ЖЭТФ, 2007, том 132, вып. 3 (9), стр. 623–633

РЕЗОНАНСНОЕ РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ФОТОНА ТЯЖЕЛЫМ АТОМОМ

А. Н. Хоперский[*], *А. М. Надолинский*

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

Поступила в редакцию 27 декабря 2006 г.

Теоретически исследовано влияние многочастичных и релятивистских эффектов на абсолютные величины и форму дваждыдифференциального сечения резонансного рассеяния линейно поляризованного рентгеновского фотона свободным атомом ксенона в области порога ионизации K-оболочки. Продемонстрирована эволюция пространственно-протяженной структуры сечения рассеяния в $K_{\alpha,\beta}$-структуры рентгеновского спектра эмиссии атома ксенона. Расчеты выполнены в дипольном приближении для аномально-дисперсионной и в импульсном приближении для контактной частей полной амплитуды вероятности неупругого рассеяния. Вклад рэлеевской (упругой) компоненты процесса рассеяния учтен методами работы [48]. Рассмотрены эффекты радиальной релаксации электронных оболочек, спин-орбитального расщепления, двойного возбуждения/ионизации основного состояния атома, а также оже- и радиационного распадов образующихся остовных вакансий. На основе результатов работ [4] и [42] осуществлен переход от нерелятивистских хартри-фоковских к релятивистским дирак-хартри-фоковским волновым функциям одночастичных состояний рассеяния при построении амплитуды вероятности процесса. Результаты расчета носят предсказательный характер, а при энергии падающего фотона 34.42 кэВ находятся в хорошем согласии с результатами синхротронного эксперимента [10] по измерению абсолютных величин и формы дваждыдифференциального сечения резонансного рассеяния рентгеновского фотона свободным атомом ксенона.

PACS: 32.80.-t

1. ВВЕДЕНИЕ

Теоретические и экспериментальные исследования возбужденных фотонным ударом рентгеновских эмиссионных спектров свободных атомов позволяют получать фундаментальную информацию о природе, роли и квантовой интерференции многочастичных и релятивистских эффектов, сопровождающих процесс резонансного рассеяния фотона атомом.

В недавних работах авторов [1, 2] предложены нерелятивистская квантовая теория и методы расчета абсолютных величин и формы дваждыдифференциального сечения процесса резонансного 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 свободным легким (заряд ядра атома $Z \leq 20$) атомом в области порогов ионизации его глубоких оболочек с учетом широкой иерархии многочастичных эффектов.

В данной работе мы распространяем теорию и методы расчета этих работ на случай свободного тяжелого атома.

В качестве объекта исследования взята простая многоэлектронная система с термом $^1S_0$ основного состояния — атом ксенона с зарядом ядра $Z = 54$ и электронной конфигурацией основного состояния

$$[0] = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6.$$

Выбор объекта исследования обусловлен прежде всего тем, что

а) абсолютные величины и форма сечения поглощения рентгеновского фотона свободным атомом ксенона в области порога ионизации глубокой $1s$-оболочки, $I_{1s} = 34.565$ кэВ [3], интенсивно исследуются теоретически [4, 5] и экспериментально [6–8];

б) проведены первые экспериментальные и теоретические исследования абсолютных величин и фор-

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

мы как дифференциального сечения аномального упругого [9], так и дваждыдифференциального сечения резонансного неупругого [10] рассеяния на большие углы синхротронного линейно поляризованного рентгеновского излучения свободным атомом ксенона в области порога ионизации $1s$-оболочки.

На примере этого элемента мы впервые теоретически исследуем роль многочастичных эффектов радиальной релаксации электронных оболочек в хартри-фоковских полях образующихся остовных вакансий, спин-орбитального расщепления оболочек остова, двойного возбуждения/ионизации основного состояния атома, оже- и радиационного распадов остовных вакансий, а также релятивистских эффектов в определении абсолютных величин и формы дваждыдифференциального сечения резонансного рассеяния линейно поляризованного рентгеновского фотона в области порога ионизации $1s$-оболочки тяжелого атома.

Такие исследования важны при создании рентгеновского лазера на лабораторной плазме с генерацией на переходах с участием как валентных [11–13], так и глубоких [14] оболочек атома ксенона и его многозарядных положительных ионов, осуществлении лазерного термоядерного синтеза (генерация и контроль направляемого на термоядерную мишень $K_{\alpha,\beta}$-излучения тяжелого атома [15]), изучении рентгеновских эмиссионных спектров создаваемой в лабораторных условиях астрофизической плазмы [16], а также при теоретическом описании процессов резонансного неупругого (Ландсберга – Мандельштама – Рамана – Комптона [17–19]) рассеяния рентгеновского фотона такими многоэлектронными системами, как атомы, ионы, молекулы [20] и простые кластеры [21].

2. ТЕОРИЯ МЕТОДА

Установим аналитическую структуру дваждыдифференциального сечения изучаемого процесса во втором порядке квантовомеханической теории возмущений.

Учтем известную структуру нерелятивистского оператора взаимодействия электромагнитного поля с атомом в кулоновской калибровке для поля ($\operatorname{div}\mathbf{A} = 0$, $\varphi = 0$, $\mathbf{A}$ и φ — соответственно векторный и скалярный потенциалы электромагнитного поля):

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

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

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

2.1. Аномально-дисперсионная часть сечения

Вторая сумма в операторе $\hat{H}$ определяет аналитическую структуру аномально-дисперсионной части амплитуды вероятности резонансного неупругого рассеяния фотона атомом. В этом случае в представлении диаграмм Голдстоуна – Хаббарда – Фейнмана нерелятивистской квантовой теории многих тел [22] для амплитуды вероятности рассеяния в вершине взаимодействия электромагнитного поля с атомом сходятся три линии: линия фотона $\hbar\omega_1$ ($\hbar\omega_2$), линия вакансии и линия возбужденного электрона (вакансии).

Рассмотрим процесс резонансного неупругого рассеяния линейно поляризованного рентгеновского фотона в области K-порога ионизации атома ксенона вида (здесь и далее при записи конфигурации не указаны заполненные электронные оболочки):

$$\begin{gathered}\hbar\omega_1 + [0] \to 1s(n,\varepsilon)p(^1P_1) \to \\ \to kp^5(m,\varepsilon')p(^1S_0,{}^1D_2) + \hbar\omega_2, \\ k \le f, \quad n,m,\varepsilon,\varepsilon' > f,\end{gathered} \tag{1}$$

в случае схемы осуществленного в работе [10] синхротронного эксперимента $\mathbf{e}_{1,2} \perp P$. Здесь n, m — главные квантовые числа фотоэлектрона дискретного спектра, k — главное квантовое число электрона атомного остова, ε, ε' — энергии фотоэлектрона сплошного спектра, f — уровень Ферми (совокупность квантовых чисел валентной оболочки атома), $\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}_2$ — векторы поляризации падающего и рассеянного фотонов, P — плоскость рассеяния, проходящая через волновые векторы падающего ($\mathbf{k}_1$) и рассеянного ($\mathbf{k}_2$) фотонов.

Заметим, что последовательность радиационных переходов (1) с термом $^1P_1$ конечного состояния рассеяния запрещается теоремой Вигнера – Эккарта [23]. В самом деле, в амплитуде вероятности эмиссионного перехода

$$1s(n,\varepsilon)p(^1P_1) \to kp^5(m,\varepsilon')p(^1P_1) + \hbar\omega_2$$

возникает $3j$-коэффициент Вигнера

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0.$$

Мы не учитываем промежуточных состояний рассеяния $ks(n,\varepsilon)p$, $kp^5(n,\varepsilon)(s,d)$ и $kd^9(n,\varepsilon)(p,f)$, поскольку пороги ионизации оболочек атома ксенона с $nl \neq 1s$ сильно отделены от порога ионизации $1s$-оболочки. Например, $I_{1s} - I_{2s} = 29.113$ кэВ (разность теоретических релятивистских значений энергий порогов ионизации из работы [24]).

Тогда $(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2 = 1$ и известное общее аналитическое выражение для аномально-дисперсионной части дваждыдифференциального сечения резонансного неупругого рассеяния фотона атомом (формула Крамерса – Гейзенберга – Уоллера [25–29]) после суммирования (интегрирования) по одноэлектронным промежуточным состояниям $(n,\varepsilon)p$ и конечным состояниям $(m,\varepsilon')p$ рассеяния дискретного (сплошного) спектра и суммирования по термам $^1S_0$ и $^1D_2$ в атомной системе единиц ($e = \hbar = m_e = 1$) принимает вид

$$\frac{d^2\sigma_\perp}{d\omega_2 d\Omega} = r_0^2 \left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right) \alpha_{1s} \sum_{k\le f} \eta_k \sum_{i=1,2} \zeta_i (R_{ik} + C_{ik}), \quad (2)$$

где

$$R_{ik} = \sum_{n>f}^{\infty} A_n^2 L(\omega_1, I_n) G(\omega_{12}, I_{kn}^i), \quad (3)$$

$$C_{ik} = (1 + \omega_{12}/I_{1s})^2 L(\omega_2, I_{1s} - I_k^i) J_{ik}, \quad (4)$$

$$J_{ik} = \int_0^\infty A_\varepsilon^2 G(\varepsilon, \omega_{12} - I_k^i)\, d\varepsilon. \quad (5)$$

Сумма по переходам в состояния дискретного спектра в выражении (3) дает описание резонансного рассеяния Ландсберга – Мандельштама – Рамана фотона атомом. Выражение (4) описывает резонансное комптоновское (конечное состояние рассеяния — состояние сплошного спектра) рассеяние фотона атомом.

В выражениях (3) и (5)

$$A_{n,\varepsilon} = \langle 1s_0 | \hat{r} | (n,\varepsilon) p_c \rangle \quad (6)$$

— радиальная часть амплитуды вероятности радиационного перехода из начального в промежуточное состояние рассеяния ($\hat{r}$ — оператор дипольного перехода), описываемое корреляционной волновой функцией

$$|(n,\varepsilon)p_c\rangle = N_s \left(|(n,\varepsilon)p_+\rangle - \sum_{k\le f} |kp_+\rangle \frac{\langle kp_0 | (n,\varepsilon)p_+\rangle}{\langle kp_0 | kp_+\rangle} \right), \quad (7)$$

где

$$N_s = \langle 1s_0 | 1s_+ \rangle \prod_{m\le f} \langle ml_0 | ml_+ \rangle^{4l+2},$$

$$m \ge 2, \quad l = 0, 1, 2,$$

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

$$\langle kp_0 | (n,\varepsilon)p_+ \rangle = \int_0^\infty P_{kp_0}(r) P_{(n,\varepsilon)p_+}(r)\, dr,$$

а, например, $P_{np_+}(r)$ — радиальная часть волновой функции возбужденного np_+-электрона дискретного спектра.

Аналитическая структура корреляционной волновой функции (7) определена методами теории неортогональных орбиталей [30, 31] и выражена через нерелятивистские волновые функции одноэлектронных состояний, полученных в разных хартри-фоковских полях. При этом существенным является соблюдение требования ортогональности волновой функции состояния $1s \to (n,\varepsilon)p$ возбуждения/ионизации волновым функциям лежащих ниже по энергии состояний $ks \to (n,\varepsilon)p$ $(k \ge 2)$ возбуждения/ионизации той же симметрии. В данной работе указанное требование выполнено с использованием алгоритма ортогонализации Грама – Шмидта [32]. В результате в выражении (6) для амплитуды отсутствуют слагаемые вида

$$\langle 1s_0 | ks_+ \rangle \langle ks_0 | \hat{r} | (n,\varepsilon)p_+ \rangle / \langle ks_0 | ks_+ \rangle, \quad k \ge 2.$$

Теоретическое описание амплитуды вероятности перехода (6) в релятивистском приближении с математической точки зрения предполагает реализацию двух шагов. Во-первых, замену нерелятивистского оператора $\hat{H}$ взаимодействия электромагнитного поля с атомом на релятивистский оператор вида [33]

$$\hat{W} = -e \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{\gamma}_i \cdot \mathbf{A}_i, \quad \boldsymbol{\gamma}_i = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}_i \\ \boldsymbol{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix},$$

где $\boldsymbol{\gamma}_i$ — матрица Дирака четвертого порядка, $\boldsymbol{\sigma}_i$ — матрица Паули второго порядка. Во-вторых, использование спинорного представления для волновых функций одночастичных остовных и возбужденных состояний атома и, как результат, решение релятивистских нелинейных интегродифференциальных уравнений самосогласованного поля Дирака – Хартри – Фока для большой и малой компонент четырехспинора [34].

Такое исследование выполнено в работе [4], и его результаты для сечения поглощения фотона в области порога ионизации 1s-оболочки тяжелого атома будут нами учтены при расчете аномально-дисперсионной неупругой и упругой (рэлеевской) частей дваждыдифференциального сечения резонансного рассеяния рентгеновского фотона атомом ксенона. При этом сравнение результатов нерелятивистского и релятивистского расчетов с физической точки зрения показывает, что природа и роль в определении абсолютных величин и формы сечения рассеяния описанной ниже иерархии многочастичных эффектов практически не зависят от перехода к релятивистскому приближению.

Появление глубокой 1s-вакансии в атомном остове приводит к тому, что, прежде всего, внешние оболочки атомного остатка заметно уменьшают свой средний радиус. Смещение к ядру электронной плотности оболочек атомного остатка сопровождается дополнительной делокализацией волновой функции $(n,\varepsilon)p$-фотоэлектрона. Следствием такой делокализации является уменьшение (в случае атома ксенона практически в 1.5 раза) амплитуды вероятности поглощения фотона K-оболочкой атома. Описанный многочастичный эффект известен в литературе как эффект радиальной релаксации волновых функций одноэлектронных состояний при появлении глубокой вакансии [35, 36].

В исследуемой нами задаче эффект радиальной релаксации при расчете амплитуды $A_{n,\varepsilon}$ из выражения (6) учтен следующим образом. Радиальные части волновых функций l_+-электронов получены решением нерелятивистских нелинейных интегродифференциальных уравнений самосогласованного поля Хартри – Фока для конфигурации $1s(n,\varepsilon)p(^1P_1)$ промежуточного состояния рассеяния (в поле глубокой 1s-вакансии). Радиальные части волновых функций l_0-электронов получены решением уравнений Хартри – Фока для конфигурации начального состояния рассеяния [0].

Для радиальных интегралов перекрывания волновых функций возбужденных электронов промежуточного $(np_+, \varepsilon p_+)$ и конечного $(mp, \varepsilon' p)$ состояний рассеяния принято приближение

$$\begin{gathered} \langle np_+|mp\rangle \to \delta_{nm}, \quad \langle np_+|\varepsilon' p\rangle \to 0, \\ \langle \varepsilon p_+|mp\rangle \to 0, \end{gathered} \tag{8}$$

где δ_{nm} — символ Кронекера – Вейерштрасса.

Выход за рамки приближения (8) на примере исследования возбужденного фотонным ударом рентгеновского эмиссионного K_α-спектра свободного атома неона в области K- и KL_{23}-порогов ионизации был осуществлен в работе [1] и интерпретирован как учет многочастичного эффекта корреляционных амплитуд. Роль этого эффекта значительна вне областей образования резонансных структур спектра рассеяния. Таким образом, при расчете абсолютных величин и формы основных резонансных структур спектра рассеяния эффектом корреляционных амплитуд можно пренебречь.

Мы также приняли приближение

$$\langle \varepsilon p_+|\varepsilon' p\rangle \to \delta(\varepsilon - \varepsilon'),$$

где δ — обобщенная дельта-функция Дирака. Таким образом, мы не учитывали многочастичный эффект послестолкновительного взаимодействия [35, 36]. Таковым в данном случае назван эффект изменения радиальной части волновой функции фотоэлектрона сплошного спектра в результате радиационного распада $1s \to kp^5 + \hbar\omega_2$ глубокой 1s-вакансии.

В работах [37, 38] показано, что учет эффекта послестолкновительного взаимодействия (изменение радиальной части волновой функции фотоэлектрона в результате безрадиационного оже-распада $1s \to 2p^4\varepsilon d$ 1s-вакансии) в теоретических спектрах поглощения рентгеновского фотона глубокой 1s-оболочкой легкого ($Z \le 20$) атома практически не изменяет результатов одноэлектронного приближения. Можно предположить, что эффект послестолкновительного взаимодействия при радиационном распаде $1s \to kp^5 + \hbar\omega_2$ 1s-вакансии в атоме ксенона также практически не изменит результатов одноэлектронного приближения для амплитуды вероятности резонансного неупругого рассеяния. Однако для строгого утверждения необходимы дополнительные исследования.

В выражениях (2)–(5) определены спектральная функция Коши – Лоренца L и аппаратная (экспериментально фиксируемая функция распределения по энергии регистрируемого детектором рассеянного атомом рентгеновского излучения) спектральная функция Гаусса G:

$$L(x,y) = \frac{\gamma_{1s}}{\pi}\,\frac{1}{(x-y)^2 + \gamma_{1s}^2},$$

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

Также введены обозначения r_0 — классический радиус электрона, Ω — пространственный угол вылета рассеянного фотона, $\alpha_{1s} = \alpha\pi I_{1s}^4/\gamma_{1s}$, α — результирующий угловой коэффициент перехода (произведение угловых частей амплитуд вероятностей перехода из начального в промежуточное и из промежуточного в конечное состояние рассеяния), $\gamma_{1s} = \Gamma_{1s}/2$, Γ_{1s} — естественная ширина рентгеновского 1s-уровня, $\gamma_b = \Gamma_{beam}/2\sqrt{2\ln 2}$,

Γ_{beam} — ширина (на полувысоте) аппаратной гауссовой функции G, $\zeta_i = \{2, i = 1; 1, i = 2\}$, I_n — энергия возбуждения $1s \to np$, $I^i_{kn} = \{I_{kn}, i = 1; I_{kn} + \delta_k, i = 2\}$, I_{kn} — энергия монопольного возбуждения $kp \to np$, δ_k — константа спин-орбитального расщепления $kp_{1/2,3/2}$-оболочки остова, $I^i_k = \{I_k, i = 1; I_k + \delta_k, i = 2\}$, I_k — порог ионизации kp-оболочки, $\omega_{12} \equiv \omega_1 - \omega_2$.

Заметим, что в силу конечности своего времени жизни ($\tau_{1s} = \hbar\Gamma^{-1}_{1s}$), как метастабильного состояния, $1s$-вакансия не сохраняется в процессе рассеяния. Этот факт выражается аналитически появлением в соотношениях (3) и (4) спектральной функции $L(\omega_1 - I_{1s}, x)$ плотности возбужденных промежуточных состояний рассеяния коши-лоренцевского типа (x — энергия возбужденного из $1s$-оболочки атома одноэлектронного $(n,\varepsilon)p$-состояния).

Величина $\sqrt{\eta_k}$ в выражении (2) для сечения определена как радиальная часть амплитуды вероятности радиационного перехода из промежуточного в конечное состояние рассеяния:

$$\sqrt{\eta_k} = \langle 1s|\hat{r}|kp_c\rangle, \quad k \le f, \tag{9}$$

$$|kp_c\rangle = N_{skp}\left(|kp_+\rangle - \sum_{m\le k}|mp_+\rangle\frac{\langle mp|kp_+\rangle}{\langle mp|mp_+\rangle}\right),$$

$$N_{skp} = \langle 1s|1s_+\rangle\langle kp|kp_+\rangle^5\prod_{m\le f}\langle ml|ml_+\rangle^{4l+2},$$

$$m \ne k, \quad l = 0,1,2.$$

Здесь радиальные части волновых функций l-электронов получены решением усредненных по термам $^1S_0$ и $^1D_2$ уравнений Хартри – Фока для конфигурации конечного состояния $kp^5(m,\varepsilon')p$ рассеяния (в поле kp-вакансии).

Амплитуды $A_{n,\varepsilon}$ из выражения (6) и $\sqrt{\eta_k}$ из соотношений (9) определены нами в дипольном приближении для фурье-компонент оператора $\mathbf{A}_i$ электромагнитного поля во второй сумме оператора $\hat{H}$, т. е. $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j \to 0$. Таким образом,

$$\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j) \to 1, \tag{10}$$

где $\mathbf{k}$ — волновой вектор падающего (рассеянного) фотона и $\mathbf{r}_j$ — радиус-вектор j-го электрона атома.

Как известно [29], дипольное приближение (10) эквивалентно выполнению неравенства $\lambda \gg r_{nl}$, где λ — длина волны падающего (рассеянного) фотона и r_{nl} — средний радиус nl-оболочки атома, определяющий радиальный интеграл радиационного перехода (в нашем случае $nl = 1s$). Для рентгеновских областей энергий, исследуемых в данной работе, это неравенство выполняется. В самом деле, для энергий ω_1 падающего фотона от 33 до 36 кэВ (λ от 0.376 до 0.345 Å) и энергий ω_2 рассеянного фотона от 26 до 36 кэВ (λ от 0.477 до 0.345 Å) имеем $\lambda \gg r_{1s}(\mathrm{Xe}) = 0.015$ Å.

При расчете радиальных интегралов радиационного перехода в выражениях (6) для амплитуд $A_{n,\varepsilon}$ и (9) для $\sqrt{\eta_k}$ оператор дипольного перехода $\hat{r}$ представлен в «форме длины» ($\hat{r} = r$) [35]. Наше исследование показало, что использование оператора дипольного перехода $l \to l \pm 1$ в «форме скорости» ($\hat{v} \equiv d/dr \pm (l+1)/r$) при расчете интегралов с участием глубокой $1s$-оболочки для атомов с зарядом ядра $Z \ge 10$ изменяет значения таких амплитуд не более чем на 1 %. Таким образом, многочастичный эффект корреляций приближения случайных фаз с обменом [35] (в случае атома ксенона электростатическое смешивание конфигурации $1s(n,\varepsilon)p$ с конфигурациями $ks\varepsilon p$, $kp^5\varepsilon(d,s)$ $(k \ge 2)$, $kd^9\varepsilon(p,f)$ $(k = 3,4)$ виртуальной ионизации включает межоболочечные корреляции) оказывается незначительным и в данной работе не учитывается.

2.2. Контактная часть сечения

Первая сумма в операторе $\hat{H}$ определяет аналитическую структуру амплитуды вероятности так называемого контактного [21, 29] рассеяния фотона атомом. В этом случае в представлении диаграмм Голдстоуна – Хаббарда – Фейнмана для амплитуды рассеяния в вершине взаимодействия электромагнитного поля с атомом сходятся четыре линии: две линии фотонов (ω_1, ω_2), линия вакансии и линия возбужденного электрона.

В данной работе мы не учитывали исчезающе малого (по сравнению с вкладом контактного комптоновского рассеяния) вклада контактного (переходы в возбужденные состояния дискретного спектра) рассеяния Ландсберга – Мандельштама – Рамана фотона атомом ксенона.

Расчет дваждыдифференциального сечения контактного комптоновского рассеяния рентгеновского фотона атомом ксенона проведен нами в рамках широко используемого в опубликованной литературе импульсного приближения [39–41].

С целью учета, по крайней мере приближенного, релятивистских эффектов при контактном неупругом рассеянии фотона тяжелым атомом в данной работе мы приняли вариант импульсного приближения, реализованный в работе [42]. В этом варианте дваждыдифференциальное сечение рассеяния строится на первой сумме в нерелятивистском операторе $\hat{H}$, но (в отличие от метода предыдущих работ [1, 2]) с использованием релятивистских дирак-хартри-фоковских волновых функций одночастичных состояний рассеяния и в атомной системе единиц в случае схемы осуществленного в работе [10] эксперимента принимает вид

$$\frac{d^2\sigma_\perp}{d\omega_2 d\Omega} = r_0^2 \left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right) \frac{1}{q} J(Q), \tag{11}$$

где

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

$$\beta = \frac{\omega_2}{\omega_1}, \quad Q = \frac{1}{q}(\omega_1 - \omega_2) - \frac{1}{2}q,$$

θ — угол рассеяния (угол между волновыми векторами $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$), $J(Q)$ — функция комптоновского профиля исследуемого атома (функция распределения волновых векторов электронов в атоме), рассчитанная и табулированная в работе [42].

В силу самой формулировки импульсного приближения, реализованной в работе [42], эффекты радиальной релаксации атомного остатка при появлении комптоновского электрона не учитываются — функция $J(Q)$ строится на волновых функциях электронов основного состояния атома, а волновая функция электрона сплошного спектра берется в виде плоской волны без учета ее делокализации в хартри-фоковских полях остовных вакансий $nl \le f$.

Для сравнения результатов расчета с экспериментом [10] сечение (11) умножено на модулирующую функцию

$$\Psi(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\,\mathrm{arctg}\left(\frac{\omega_{12} - I_{5p}(O_3)}{\gamma_b}\right),$$

где $I_{5p}(O_3)$ — порог ионизации валентной оболочки $5p_{3/2}$ атома ксенона.

С методологической точки зрения заметим следующее. Согласно основополагающей работе [39], критерием применимости импульсного приближения при теоретическом описании вероятности контактного комптоновского рассеяния фотона атомом является выполнение неравенства

$$\rho \equiv q a_0 / Z \gg 1, \tag{12}$$

где a_0 — радиус Бора. Однако в исследуемом нами случае атома ксенона при угле рассеяния $\theta = 90°$ и энергиях (в максимуме комптоновского профиля) падающего $\omega_1 = 34.42$ кэВ и рассеянного $\omega_2 = 32.25$ кэВ фотонов вместо неравенства (12) получаем, что $\rho \approx 0.23$. Тем не менее расчет сечения (11) хорошо воспроизводит абсолютные величины и форму экспериментального сечения [10] в области энергий контактного комптоновского рассеяния (см. ниже рис. 3).

Причину этого явления мы здесь не анализируем. Отметим лишь, что аналогичное явление обнаружено в недавних экспериментальных работах [43] ($\rho \approx 0.74$; контактное комптоновское рассеяние рентгеновского фотона энергии $\omega_1 = 60$ кэВ на угол $\theta = 90°$ атомом меди), [44] ($\rho \approx 0.78$; $\omega_1 = 59.54$ кэВ, $\theta = 170°$, атом германия), [45] ($\rho \approx 0.82$; $\omega_1 = 22$ кэВ, $\theta = 90°$, атом неона) и [46] ($\rho \approx 1.27$; $\omega_1 = 86.54$ кэВ, $\theta = 180°$, атом германия).

2.3. Рэлеевская (упругая) часть сечения

При $\omega_2 = \omega_1$ в дваждыдифференциальном сечении резонансного рассеяния возникает пространственно-протяженная структура, соответствующая упругому рассеянию рентгеновского фотона электронами (рэлеевское рассеяние [47]) атома ксенона [48]. В этом случае сечение рассеяния в схеме осуществленного в работе [10] эксперимента в атомной системе единиц принимает вид

$$\frac{d^2\sigma_\perp}{d\omega_2 d\Omega} = G(\omega_1, \omega_2)\frac{d\sigma_\perp}{d\Omega}, \tag{13}$$

$$\frac{d\sigma_\perp}{d\Omega} = r_0^2 \left| F + \sum_{nl \le f} M_{nl} \right|^2, \tag{14}$$

где

$$F = \sum_{nl \le f} (4l+2) \int_0^\infty P_{nl}^2(r) \frac{\sin(kr)}{kr}\, dr, \tag{15}$$

$$k = |\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2| = \frac{2\omega}{c}\sin\frac{\theta}{2}, \quad \omega = \omega_1 = \omega_2,$$

F — нерелятивистский формфактор (структурная функция) атома с термом ${}^1S_0$ основного состояния, M_{nl} — аномально-дисперсионные слагаемые Крамерса–Гейзенберга–Уоллера амплитуды вероятности рассеяния в случае рэлеевского рассеяния фотона атомом.

Абсолютные величины и форма дифференциального сечения (14) аномального упругого рассеяния линейно поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния) рентгеновского фотона атомом ксенона на угол $\theta = 90°$ в области K- и KO_{23}-порогов ионизации в нерелятивистском приближении с учетом эффектов радиальной релаксации и основных [7, 49–52] каналов $1s5p \to n(\varepsilon)p\varepsilon' p$ ($n = 6, 7$) двойного возбуждения/ионизации основного состояния атома детально исследованы в работе [48].

В данной статье с целью полноты изложения результатов развиваемой многочастичной квантовой теории резонансного рассеяния рентгеновского фотона свободным тяжелым атомом и интерпретации результатов синхротронного эксперимента [10] в области $\omega_2 = 34$–35 кэВ при $\omega_1 = 34.42$ кэВ мы повторили расчет дифференциального сечения (14) работы [48], но с учетом релятивистских поправок [4] к абсолютным величинам и форме амплитуд вероятности фотопоглощения в структуре аномально-дисперсионных амплитуд M_{nl} вероятности упругого рассеяния (см. ниже рис. 2). При этом аналитическая структура формфактора атома ксенона оставлена нами в нерелятивистской форме (15).

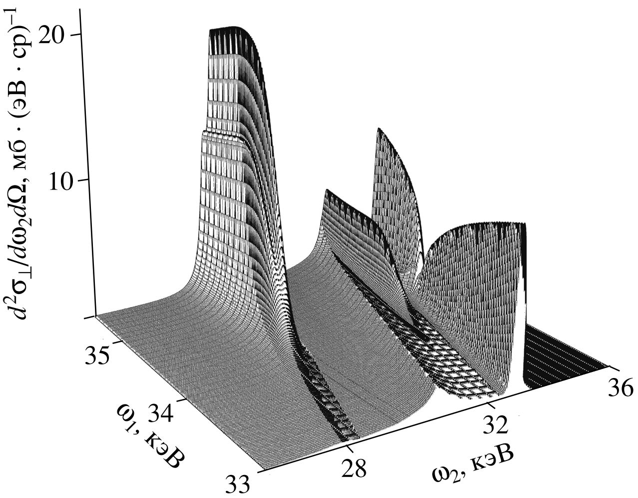

Рис. 1. Дваждыдифференциальное сечение резонансного рассеяния линейно поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния) рентгеновского фотона свободным атомом ксенона в области порога ионизации K-оболочки (34565.13 эВ [3]); $\omega_1(\omega_2)$ — энергия падающего (рассеянного) фотона, Ω — пространственный угол вылета рассеянного фотона. Угол рассеяния $\theta = 90°$. Ширина аппаратной функции (детектора) $\Gamma_{beam} = 320$ эВ [10], для комптоновских структур сечения наблюдаемая ширина K-уровня $\Gamma_{1s} = \Gamma_{beam}$, для рэлеевской структуры сечения естественная ширина рентгеновского K-уровня $\Gamma_{1s} = 11.49$ эВ [53]. Константы спин-орбитального расщепления $kp_{1/2,3/2}$-оболочек равны $\delta_2 = 320.53$ эВ [3], $\delta_3 = 61.03$ эВ [3], $\delta_4 = 12.38$ эВ [59], $\delta_5 = 1.30$ эВ [60]

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ОБСУЖДЕНИЕ

В качестве объекта исследования взят свободный атом ксенона. Результаты расчета дваждыдифференциальных сечений рассеяния (2), (11) и (13) в рентгеновских областях энергий падающего $\omega_1 = 33$–45 кэВ и рассеянного $\omega_2 = 26$–45 кэВ фотонов представлены на рис. 1–3.

Для полной ширины распада $1s$-вакансии принято значение $\Gamma_{1s} = 11.49$ эВ (теоретическое значение из работы [53]). Значения полных ширин распадов остовных вакансий при $nl \neq 1s$ взяты из работ [54] ($2s; 2p, L_2; 3p; 3d; 4s; 4d$), [55] ($2p, L_3; 3s$), [56] ($4p$), [57] ($5s$) и [58] ($5p$).

Для ширины аппаратной гауссовой функции G принято значение $\Gamma_{beam} = 320$ эВ (инструментальное разрешение германиевого детектора работы [10]). Для констант δ_{nl} спин-орбитального расщепления $np_{1/2,3/2}$-оболочек остова приняты значения $\delta_{2p} = 320.53$ эВ; $\delta_{3p} = 61.03$ эВ (экспериментальные значения [3]), $\delta_{4p} = 12.38$ эВ (теоретическое значение [59]) и $\delta_{5p} = 1.30$ эВ (экспериментальное значение [60]).

Для энергий порогов ионизации I_{nl} остовных nl-оболочек приняты экспериментальные значения $I_{nl} = 34565.13$ ($1s$), 5452.57 ($2s$), 5106.72 ($2p, L_2$), 4782.16 ($2p, L_3$) эВ [3], $I_{nl} = 1148.7$ ($3s$), 1002.1 ($3p, M_2$), 940.6 ($3p, M_3$), 689.35 ($3d, M_4$), 676.70 ($3d, M_5$) эВ [61], $I_{nl} = 213.3$ ($4s$), 23.40 ($5s$), 13.43 ($5p, O_2$), 12.13 ($5p, O_3$) эВ [60], $I_{4p}(N_3) = 145.5$ эВ [62], а также значения $I_{4d} = 67.5$ (N_5), 69.5 (N_4) эВ, полученные нами из экспериментального спектра выхода фотоионов Xe^{2+} в области порога ионизации $4d$-оболочки атома ксенона [63], и $I_{4p}(N_2) = 157.88$ эВ. Последнее значение получено по данным работ [59, 62] как $I_{4p}(N_2) = I_{4p}(N_3) + \delta_{4p}$.

На рис. 1 представлена рассчитанная пространственно-протяженная структура дваждыдифференциального сечения резонансного рассеяния линейно поляризованного рентгеновского фотона атомом ксенона в области порога ионизации $1s$-оболочки как сумма резонансного комптоновского (2), контактного комптоновского (11) и рэлеевского (13) сечений.

В качестве одноэлектронных промежуточных np-состояний и конечных mp-состояний рассеяния дискретного спектра в структуре сечений (2) и (13) учтены состояния с $n, m = 6, 7$. При полной ширине распада $1s$-вакансии $\Gamma_{1s} = 11.49$ эВ интенсивность резонанса фотовозбуждения $1s \to 6p$ практически на порядок меньше интенсивности пороговой ($\varepsilon \to 0$) ионизации $1s \to \varepsilon p$. Этот факт объясняет тот результат расчета, что в структуре сечения на рис. 1 резонансы рассеяния Ландсбер-

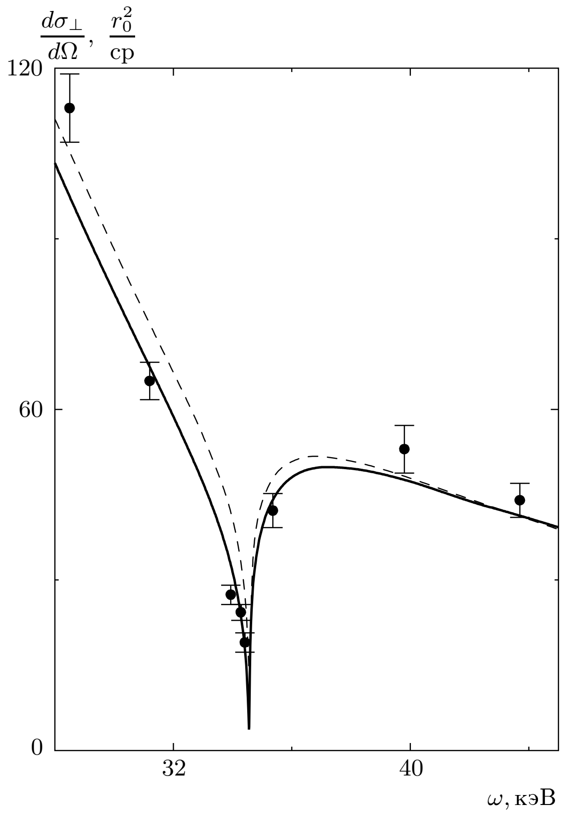

Рис. 2. Дифференциальное сечение аномального упругого рассеяния линейно поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния) рентгеновского фотона свободным атомом ксенона в областях порогов ионизации оболочек K (34565.13 эВ [3]) и KO_{23} (34587.03 эВ; расчет данной работы): кружки — синхротронный эксперимент [9]; кривые — теоретический расчет данной работы с учетом релаксационных и релятивистских эффектов, а также процессов $1s5p \to n(\varepsilon)p\varepsilon' p$ двойного возбуждения/ионизации основного состояния атома ксенона (сплошная кривая) и без учета последних процессов (штриховая кривая). Угол рассеяния $\theta = 90°$; ω — энергия рассеиваемого фотона; Ω — пространственный угол вылета рассеянного фотона; $\Gamma_{1s} = 11.49$ эВ [53]

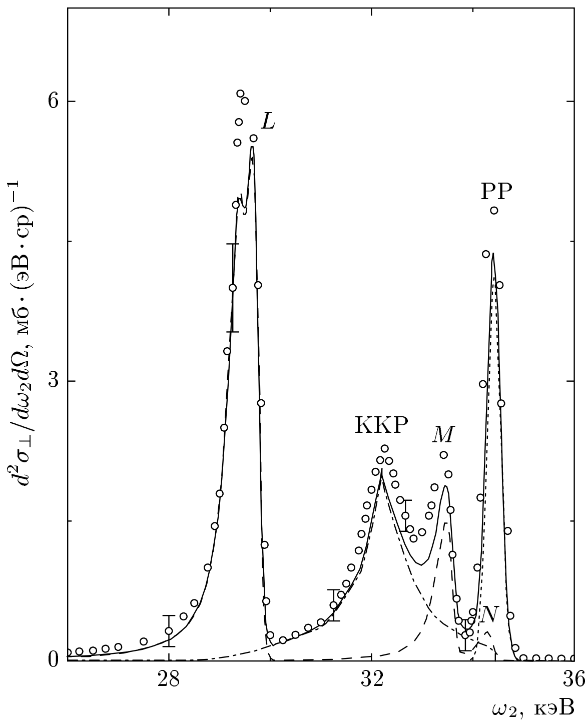

Рис. 3. То же, что на рис. 1, при энергии падающего фотона $\omega_1 = 34420$ эВ: кружки — синхротронный эксперимент [10], кривые — теоретический расчет данной работы: штриховая кривая — вклад резонансного комптоновского рассеяния (L: $1s \to 2p$; M: $1s \to 3p$; N: $1s \to 4p$); штрих-пунктирная — вклад контактного комптоновского рассеяния (ККР); пунктирная — вклад рэлеевского рассеяния (РР); сплошная — суммарное дваждыдифференциальное сечение резонансного рассеяния

га – Мандельштама – Рамана практически отсутствуют.

Проблема учета полноты набора (условия замкнутости) [64] состояний дискретного спектра (n, m от 6 до ∞) в данной статье не исследовалась. Пример аналитического решения этой проблемы в случае резонансного неупругого рассеяния рентгеновского фотона в области порогов ионизации глубокой $1s$-оболочки легкого атома неона и неоноподобных ионов Si^{4+} и Ar^{8+} дан в недавней работе авторов [65].

Каналы сплошного спектра конечных состояний $kp^5\varepsilon_i p$ рассеяния согласно условию резонанса комптоновской компоненты сечения C_{ik} из выражения (4) открываются при $\omega_1 = I_{1s}$ и $\omega_2 = I_{1s} - I_k^i = 29458.41$ ($k = 2; L_2$); 29778.94 ($k = 2; L_3$); 33563.03 ($k = 3; M_2$); 33624.06 ($k = 3; M_3$); 34407.25 ($k = 4; N_2$); 34419.63 ($k = 4; N_3$); 34551.70 ($k = 5; O_2$); 34553.00 ($k = 5; O_3$) эВ. При энергии падающего фотона $\omega_1 > I_{1s}$ сечение (2) резонансного комптоновского рассеяния обретает пространственно-протяженную форму возбужденных фотонным ударом рентгеновских эмиссионных спектров $K_{\alpha_{1,2}}(k = 2)$, $K_{\beta_{1,3}}(k = 3)$ и $K_{\beta_2^{\mathrm{I,II}}}(k = 4)$ атома ксенона [3, 24]. Эмиссионные линии радиационного перехода

$1s \to 5p^5_{1/2,3/2} + \omega_2$ наблюдались, но не имеют специального обозначения [60].

Учет эффекта радиальной релаксации электронных оболочек промежуточных состояний рассеяния в поле глубокой $1s$-вакансии приводит практически к двукратному уменьшению абсолютных значений сечения (2) по сравнению со значениями, рассчитанными без учета этого эффекта. Результат расчета сечения (2) без учета эффекта радиальной релаксации топологически воспроизводит результат, полученный с учетом этого эффекта, и на рис. 1 не приведен во избежание его загромождения.

В работе [4] получено, что учет релятивистских эффектов при теоретическом описании амплитуды вероятности радиационного перехода $1s \to (n,\varepsilon)p$ приводит к уменьшению примерно на 12 % сечения фотопоглощения $1s$-оболочкой атома ксенона, рассчитанного в нерелятивистском приближении с учетом эффекта радиальной релаксации. Этот результат работы [4] в данной статье в исследуемых областях энергий ω_1 и ω_2 мы учли умножением на 0.88 абсолютных величин дваждыдифференциальных сечений резонансного комптоновского (2) и рэлеевского (13) рассеяния (рис. 1–3).

Расходящиеся под углом 45° на плоскости $\omega_1\omega_2$ от порогов возникновения эмиссионных $K_{\alpha_{1,2}}$-, $K_{\beta_{1,3}}$- и $K_{\beta_2^{\mathrm{I,II}}}$-структур сечения рассеяния «ребристые» структуры (две последние не видны на рис. 1, так как накрыты соответственно контактной комптоновской и рэлеевской структурами сечения) обусловлены наличием в выражениях (4) для комптоновской компоненты сечения C_{ik} спектральных гауссовых функций $G(\varepsilon, \omega_{12} - I_k^i)$ (показатель экспоненты обращается в нуль на прямых $\omega_1 = \omega_2 + \varepsilon + I_k^i$) и минимального ($\varepsilon_i \to 0$) значения энергии электрона сплошного спектра (амплитуда вероятности A_ε радиационного перехода из выражения (6) максимальна на прямых $\omega_1 = \omega_2 + I_k^i$).

Ярко выраженная ребристая структура на прямой $\omega_1 = \omega_2 + 2.22$ [кэВ] (в максимуме функции комптоновского профиля $J(Q)$) соответствует вкладу сечения (11) в результирующее сечение резонансного рассеяния фотона атомом ксенона. При этом основной вклад (около 70 %) в максимум функции $J(Q)$ дает эффект контактного рассеяния фотона $5p$-валентной (около 37 %) и $5s$-, $4d$-субвалентными (около 33 %) оболочками.

Обратим внимание на заметную асимметрию пространственно-протяженной формы сечения (11) (см. также рис. 3): в силу закона сохранения энергии при неупругом рассеянии фотона атомом сечение (11) резко обрывается при максимально возможной энергии рассеянного фотона $\omega_2 = \omega_1 - I_{5p}(O_3)$.

Пространственно-протяженная структура сечения рассеяния на рис. 1 на прямой $\omega_1 = \omega_2$ соответствует вкладу эффекта рэлеевского рассеяния рентгеновского фотона атомом ксенона в области порога ионизации K-оболочки.

Результаты расчета дифференциального сечения (14) аномального упругого рассеяния, а также синхротронного эксперимента работы [9] представлены на рис. 2. Видим, что учет процессов двойного возбуждения/ионизации $1s5p \to n(\varepsilon)p\varepsilon' p$ основного состояния атома ксенона приводит к заметному перераспределению интенсивности упругого рассеяния, рассчитанной с учетом лишь релятивистских и релаксационных эффектов, из области порога ионизации K-оболочки в длинно- и коротковолновую области сечения рассеяния.

Так, в интересующей нас области энергий падающего фотона ω_1 = 33–36 кэВ эффекты двойного возбуждения/ионизации на 10–25 % уменьшают абсолютные величины сечения аномального упругого рассеяния, рассчитанного без их учета. В результате достигается хорошее согласие с синхротронными экспериментами [9, 10] по измерению абсолютных величин и форм рэлеевской компоненты сечения резонансного рассеяния рентгеновского фотона атомом ксенона в области порога ионизации K-оболочки (рис. 2, 3).

Сравнение результатов нашего расчета с результатами синхротронного эксперимента работы [10] дано на рис. 3. Поскольку в эксперименте [10] измерены абсолютные значения и форма дваждыдифференциального сечения резонансного рассеяния рентгеновского фотона атомом ксенона, результаты нашего расчета непосредственно нанесены на экспериментальное сечение без какой-либо привязки к спектру. Видно хорошее согласие теории данной работы с экспериментом. Причина остающихся и систематических по всему спектру рассеяния 10–15-процентных расхождений нами не установлена.

Теория данной работы позволяет дать следующую интерпретацию результатам эксперимента [10].

В областях энергий рассеянного фотона ω_2 = = 26–30, 32–34, 33–35 кэВ эксперимент обнаруживает эффект резонансного комптоновского рассеяния фотона атомом ксенона, обусловленный эмиссионными переходами $1s \to kp^5 + \omega_2$ соответственно с $k = 2, 3, 4$ (переход для $k = 5$ практически не проявляется). При этом устанавливается следующее отношение максимальных значений интенсивности переходов:

$$(1s \to 2p) : (1s \to 3p) : (1s \to 4p) \approx 19 : 5 : 1.$$

В области энергий $\omega_2 = 28$–34.4 кэВ в эксперименте проявляется ярко выраженный эффект контактного комптоновского рассеяния фотона атомом ксенона. Таким образом, уже в рентгеновском диапазоне энергий рассеиваемого тяжелым атомом фотона эксперимент показывает, что в процессе рассеяния обнаруживается наличие вакуума квантовой электродинамики. В самом деле, как показано Ахиезером и Берестецким [33], амплитуда вероятности контактного рассеяния, построенная на операторе $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$, является нерелятивистским пределом релятивистской амплитуды рассеяния через промежуточные одноэлектронные состояния с отрицательными частотами («море Дирака»). Указанный эффект оказывается достаточно значительным и составляет примерно 38 % от интенсивности основного резонанса $1s \to 2p$ дваждыдифференциального сечения рассеяния.

В области энергий $\omega_2 = 34$–35 кэВ в эксперименте появляется рэлеевская компонента процесса резонансного рассеяния рентгеновского фотона атомом ксенона. Ее интенсивность составляет около 75 % от интенсивности основного резонанса $1s \to 2p$ спектра рассеяния.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулируем основные результаты данной работы.

Впервые проведено теоретическое исследование роли многочастичных и релятивистских эффектов в определении абсолютных величин и формы дваждыдифференциального сечения резонансного рассеяния рентгеновского фотона в области порога ионизации глубокой $1s$-оболочки тяжелого атома. В качестве объекта исследования был взят атом ксенона.

В результате исследования установлено следующее.

Эффект радиальной релаксации электронных оболочек промежуточных состояний рассеяния в хартри-фоковском поле глубокой $1s$-вакансии практически в два раза уменьшает абсолютные значения (не изменяя при этом топологии поверхности) резонансной комптоновской и упругой (рэлеевской) компонент пространственно-протяженной структуры полного дваждыдифференциального сечения резонансного рассеяния рентгеновского фотона в области порога ионизации K-оболочки атома ксенона, рассчитанные без его учета. Последующий учет релятивистских эффектов дополнительно уменьшает интенсивность этих компонент примерно на 12 %. При этом компоненты резонансного рассеяния Ландсберга–Мандельштама–Рамана в сечении рассеяния практически не проявляются.

Процессы двойного возбуждения/ионизации основного состояния атома существенно определяют абсолютные величины и пространственно-протяженную структуру упругой (рэлеевской) компоненты сечения рассеяния рентгеновского фотона атомом ксенона в области порога ионизации $1s$-оболочки.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, В. А. Явна, ЖЭТФ **128**, 698 (2005).
2. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, В. А. Явна, ЖЭТФ **130**, 579 (2006).
3. R. D. Deslattes, E. G. Kessler (Jr.), P. Indelicato et al., Rev. Mod. Phys. **75**, 35 (2003).
4. J. Tulkki, Phys. Rev. A **32**, 3153 (1985).
5. В. А. Явна, А. Н. Хоперский, В. Ф. Демехин, Опт. и спектр. **68**, 231 (1990).
6. M. Deutsch, G. Brill, and P. Kizler, Phys. Rev. A **43**, 2591 (1991).
7. M. Deutsch and P. Kizler, Phys. Rev. A **45**, 2112 (1992).
8. J. Padežnik Gomilšek, A. Kodre, I. Arčon, and M. Hribar, Phys. Rev. A **68**, 042505 (2003).
9. F. Smend, D. Schaupp, H. Czerwinski et al., Phys. Rev. A **36**, 5189 (1987).
10. H. Czerwinski, F. Smend, D. Schaupp et al., Z. Phys. A **322**, 183 (1985).
11. H. Fiedorowicz, A. Bartnik, Y. Li et al., Phys. Rev. Lett. **76**, 415 (1996).
12. D. Ros, H. Fiedorowicz, B. Rus et al., Opt. Comm. **153**, 368 (1998).
13. A. Butler, A. J. Gonsalves, C. M. McKenna et al., Phys. Rev. A **70**, 023821 (2004).
14. D. Kim, C. Toth, and C. P. J. Barty, Phys. Rev. A **59**, R4129 (1999).
15. J. Lindl, Phys. Plasmas **2**, 3933 (1995).
16. B. A. Remington, R. P. Drake, and D. D. Ryutov, Rev. Mod. Phys. **78**, 755 (2006).
17. G. S. Landsberg and L. I. Mandelstam, Z. Phys. **50**, 769 (1928).

18. C. V. Raman, Indian J. Phys. **2**, 387 (1928).

19. A. H. Compton, Phys. Rev. **21**, 483 (1923).

20. F. Gel'mukhanov and H. Ågren, Phys. Rep. **312**, 87 (1999).

21. A. Kotani and S. Shin, Rev. Mod. Phys. **73**, 203 (2001).

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

23. А. П. Юцис, А. Ю. Савукинас, *Математические основы теории атома*, Минтис, Вильнюс (1973).

24. T. Mooney, E. Lindroth, P. Indelicato et al., Phys. Rev. A **45**, 1531 (1992).

25. H. A. Kramers and W. Heisenberg, Z. Phys. **31**, 681 (1925).

26. I. Waller, Z. Phys. **51**, 213 (1928).

27. I. Waller, Z. Phys. **58**, 75 (1929).

28. T. Åberg and J. Tulkki, in *Atomic Inner-Shell Physics*, ed. by B. Crasemann, Plenum Press, New York–London (1985), Ch. 10.

29. P. P. Kane, Phys. Rep. **218**, 67 (1992).

30. P.-O. Löwdin, Phys. Rev. **97**, 1474 (1955).

31. A. P. Jucys, E. P. Našlĕnas, and P. S. Žvirblis, Int. J. Quant. Chem. **6**, 465 (1972).

32. А. Н. Колмогоров, С. В. Фомин, *Элементы теории функций и функционального анализа*, Наука, Москва (1976).

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

34. F. A. Parpia, Ch. Froese-Fischer, and I. P. Grant, Comput. Phys. Comm. **94**, 249 (1996).

35. М. Я. Амусья, *Атомный фотоэффект*, Наука, Москва (1987).

36. V. Schmidt, Rep. Progr. Phys. **55**, 1483 (1992).

37. A. N. Hopersky, Radiat. Phys. Chem. **64**, 169 (2002).

38. A. N. Hopersky and V. V. Chuvenkov, J. Phys. B **36**, 2987 (2003).

39. P. Eisenberger and P. M. Platzman, Phys. Rev. A **2**, 415 (1970).

40. M. J. Cooper, Rep. Progr. Phys. **48**, 415 (1985).

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

42. F. Biggs, L. B. Mendelsohn, and J. B. Mann, At. Data Nucl. Data Tables **16**, 201 (1975).

43. J. Laukkanen, K. Hämäläinen, and S. Manninen, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 2153 (1996).

44. S. Pašic and K. Ilakovac, Phys. Rev. A **55**, 4248 (1997).

45. M. Jung, R. W. Dunford, D. S. Gemmell et al., Phys. Rev. Lett. **81**, 1596 (1998).

46. S. Pašic and K. Ilakovac, Phys. Rev. A **61**, 032722 (2000).

47. P. P. Kane, L. Kissel, R. H. Pratt, and S. C. Roy, Phys. Rep. **140**, 75 (1986).

48. A. N. Hopersky, V. A. Yavna, and V. A. Popov, J. Phys. B **30**, 5131 (1997).

49. K. Zhang, E. A. Stern, J. J. Rehr, and F. Ellis, Phys. Rev. B **44**, 2030 (1991).

50. Ch. Dezarnaud, F. Guillot, and M. Tronc, J. Phys. B **25**, L123 (1992).

51. I. Arčon, A. Kodre, M. Štuhec et al., Phys. Rev. A **51**, 147 (1995).

52. Y. Ito, A. M. Vlaicu, T. Tochio et al., Phys. Rev. A **57**, 873 (1998).

53. M. H. Chen, B. Crasemann, and H. Mark, Phys. Rev. A **21**, 436 (1980).

54. J. L. Campbell and T. Papp, At. Data Nucl. Data Tables **77**, 1 (2001).

55. O. Mauron, J.-Cl. Dousse, S. Baechler et al., Phys. Rev. A **67**, 032506 (2003).

56. S. T. Perkins, D. E. Cullen, M. H. Chen et al., Lawrence Livermore National Laboratory, Research Report No. UCRL-50400, Vol. 30 (1991).

57. S. Lauer, H. Liebel, F. Vollweiler et al., J. Phys. B **32**, 2015 (1999).

58. M. Walhout, A. Witte, and S. L. Rolston, Phys. Rev. Lett. **72**, 2843 (1994).

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

60. Р. Каразия, *Введение в теорию рентгеновских и электронных спектров свободных атомов*, Мокслас, Вильнюс (1987).

61. N. Saito and I. H. Suzuki, J. Phys. B **25**, 1785 (1992).

62. T. Hayaishi, Y. Morioka, T. Akahori et al., Z. Phys. D **4**, 25 (1986).

63. T. Hayaishi, A. Yagishita, E. Shigemasa et al., J. Phys. B **23**, 4431 (1990).

64. А. Мессиа, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1978).

65. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, В. А. Явна, А. С. Каспржицкий, Опт. и спектр. **101**, 885 (2006).