⁴⁺ до Ag³⁷⁺ — в качестве активной плазменной среды рентгеновских лазеров [11, 34]) как одного из возможных каналов резонансной фотонакачки для генерации на радиационных $3p \rightarrow 3s$ - и $3p^2 \rightarrow 3s3p$ -переходах в рентгеновском лазере. Напомним, что одна из предложенных в литературе схем накачки «плазменного» рентгеновского лазера фактически также основана на эффекте резонансного неупругого (в данном случае аномально-дисперсионного, а не контактного) рассеяния фотона атомом (ионом) — генерация $K\alpha$ -линии лазерного излучения при фотоионизации K -оболочки, например, атома Ne [35].

С теоретической точки зрения возможное экспериментальное подтверждение предсказываемых в данной работе результатов может свидетельствовать в пользу применимости аналитической структуры оператора контактного перехода в его нерелятивистской форме ($\sim \mathbf{A}^2$) и вне рамок дипольного и импульсного приближений в мягкой и жесткой рентгеновских областях энергий падающего и неупруго рассеянного фотонов.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулируем основные результаты данной работы.

На примере теоретического исследования абсолютных величин, структуры и формы полного дважды дифференциального сечения рассеяния рентгеновского фотона атомом Ne и многозарядными неоподобными ионами Ar^{8+} , Ti^{12+} , Fe^{16+} обнаружено, что вне энергетических областей рентгеновской эмиссии возникают ярко выраженные протяженные резонансные структуры сечения рассеяния, обусловленные практически лишь контактным типом неупругого рассеяния. Показано, что переход к дипольному приближению при теоретическом описании оператора контактного перехода с последующим игнорированием эффекта радиальной релаксации приводит к исчезновению обнаруженных структур. Установлено, что многочастичные эффекты радиальной релаксации остовных и возбужденных одноэлектронных состояний в поле глубокой $1s$ -вакансии и (на примере атома Ne) двойного возбуждения/ионизации основного состояния атома существенно влияют на абсолютные величины, структуру и форму дважды дифференциального сечения резонансного неупругого контактного рассеяния рентгеновского фотона исследованными элементами.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. P. Kane, Phys. Rep. **218**, 67 (1992).
2. T. Åberg and J. Tulkki, in *Atomic Inner-Shell Physics*, ed. by B. Crasemann, Plenum Press, N. Y.–London (1985), Ch. 10, p. 419.
3. M. A. Kornberg, A. L. Godunov, S. Itza-Ortiz et al., J. Synchrotron Rad. **9**, 298 (2002).
4. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, В. А. Явна, ЖЭТФ **128**, 698 (2005).
5. A. J. Freeman, Acta Crystallogr. **12**, 274 (1959).
6. P. Eisenberger and P. M. Platzmann, Phys. Rev. A **2**, 415 (1970).
7. R. H. Pratt, Radiat. Phys. Chem. **74**, 411 (2005).
8. J. Dunn, R.F. Smith, J. Nilsen et al., J. Opt. Soc. Amer. B **20**, 203 (2003).
9. D. Alessi, B. M. Luther, Y. Wang et al., Opt. Express **13**, 2093 (2005).
10. J. Nilsen, B. J. MacGowan, L. B. Da Silva, and J. C. Moreno, Phys. Rev. A **48**, 4682 (1993).
11. H. Daido, Rep. Prog. Phys. **65**, 1513 (2002).
12. N. Kawanaka, S. Mineshige, and K. Iwasawa, Astrophys. J. **635**, 167 (2005).
13. K. Moribayashi, T. Kagawa, and D. E. Kim, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **205**, 334 (2003).
14. G. S. Landsberg and L. I. Mandelstam, Z. Phys. **50**, 769 (1928).
15. C. V. Raman, Indian J. Phys. **2**, 387 (1928).
16. A. H. Compton, Phys. Rev. **21**, 483 (1923).
17. F. Gel'mukhanov and H. Ågren, Phys. Rep. **312**, 87 (1999).
18. A. Kotani and S. Shin, Rev. Mod. Phys. **73**, 203 (2001).
19. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1969).
20. Н. Марч, У. Янг, С. Сампантхар, *Проблема многих тел в квантовой механике*, Мир, Москва (1969).
21. P.-O. Löwdin, Phys. Rev. **97**, 1474 (1955).
22. J. L. Campbell and T. Papp, At. Data Nucl. Data Tables **77**, 1 (2001).
23. M. H. Chen, B. Crasemann, Kh. R. Karim, and H. Mark, Phys. Rev. A **24**, 1845 (1981).
24. А. Мессиа, *Квантовая механика*, т. 1, Наука, Москва (1978).
25. P. P. Kane, L. Kissel, R. H. Pratt, and S. C. Roy, Phys. Rep. **140**, 75 (1986).
26. S. C. Roy, L. Kissel, and R. H. Pratt, Radiat. Phys. Chem. **56**, 3 (1999).
27. А. Н. Хоперский, В. А. Явна, *Рассеяние фотона многоэлектронной системой*, Энергоатомиздат, Москва (2004).
28. A. N. Hoppersky, A. M. Nadolinsky, D. V. Dzuba, and V. A. Yavna, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **38**, 1507 (2005).
29. A. K. Das, M. Ehara, and H. Nakatsuji, European Phys. J. D **13**, 195 (2001).
30. E. B. Saloman and C. J. Sansonetti, J. Phys. Chem. Ref. Data **33**, 1113 (2004).
31. C. Jupen, U. Litzen, V. Kaufman, and J. Sugar, Phys. Rev. A **35**, 116 (1987).
32. A. Hibbert, M. Le Dourneuf, and M. Mohan, At. Data Nucl. Data Tables **53**, 23 (1993).
33. M. Cornille, J. Dubau, and S. Jacquemot, At. Data Nucl. Data Tables **58**, 1 (1994).
34. K. A. Janulewicz, A. Lucianetti, G. Priebe, and P. V. Nickles, X-Ray Spectrom. **33**, 262 (2004).
35. H. C. Kapteyn, Appl. Opt. **31**, 4931 (1992).