

NERESONANTNO SIPANJE RENTGENSKE SVETLOBE

1

(KVAZI) ELASTIČNO SIPANJE

1. RED ČASOVNO ODVISNE T. PERTURBACIJE

$$\langle j | \Delta H | i \rangle = \langle \vec{r}_1 \hat{\epsilon}_1; J | \frac{\vec{A} \cdot \vec{A}}{2} | \vec{r}_0 \hat{\epsilon}_0; I \rangle$$

$$c_j^{(1)} = \frac{2\pi}{iV\sqrt{\omega_0\omega_1}} \langle J | I \rangle \hat{\epsilon}_1^* \cdot \hat{\epsilon}_0 e^{i(\vec{r}_0 - \vec{r}_1) \cdot \vec{r}} \int_0^t e^{i(\omega_1 + E_J - \omega_0 - E_I)t} dt$$

$$\frac{d\mathcal{P}}{d\Omega d\omega_1} = \frac{\omega_1}{\omega_0} \alpha^4 |\langle J | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | I \rangle|^2 |\hat{\epsilon}_1^* \cdot \hat{\epsilon}_0|^2 \delta(\omega_1 + E_J - \omega_0 - E_I)$$

$\vec{q} \equiv \vec{r}_0 - \vec{r}_1$... PRENOS GIBALNE KOLIČINE SVETLOBE

$\omega \equiv \omega_0 - \omega_1$... PRENOS ENERGIJE FOTONA



$$q^2 = r_0^2 + r_1^2 - 2r_0r_1\cos\theta$$

$q_{MIN} = r_0 - r_1$ $\theta = 0$ SIPANJE V SMERI NAPREJ

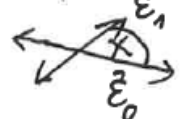
$q_{MAX} = r_0 + r_1$ $\theta = 180^\circ$ POUKATNO SIPANJE

● ELASTIČNO SIPANJE: $J = I$, $\vec{q} \cdot \vec{r} \ll 1$ $\omega_1 = \omega_0$

$$\frac{d\mathcal{P}}{d\Omega d\omega_1} = \alpha^4 |\hat{\epsilon}_1^* \cdot \hat{\epsilon}_0|^2 \delta(\omega_1 - \omega_0)$$

$$= \alpha^4 \cos^2 \chi \delta(\omega_1 - \omega_0)$$

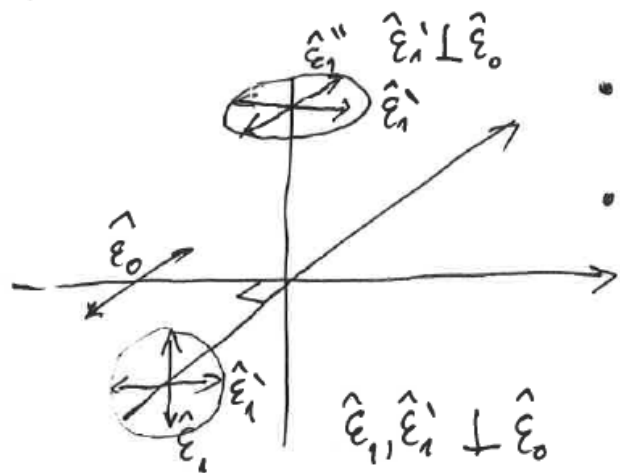
... THOMPSONOVO SIPANJE



χ ... KOT MED SMERJO ZAČETNE IN KONČNE POLARIZACIJE

- THOMPSONOV SIPALNI PRESEK JE KONSTANTEN, KO GA INTEGRIRAMO PO VSEH KOTIH IN POLARIZACIJAH SIPANE SVETLOBE $\sigma_0^2 \approx 8 \cdot 10^{-30} \text{ m}^2$!

(2)



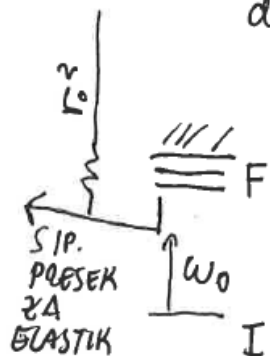
- PRAVOKOTNO NA VPADNO POLARIZACIJO JE SIPANA SVETLOBA LINEARNO POLARIZIRANA
- NI SIPANE SVETLOBE V SMERI VZPOLOŽ POLARIZACIJE VPADNE SVETLOBE

ANOMALNO ELASTIČNO SIPANJE: PRISPEVEK $\Delta F = \vec{p} \cdot \vec{A}$:

$$c_i^{(2)}(t) = -\frac{2\pi}{iV\sqrt{\omega_0\omega_1}} \sum_F \frac{\langle I | \vec{p} \cdot \hat{E}_1^* | F \rangle \langle F | \vec{p} \cdot \hat{E}_0 | I \rangle}{E_F - E_I - \omega_0} \int_0^t e^{i(\omega_1 - \omega_0)t} dt$$

SKUPAJ Z ELASTIČNI SIPANJEM:

$$\frac{d\sigma(\omega_0)}{d\Omega d\omega_1} = \alpha^4 \frac{\omega_1}{\omega_0} \left| \hat{E}_0 \cdot \hat{E}_1^* - \sum_F \frac{\langle I | \vec{p} \cdot \hat{E}_1^* | F \rangle \langle F | \vec{p} \cdot \hat{E}_0 | I \rangle}{E_F - E_I - \omega_0} \right|^2 \delta(\omega_1 - \omega_0)$$



THOMPSONOVO
SIPANJE

ELASTIČNI RIXS
RESONANTNO RAMANSKO
SIPANJE NA ZAJ V ZAČETNO STANJE I

INTERFERENCA, LE KO $\omega_0 \approx E_F - E_I$
(IMENOVANEC JE VEUK)

XRS: NEELASTIČNO NERESONANTNO SIPANJE RENTGENSKE SVETLOBE

$\vec{q} \cdot \vec{r}$ NI ZANEMARLJIV

$\vec{r} \approx \vec{r}_B$

$J \neq I$

3

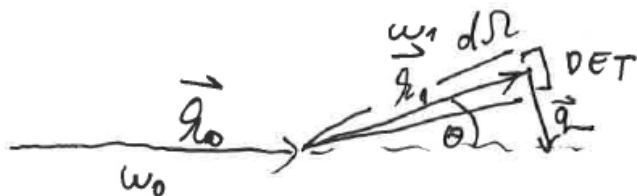
	$\omega = \omega_0 - \omega_1$	$(qr)_{MIN} = \omega dr_B$
1 a.u.	27 eV	$\alpha = 0.0073$
36 a.u.	1000 eV	0.267
360 a.u.	10 keV	2.67

$$c_j^{(1)} = \frac{2\pi}{iV\sqrt{\omega_0\omega_1}} \langle J | \cancel{1} + i\vec{q} \cdot \vec{r} + \frac{i^2}{2} (\vec{q} \cdot \vec{r})^2 + \dots | I \rangle \hat{\epsilon}_0 \cdot \hat{\epsilon}_1^* \int_0^+ e^{i(\omega_1 + E_J - \omega_0 - E_I)t} dt$$

DIPOLNI PRIBLIŽEK: $\vec{q} \cdot \vec{r} \ll 1$

ZANEMARIMO
LAHKO VIŠJE ČLENE

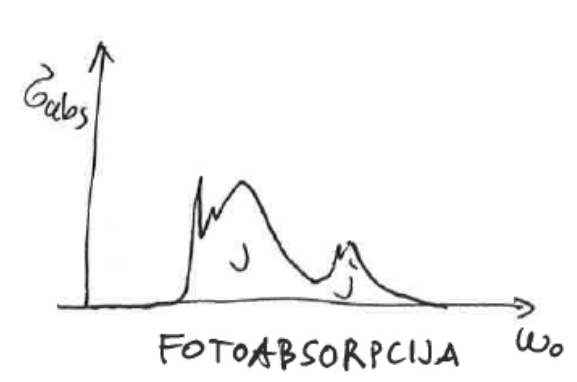
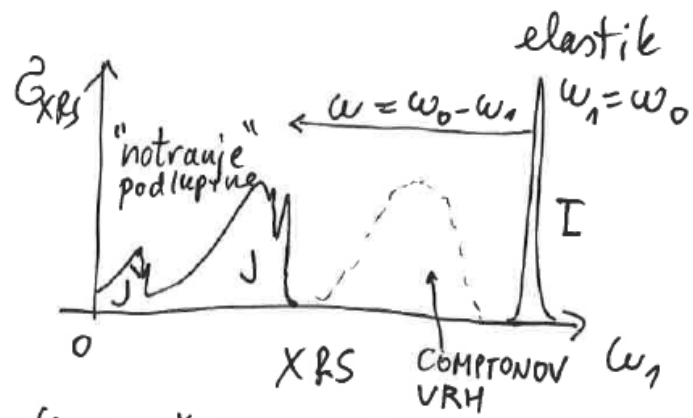
$$\frac{d^2\sigma(\omega_0)}{d\Omega d\omega_1} = \alpha^4 \frac{\omega_1}{\omega_0} q^2 |\langle J | \hat{\epsilon}_q \cdot \vec{r} | I \rangle|^2 |\hat{\epsilon}_0 \cdot \hat{\epsilon}_1^*|^2 \delta(\omega_1 + E_J - \omega_0 - E_I)$$



SIPALNI PRESEK JE
SORAZMERNEN Z ABSORPCIJSKIM PRESEKOM

$$\sigma_{abs} = 4\pi\alpha^2 \omega_0^2 |\langle J | \hat{\epsilon}_0 \cdot \vec{r} | I \rangle|^2 \delta(E_J - E_I - \omega_0)$$

$$\omega_0 \rightarrow \omega_0 - \omega_1, \quad \hat{\epsilon}_0 \rightarrow \hat{\epsilon}_q$$



4

ω_0 JE "POJUBEN" IN
 FIKSNO IZBRAN, REZONANCO
 ZADENEMO, KO SE IZGUBA ENERGIJE
 FOTONA $\omega_0 - \omega_1$ UJEMA Z VZBUDITVENO
 ENERGIJO ATOMA. IZGUBO ENERGIJE
 DOLOČI ENERGIJA SIPANEGA FOTONA ω_1
 PRI FIKSNEM KOTU. PRI VELIKIH
 SIPALNIH KOTIH θ NARAŠČA \vec{Q} IN
 ZAPUSTIMO DIPOLNI PRIBLIŽEK. SPEKTER
 ZAČENJA DOBIVATI NEDIPOLNE PRISPEVKE
 PRI FIKSNEM ω .

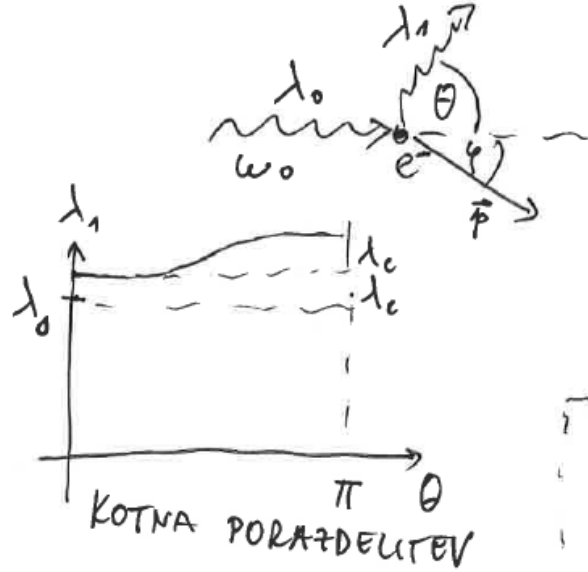
OPAZUJEMO ATENUACIJO
 VPADNEGA FOTONKEGA TOKA
 REZONANCO ZADENEMO, KO SE
 VPADNA ENERGIJA ω_0 UJEMA
 Z ENERGIJO PREHODOV V ATOMU.
 DIPOLNI PRIBLIŽEK ZAPUSTIMO,
 KO JE $\omega_0 \gtrsim$ NEKAJ keV.

NAJVEČJI SIGNAL XRS DA SIPANJE SVETLOBE NA VALENČNIH ELEKTRONIH, KI SO SKORAJ PROSTI.

5

COMPTONOVO SIPANJE

ELEKTRON PRED SIPANJEM MIRUJE



$$\lambda_1 - \lambda_0 = \frac{h}{mc} (1 - \cos\theta) = \lambda_c (1 - \cos\theta) = 2\pi a (1 - \cos\theta)$$

$\lambda_c = 2.43 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ COMPTONSKA VALOVNA DOLŽINA

$$\omega_1 = \frac{1}{1 + \omega_0 d^2 (1 - \cos\theta)} \quad \text{ctg } \varphi = (1 + \omega_0 d^2) \text{tg } \frac{\theta}{2}$$

OHRANITEV ENERGIJE IN GIBALNE KOLIČINE PRI SIPANJU:

$$\omega_0 + E_e = \omega_1 + E_e \quad \rightarrow \quad \omega_0 + mc^2 = \omega_1 + \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2} \rightarrow (pc)^2 = (\omega_0 - \omega_1 + mc^2)^2 - m^2 c^4$$

$$\vec{g}_0 = \vec{g}_1 + \vec{p} \rightarrow p^2 c^2 = (g_0 c)^2 + (g_1 c)^2 - 2c^2 k_0 g_1 \cos\theta \rightarrow$$

$$\omega_1 \left(\frac{\omega_0}{mc^2} (1 + \cos\theta) + 1 \right) = \omega_0$$

V RESNICI ELEKTRON V ZAČETNEM STANJU NE MIRUJE, KER JE VEŽAN IZKAŽE SE, DA COMPTONOVO SIPANJE POD DOLOČENIMI POGOJI (IMPULZNA APROKSIMACIJA) "MERI" ZAČETNO VALOVNO FUNKCIJO e^- V MOMENTNI REPREZENTACIJI.

OBRAVNAVAMO SIPANJE SVETLOBE NA e^- , KI JE ŠIBKO VEŽAN:

(6)

$$\omega = \omega_0 - \omega_1 = \frac{p^2}{2} + |E_B| \quad \text{OHRANITEV ENERGIJE}$$

IMPULZNA APROKSIMACIJA: ZANEMARIMO $|E_B|$, $|E_B| \ll \omega$

$$\frac{d\sigma(\omega_0)}{d\Omega d\omega_1} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{TH}} \left(\frac{\omega_1}{\omega_0}\right) \sum_{\mathbf{J}} \sum_{\mathbf{I}} |\langle \mathbf{J} | e^{i\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}} | \mathbf{I} \rangle|^2 \delta(E_J - E_I - \omega)$$

P. Eisenberger
& P.M. Platzman,
Phys. Rev. A, 2, 415 (1970)

UPOŠTEVAJMO:

$$\delta(E_J - E_I - \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega - E_J + E_I)t} dt, \quad e^{iE_I t} | \mathbf{I} \rangle = e^{i\hat{H}t} | \mathbf{I} \rangle$$

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2} + V(\mathbf{r}) = \hat{H}_0 + V(\mathbf{r})$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega d\omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{TH}} \frac{\omega_1}{\omega_0} \int dt e^{i\omega t} \langle \mathbf{I} | e^{i\hat{H}t} e^{-i\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}} e^{-i\hat{H}t} e^{i\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}} | \mathbf{I} \rangle = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{TH}} \frac{\omega_1}{\omega_0} \underline{\underline{S(\mathbf{z}, \omega)}}$$

$$e^{i\hat{H}t} = e^{i\hat{H}_0 t} e^{iVt} e^{-i[H_0, V]t^2/2} + \dots \quad \text{" } \langle \mathbf{J} |$$

členi višjega reda z nižjo potenco časa

$$\approx e^{i\hat{H}_0 t} e^{iVt} \quad (\text{IA})$$

BISTVO IMPULZNE APROKSIMACIJE: ČAS PREHODA ELEKTRONA IZ VEŽANEGA STANJA $| \mathbf{I} \rangle$ V KONČNO PROSTO STANJE $| \mathbf{J} \rangle$ JE TIPAČNO REDA VELIKOSTI ω^{-1} . TA ČAS JE KRATEK, ČE JE ω VELIK IN $|E_B| \ll \omega$. TEDAJ e^- "V HIPU" ZAPOSTI ATOM.

$$|A\rangle: S^{IA}(q, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle i | e^{i\hat{H}_0 t} e^{i\mathbf{v}t} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{v}t} e^{i\hat{H}_0 t} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | i \rangle \quad (7)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle i | e^{i\hat{H}_0 t} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\hat{H}_0 t} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | i \rangle \quad [V, \mathbf{r}] = 0$$

POTENCIAL "IZGINE" IZ IZRAZA ZA SIPALNI PRESEK. IZBITJE SE ZGODI TAKO HITRO, DA JE MEDTEM POTENCIAL KONSTANTEN, ENAK SISTEMU V VEZANEM ZAČETNEM STANJU e^- .

FT VALOVNE F. ELEKTROM
 ↓ V KOORDINATNEM
 PROSTORU.

$$S^{IA}(q, \omega) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} |f(p)|^2 S(\omega - \frac{q^2}{2} - \mathbf{q}\cdot\mathbf{p}), \quad f(p) = \int e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \varphi_I(\mathbf{r}) d^3 r$$

PRI POGOJU, DA
 VEWA (IA) JE $\left[\begin{array}{l} \omega \gg E_B \\ \text{VALENČNE LUPINE} \end{array} \right]$

COMPTONSKI SPEKTER

JASNO POVEŽAN S

PORAŽDELITVIJO GIBALNE

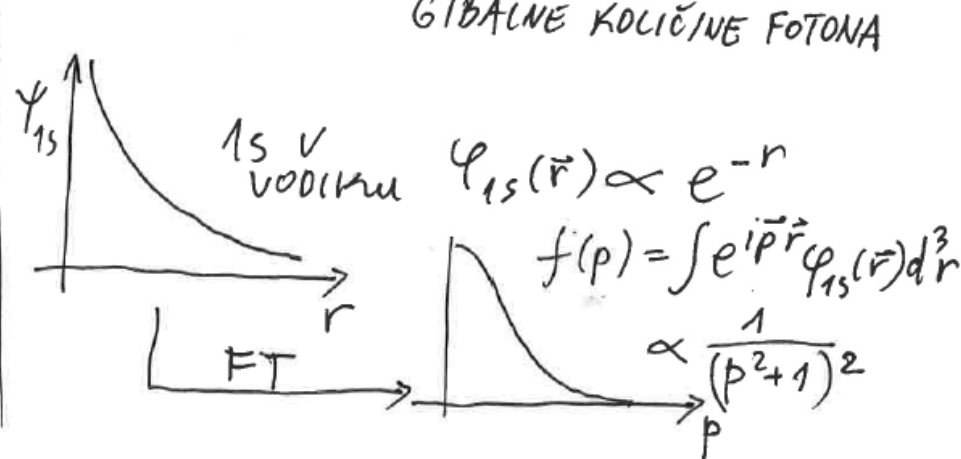
KOLIČINE e^- V ZAČETNEM STANJU.

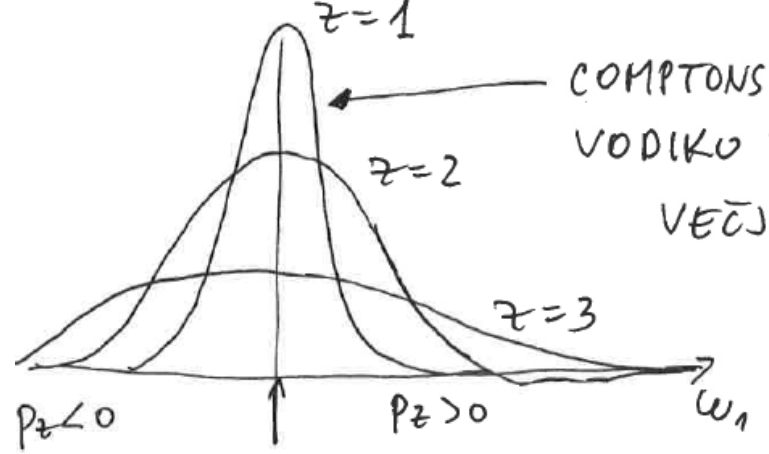
PRI IZBRANEM (ENERGIJA VPADNIH IN SIPANIH FOTONOV)
 $\omega = \omega_0 - \omega_1$ TER
 (KOT DETEKTORJA)

q JE SIPALNI PRESEK XRS SORAZMERNEN S ŠTEVILOM e^- , KI IMAJO PROJEKCIJO GIBALNE KOLIČINE q V SMERI \hat{q} .

COMPTONSKO
 SIPANJE: ENERGIJA
 SIPANEGA FOTONA
 JE ODVISNA TUDI OD KOTA (\hat{q})

KOMPONENTA
 GIBALNE KOLIČINE
 e^- V ZAČETNEM STANJU
 NA SMER PRENOSA
 GIBALNE KOLIČINE FOTONA





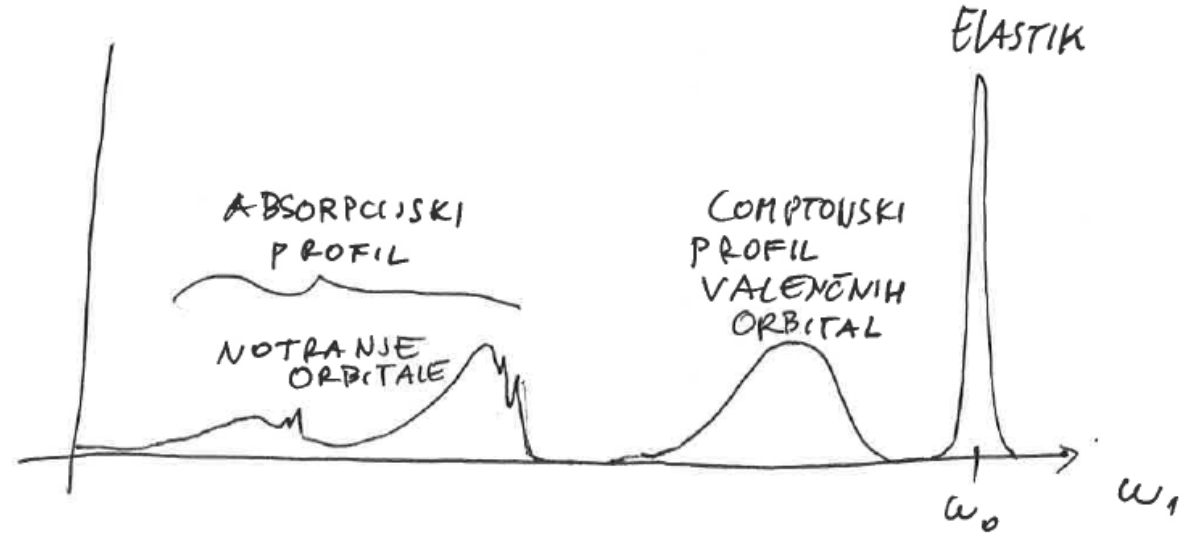
COMPTONSKI PROFIL XRS:
VODIKU PODOBNI ATOM

VEČJI $z \rightarrow$ BOLJ LOKALIZIRANA ORBITALA IS V PROSTORU



MANJ LOKALIZIRANA ORBITALA IS
V PROSTORU GIBALNIH KOLIČIN

$p_z=0$
 $\omega_0 - \omega_1 = \frac{q^2}{2}$
 MAKS. (SEPREMIKA S KOTOM)



V MOLEKULAH IN TRDNIM SNOVEH (T TEKOČINE) LAHKO FOTONI IZGUBIJO ENERGIJO ZA VZBUJANJE FONONOV, PLAZMONOV, VIBRACIJSKIH STANJ, ETC. POLEG TEGA JE GLAVNA PREDNOST XRS, DA LAHKO MERIMO ABSORPCIJSKE SPEKTRE LAHKIM ELEMENTOV (C, N, O, Li, ...) GLOBOKO V SNOVI, SAJ DOSEŽEMO USTREZNO MAJHNO IZGUBO ENERGIJE PRI VELIKI ENERGIJI FOTONOV ($\omega_0, \omega_1 \gg \omega$)