

# КОМПТОНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ФОТОНА АТОМОМ С ОТКРЫТОЙ ОБОЛОЧКОЙ

*А. Н. Хоперский\**, *А. М. Надолинский*

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

Поступила в редакцию 9 февраля 2012 г.

В одноконфигурационном приближении Хартри – Фока вне рамок широко используемого в литературе импульсного приближения построена нерелятивистская квантовая теория нерезонансного комптоновского рассеяния рентгеновского фотона свободным многоэлектронным атомом с открытой оболочкой в основном состоянии. Переход к атому с заполненными оболочками воспроизводит результаты, полученные ранее в работах авторов [6, 7]. Представлены результаты тестового расчета для атомов с открытой (Ti, Fe) и заполненной (Zn) *3d*-оболочкой остова. Учтены эффекты радиальной релаксации одноэлектронных состояний в поле остовных вакансий. Результаты расчета хорошо согласуются с результатами эксперимента [15, 16]. Установлено, что в исследованных диапазонах энергий рентгеновского фотона результаты импульсного приближения не только количественно, но и качественно не согласуются с результатами нашей теории. В частности, в окрестности линии упругого (томсоновского и рэлеевского) рассеяния импульсное приближение приводит к сильной переоценке вкладов в вероятность рассеяния от глубоких оболочек атома, участвующих в неупругом рассеянии фотона лишь виртуально. Представляемая теория носит общий характер и ее применимость к тому или иному элементу таблицы Менделеева с открытой оболочкой остова или многоэлектронному атомному иону ограничена лишь требованием корректности использования нерелятивистского приближения Хартри – Фока при описании волновых функций состояний рассеяния.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Нерезонансное (контактное; в представлении диаграмм Фейнмана в вершине взаимодействия сходятся четыре линии: падающего и рассеянного фотонов, возбужденного электрона и вакансии) комптоновское рассеяние фотона многоэлектронным атомом — один из фундаментальных процессов в микромире. Экспериментальное и теоретическое исследование соответствующих энергетических областей спектров рассеяния дает богатую информацию как о рассеивающей системе, многочастичных эффектах и их квантовой интерференции, так и о квантовомеханической природе и математической структуре оператора рассеяния.

Амплитуда вероятности этого процесса в нерелятивистском приближении (для волновых функций состояний рассеяния и оператора перехода) как матричный элемент оператора контактного перехода

$$\hat{C} = \frac{e^2}{2m_e c^2} \sum_{n=1}^N (A_n \cdot A_n)$$

в гамильтониане взаимодействия электромагнитного поля с электронами атома традиционно рассматривается (см., например, недавний обзор [1]) в импульсном приближении (или его модификациях) [2–4]. Здесь  $A_n \equiv \hat{A}(\mathbf{r}_n, 0)$  — оператор поля в представлении вторичного квантования,  $\mathbf{r}_n$  — радиус-вектор  $n$ -го электрона атома,  $N$  — число электронов в атоме,  $e$  — заряд электрона и  $m_e$  — его масса,  $c$  — скорость света в вакууме. Однако, как показали, в частности, наши исследования [5–7], в широких диапазонах энергий рентгеновского фотона и углов рассеяния импульсное приближение становится существенно некорректным. Так, в частности, одно из базовых условий применимости импульсного приближения, записанное в форме неравенства [4]

$$\zeta = I_{n_1 l_1} (\hbar\omega_1 - \hbar\omega_2)^{-1} \ll 1$$

(формально математически некорректно отбрасывание величины  $\zeta$  в аргументе обобщенной  $\delta$ -функции

\*E-mail: hopersky\_vm\_1@rgups.ru

Дирака), эквивалентно исключению из рассмотрения величин энергий  $I_{n_1 l_1}$  порогов ионизации  $n_1 l_1$ -оболочек атома. Здесь  $\omega_1$  ( $\omega_2$ ) — круговая частота падающего (рассеянного) фотона. Это, в свою очередь, приводит к переоценке вкладов атомных оболочек в вероятность рассеяния. В самом деле, при  $\hbar\omega_2 > \hbar\omega_1 - I_{n_1 l_1}$  атомные оболочки ионизируются лишь виртуально. Как результат, в указанной области энергий рассеянного фотона вклад атомных  $n_1 l_1$ -оболочек в вероятность рассеяния становится исчезающе малым.

Нерелятивистская квантовая теория вне рамок импульсного приближения для свободного атома с  $^1S_0$ -термом основного состояния построена в работах авторов [5–7]. В данной работе мы проводим обобщение этой теории на случай свободного атома с открытой  $s$ -,  $p$ -,  $d$ - или  $f$ -оболочкой в основном состоянии. Для проверки теории исследованы абсолютные значения и форма сечений нерезонансного комптоновского рассеяния рентгеновского фотона атомами титана (Ti, заряд ядра атома  $Z = 22$ , конфигурация и терм основного состояния  $A = \gamma 3d^2 4s^2 (^3F_2)$ ,  $\gamma \equiv 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ ) и железа (Fe,  $Z = 26$ ,  $A = \gamma 3d^6 4s^2 (^5D_4)$ ) с открытой  $3d$ -оболочкой остова. С целью демонстрации динамики сечений в последовательности элементов с заполняющейся  $3d$ -оболочкой приведены результаты расчета для атома цинка (Zn,  $Z = 30$ ,  $A = \gamma 3d^{10} 4s^2 (^1S_0)$ ) из работы авторов [7]. Мы не ставили перед собой задачи проведения обзора результатов огромного массива опубликованных в литературе экспериментальных и теоретических работ по исследованию процесса рассеяния рентгеновского фотона, в частности,  $3d$ -элементами (от атома Sc,  $Z = 21$  до атома Zn,  $Z = 30$ ) таблицы Менделеева. Атомы Ti, Fe и Zn (несмотря на их практическую ценность, например, как подгруппы биологически важных элементов, так и для астрофизики) взяты не более как пример для демонстрации основных положений развиваемой в данной работе нерелятивистской теории.

## 2. ТЕОРИЯ

Рассмотрим процесс нерезонансного комптоновского ( $\omega_2 < \omega_1$ ) рассеяния линейно поляризованного фотона  $n_1 l_1$ -оболочкой атома вида

$$\hbar\omega_1 + A \rightarrow B + \hbar\omega_2, \quad (1)$$

где (заполненные оболочки конфигураций здесь и далее не указаны)

$$A = n_1 l_1^{N_1}(T), \quad B = n_1 l_1^{N_1-1}(T_1)\varepsilon l(T'),$$

$$l = 0, 1, \dots, \infty, \quad T \equiv LSJ, \quad n_1 l_1 \leq f, \quad \varepsilon l > f,$$

$f$  — уровень Ферми (совокупность квантовых чисел валентной оболочки атома),  $N_1$  — число заполнения  $n_1 l_1$ -оболочки,  $T$ ,  $T_1$  и  $T'$  — термы основного, промежуточного и конечного состояний атома,  $\varepsilon$  — энергия электрона сплошного спектра. Здесь и далее мы не учитываем эффект спин-орбитального расщепления оболочек атомного остова. С учетом структуры нерелятивистского  $\hat{C}$ -оператора контактного взаимодействия электромагнитного поля с электронами атома для дважды дифференциального сечения процесса (1) в атомной системе единиц ( $e = \hbar = m_e = 1$ ) имеем [4, 5]

$$\sigma_{n_1 l_1} = r_0^2 (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2 \beta \int_0^\infty H_{n_1 l_1} G_{n_1 l_1} d\varepsilon, \quad (2)$$

$$H_{n_1 l_1} = [J]^{-1} \sum_{T_1 T'} \sum_{M M'} |W|^2, \quad (3)$$

$$W = \sum_{k=1}^N \langle A, M | \exp(i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_k)) | B, M' \rangle, \quad (4)$$

$$G_{n_1 l_1} = \frac{1}{\gamma_b \sqrt{\pi}} \exp \left[ - \left( \frac{\Delta_{n_1 l_1} - \varepsilon}{\gamma_b} \right)^2 \right]. \quad (5)$$

В формулах (2)–(5) обозначено:

$$\sigma_{n_1 l_1} \equiv d^2 \sigma_{n_1 l_1} / d\omega_2 d\Omega,$$

$\Omega$  — пространственный угол вылета рассеянного фотона,  $r_0$  — классический радиус электрона,  $\mathbf{e}_1$  ( $\mathbf{e}_2$ ) — вектор поляризации падающего (рассеянного) фотона,  $\beta = \omega_2 / \omega_1$ ,  $[J] = 2J + 1$ ,  $M$  ( $M'$ ) — проекция полного  $J$  ( $J'$ )-момента,  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$  — переданный атому импульс,  $\mathbf{k}_1$  ( $\mathbf{k}_2$ ) — волновой вектор падающего (рассеянного) фотона,  $\gamma_b = \Gamma_{beam} / 2\sqrt{\ln 2}$ ,  $\Gamma_{beam}$  — ширина на половине максимума инструментальной функции Гаусса–Лапласа  $G_{n_1 l_1}$ ,  $\Delta_{n_1 l_1} = \omega_1 - \omega_2 - I_{n_1 l_1}$ . Если спектральное разрешение эксперимента ( $\Gamma_{beam}$ ) не превосходит естественную ширину распада (по каналам оже- и радиационного типов)  $n_1 l_1$ -вакансии ( $\Gamma_{n_1 l_1} \equiv 2\gamma_{n_1 l_1}$ ), то функция Гаусса–Лапласа (5) заменяется функцией Коши–Лоренца

$$L_{n_1 l_1} = (\gamma_{n_1 l_1} / \pi) [(\Delta_{n_1 l_1} - \varepsilon)^2 + \gamma_{n_1 l_1}^2]^{-1}.$$

Конкретизируем аналитическую структуру величины  $H_{n_1 l_1}$  из (3), следуя методам теории неприводимых тензорных операторов [8]. Детально отразим

все этапы построения. Представим экспоненту в (4) двойным функциональным рядом:

$$\exp(i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_k)) = \sum_{t=0}^{\infty} \sum_{m=-t}^t i^t (-1)^m [t] j_t(qr_k) C_{-m}^{(t)}(\mathbf{q}) C_m^{(t)}(\mathbf{r}_k), \quad (6)$$

$$C_m^{(t)}(\mathbf{a}) = \left(\frac{4\pi}{[t]}\right)^{1/2} Y_{tm}(\theta_a, \varphi_a), \quad (7)$$

$$j_t(x) = \frac{1}{t!} \left(\frac{x}{2}\right)^t \int_0^1 (1-z^2)^t \cos(xz) dz. \quad (8)$$

Здесь  $Y_{tm}$  — сферическая функция,  $j_t$  — сферическая функция Бесселя первого рода порядка  $t$  (в интегральном представлении Пуассона [9]),

$$q = |\mathbf{q}| = \frac{\omega_1}{c} (1 + \beta^2 - 2\beta \cos \theta)^{1/2},$$

$r_k = |\mathbf{r}_k|$ ,  $\theta$  — угол рассеяния (угол между векторами  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{k}_2$ ),  $\theta_a, \varphi_a$  — сферические углы вектора  $\mathbf{a}$ . Учтем теорему Вигнера–Эккарта,

$$\langle A, M | Q_m^{(t)} | B, M' \rangle = (-1)^{J'-M'} \begin{pmatrix} J' & t & J \\ -M' & m & M \end{pmatrix} \langle A || Q^{(t)} || B \rangle, \quad (9)$$

для матричного элемента оператора рассеяния по мультипольности  $t$

$$Q_m^{(t)} = \sum_{k=1}^N C_m^{(t)}(\mathbf{r}_k) j_t(qr_k). \quad (10)$$

Учтем также условие ортогональности  $3j$ -символов Вигнера ( $\delta_{tt'}$  — символ Кронекера–Вейерштрасса),

$$\sum_{MM'} [t] \begin{pmatrix} J' & t & J \\ -M' & m & M \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} J' & t' & J \\ -M' & m' & M \end{pmatrix} = \delta_{tt'} \delta_{mm'}, \quad (11)$$

и теорему сложения сферических функций,

$$\sum_{m=-t}^t \left| C_m^{(t)}(\mathbf{q}) \right|^2 = 1. \quad (12)$$

Тогда с учетом выражений (6)–(12) из (3) получаем:

$$H_{n_1 l_1} = [J]^{-1} \sum_{T_1 T'} \sum_{t=0}^{\infty} [t] \left| \langle A || Q^{(t)} || B \rangle \right|^2. \quad (13)$$

В (9) в схеме  $LS$ -связи определен приведенный матричный элемент [10]:

$$\begin{aligned} \langle A || Q^{(t)} || B \rangle &= (-1)^{l+L_1-S-J'} \delta_{SS'} \sqrt{N_1 [L, L', J, J']} \times \\ &\times \left( l_1^{N_1} LS || l_1^{N_1-1} (L_1 S_1) l_1 \right) \times \\ &\times \begin{Bmatrix} l_1 & L & L_1 \\ L' & l & t \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & J & S \\ J' & L' & t \end{Bmatrix} \times \\ &\times \left( l_1 || C^{(t)} || l \right) R_t(n_1 l_1, \varepsilon l), \quad (14) \end{aligned}$$

$$R_t(n_1 l_1, \varepsilon l) = \int_0^{\infty} P_{n_1 l_1}(r) j_t(qr) P_{\varepsilon l}(r) dr. \quad (15)$$

В выражении (14) наличие множителя  $\delta_{SS'}$  отражает факт сохранения полного спина атомной системы при нерезонансном комptonовском рассеянии фотона атомом. В формуле (15)  $P_{nl}$  — радиальная часть волновой функции  $nl$ -электрона, волновые функции  $n_1 l_1$ -электронов,  $n_1 l_1 \leq f$ , получены решением нерелятивистских одноконфигурационных интегродифференциальных уравнений самосогласованного поля Хартри–Фока [11] для конфигурации  $A$ , волновые функции  $\varepsilon l$  электронов сплошного спектра получены решением уравнений Хартри–Фока для конфигурации  $B$  (в поле  $n_1 l_1$ -вакансии). Изменение хартри-фоковского потенциала атомного остатка в результате появления  $n_1 l_1$ -вакансии приводит к эффекту радиальной релаксации к ядру остовных одноэлектронных состояний конфигурации  $B$  и, как результат, к делокализации состояний сплошного спектра. Методы учета (методы теории неортогональных орбиталей [10]) соответствующей аналитической модификации радиальных частей амплитуд вероятностей перехода (15) представлены в работах [5–7]. Например, в случае перехода  $2p \rightarrow \varepsilon f$  по мультипольности  $t = 2$  вместо (15) для исследуемых в данной работе атомов имеем:

$$R_2(2p_0, \varepsilon f_+) \rightarrow R_2(2p^c, \varepsilon f_+),$$

где определена (в обозначениях Дирака) корреляционная волновая функция

$$|2p^c\rangle = N_{2p} (|2p_0\rangle - \alpha |3p_0\rangle),$$

$$\alpha = \frac{\langle 2p_0 | 3p_+ \rangle}{\langle 3p_0 | 3p_+ \rangle},$$

$$\langle 2p_0 | 3p_+ \rangle = \int_0^{\infty} P_{2p_0}(r) P_{3p_+}(r) dr.$$

Здесь  $N_{2p}$  — произведение интегралов перекрывания радиальных частей волновых функций электронов, не участвующих в переходе, состояния  $l_0$  получены в хартри-фоковском поле конфигурации  $A$ , а состояния  $l_+$  — в хартри-фоковском поле  $2p$ -вакансии конфигурации  $B$ .

Заметим, что в импульсном приближении волновая функция электрона сплошного спектра рассматривается в виде плоской волны [2–4]. Таким образом, в этом приближении игнорируются не только факт бесконечной мультипольности ( $l$  от 0 до  $\infty$ ) одночастичных  $\varepsilon l$ -состояний рассеяния, но и один из важнейших в рентгеновском диапазоне энергий рассеиваемого фотона многочастичных эффектов — эффект (радиальной) делокализации состояний сплошного спектра как результат решения, например, уравнений Хартри–Фока для конфигурации с  $n_1 l_1$ -вакансией в атомном остатке.

Отметим, что дальнейшее развитие излагаемой теории связано, в частности, с исследованием (наряду с (14)) приведенного матричного элемента вида [8]

$$\left( n_1 l_1^{4l_1+2} n_2 l_2^{N_2} T_2 \| Q^{(t)} \| \times \right. \\ \left. \times n_1 l_1^{4l_1+1} n_2 l_2^{N_2} (L_2' S_2') T' \varepsilon l j J \right). \quad (16)$$

В (16)  $j = l \pm 1/2$  и учитывается тот факт, что переход  $n_1 l_1 \rightarrow \varepsilon l$  из заполненной  $n_1 l_1$ -оболочки происходит в присутствии открытой ( $N_2 < 4l_2 + 2$ )  $n_2 l_2$ -оболочки как «наблюдателя». Предполагается также, что между  $n_1 l_1$ -вакансией и  $n_2 l_2$ -оболочкой реализуется  $LS$ -связь.

Наконец, проведем суммирование по термам в выражении (13). Подставим (14) в (13). Используем формулу суммирования  $6j$ -коэффициентов:

$$\sum_x [x, c] \begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & x \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} a & b & c' \\ d & e & x \end{Bmatrix} = \\ = \delta_{cc'} \{abc\} \{dec\}, \quad (17)$$

свойство их инвариантности:

$$\begin{Bmatrix} l_1 & L & L_1 \\ L' & l & t \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} L_1 & L & l_1 \\ t & l & L' \end{Bmatrix}, \quad (18)$$

и условие ортогональности генеалогических коэффициентов:

$$\sum_{L_1 S_1} \{L_1 L l_1\} \left( l_1^{N_1} L S \| l_1^{N_1-1} (L_1 S_1) l_1 \right)^2 = 1. \quad (19)$$

Тогда с учетом выражений (17)–(19) из (13) окончательно получаем

$$H_{n_1 l_1} = \frac{N_1}{[l_1]} \times \\ \times \sum_{t=0}^{\infty} [t] \{t l l_1\} \left( l_1 \| C^{(t)} \| l \right)^2 R_t^2(n_1 l_1, \varepsilon l). \quad (20)$$

В (20) определено триадное условие  $\{t l l_1\}$  ( $|l - l_1| \leq t \leq l + l_1$ ) и выполняется равенство  $l + l_1 + t = 2g$ , где  $g$  — целое число. Формально математически выражение (20) не содержит зависимости величины  $H_{n_1 l_1}$  от квантовых чисел  $L, S$  и  $J$  терма начального состояния атома. Однако фактически этот терм определен (по эмпирическому правилу Хунда [12]) числами  $l_1$  и  $N_1$ .

Таким образом, выражение (2) с учетом (20) дает искомое аналитическое представление для дважды дифференциального сечения процесса (1) при произвольном значении числа заполнения ( $N_1 \leq 4l_1 + 2$ )  $n_1 l_1$ -оболочки атома, рассеивающей рентгеновский фотон. Заметим, что непосредственный расчет структур (14) и (13), конечно, также приводит к результату (20). Однако такой путь связан с громоздкими вычислениями, прежде всего, возникающей иерархии термов и  $6j$ -коэффициентов. Например, в случае открытой  $n_1 p^2$ -оболочки в выражении (1) имеем

$$T = {}^3P_0, \quad T_1 = {}^2P_{1/2}$$

и четыре терма конечных состояний

$$T' = {}^3(l-1)_{l-1}, {}^3l_{l-1}, {}^3l_{l+1}, {}^3(l+1)_{l+1}.$$

В завершение изложения развиваемой теории конкретизируем результат (20) для  $s$ -,  $p$ -,  $d$ - и  $f$ -оболочек элементов таблицы Менделеева. Воспользуемся представлением для приведенного матричного элемента сферической функции:

$$\left( l_1 \| C^{(t)} \| l \right) = (-1)^{l_1} [l, l_1]^{1/2} \begin{pmatrix} l_1 & t & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

выражением для  $3j$ -символа Вигнера:

$$\begin{pmatrix} l_1 & t & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^g g!}{\sqrt{[g]!}} \prod_k \frac{\sqrt{(2a_k)!}}{a_k!}, \quad (22)$$

$a_k = g - k, k = t, l, l_1$ , и равенством

$$\left( l_1 \| C^{(0)} \| l \right) = [l_1]^{1/2} \delta_{ll_1}.$$

Тогда, с учетом выражений (21), (22) из (20) получаем (символы  $n_1$  и  $\varepsilon$  не записываем)

1)  $l_1 = 0$  ( $s^{N_1}$ -оболочка остова):

$$H_s = N_1 \sum_{l=0}^{\infty} [l] R_l^2(s, l), \quad (23)$$

2)  $l_1 = 1$  ( $p^{N_1}$ -оболочка остова):

$$H_p = N_1 \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) (R_l^2(p, l+1) + R_{l+1}^2(p, l)), \quad (24)$$

3)  $l_1 = 2$  ( $d^{N_1}$ -оболочка остова):

$$H_d = \frac{N_1}{10} \left( D + \sum_{l=2}^{\infty} \sum_{i=0}^2 \alpha_i R_{l+2i-2}^2(d, l) \right), \quad (25)$$

$$D = 10R_2^2(d, s) + 12R_1^2(d, p) + 18R_3^2(d, p), \quad (26)$$

$$\alpha_0 = 15 \frac{l(l-1)}{2l-1}, \quad \alpha_1 = 10 \frac{l(l+1)(2l+1)}{(2l-1)(2l+3)}, \quad (27)$$

$$\alpha_2 = N_1[l] - \alpha_0 - \alpha_1, \quad (28)$$

4)  $l_1 = 3$  ( $f^{N_1}$ -оболочка остова):

$$H_f = \frac{N_1}{14} \left( F + \sum_{l=3}^{\infty} \sum_{i=0}^3 \beta_i R_{l+2i-3}^2(f, l) \right), \quad (29)$$

$$F = 14R_3^2(f, s) + 18R_2^2(f, p) + 24R_4^2(f, p) + 18R_1^2(f, d) + \frac{56}{3}R_3^2(f, d) + \frac{100}{3}R_5^2(f, d), \quad (30)$$

$$\beta_0 = 35 \frac{l(l-1)(l-2)}{(2l-1)(2l-3)}, \quad \beta_1 = 21 \frac{l(l-1)(l+1)}{(2l-3)(2l+3)}, \quad (31)$$

$$\beta_2 = 21 \frac{l(l+1)(l+2)}{(2l-1)(2l+5)}, \quad \beta_3 = N_1[l] - \beta_0 - \beta_1 - \beta_2. \quad (32)$$

В силу отсутствия аналитических решений уравнений Хартри–Фока исследование несобственных интегралов (15) и эффективной области сходимости (значений мультипольности  $l$  от 0 до  $l_{max} < \infty$ ) функциональных рядов (23), (24), (25) и (29) возможно лишь численными методами.

При  $N_1 = 4l_1 + 2$  выражения (23)–(28) воспроизводят результаты, полученные в работах авторов [6, 7] для атомов с заполненными  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -оболочками ( $T = {}^1S_0$ ; термом конечного состояния рассеяния является результирующий терм открытой  $n_1 l_1^{4l_1+1}$ -оболочки и  $\varepsilon l$ -электрона,  $T' = {}^1L_J$ ,  $J = L$ ,  $S' = S$ ).

Для тяжелых атомов ( $Z \geq 36$ ) результат (20) применим, если при рассматриваемых значениях  $\omega_1$ ,  $\omega_2$  и  $\theta$  еще остается корректным описание волновых функций состояний рассеяния в нерелятивистском приближении Хартри–Фока. Так, например,

учет релятивистских эффектов при расчете функции комptonовского профиля  $J(Q)$  [3] атома Хе ( $Z = 54$ ) для значений аргумента

$$Q = \frac{\omega_1 - \omega_2}{q} - \frac{q}{2} \leq 10 \text{ ат. ед.}$$

(например,  $\omega_1 = 22 \text{ кэВ}$ ,  $22 \text{ кэВ} \geq \omega_2 \geq 18 \text{ кэВ}$ ,  $\theta = 133^\circ$ ) не более, чем на 1.5% изменяет результат нерелятивистского приближения Хартри–Фока [13, 14].

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ОБСУЖДЕНИЕ

С целью тестирования изложенной теории мы провели расчет дважды дифференциального сечения рассеяния (2) для атомов Тi и Fe при условии

$$(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2 \rightarrow \rho = \frac{1}{2}(1 + \cos^2 \theta)$$

(неполяризованные фотоны) и значениях  $\omega_1 = 14.93$  ( $K_\alpha$ -излучение атома Y,  $Z = 39$ ), 22.10 ( $K_\alpha$ -излучение атома Ag,  $Z = 47$ ) кэВ,  $\theta = 133^\circ$ ,  $141^\circ$  и  $\Gamma_{beam} = 180 \text{ эВ}$ , для которых выполнен эксперимент в работах [15, 16]. Для величин энергий порогов ионизации  $n_1 l_1$ -оболочек остова при расчете параметра  $\Delta_{n_1 l_1}$  из (5) приняты нерелятивистские значения, рассчитанные в данной работе (табл. 1).

Эффект спин-орбитального расщепления  $p_{1/2,3/2}$ - и  $d_{3/2,5/2}$ -оболочек не учитывался, поскольку максимальное (для данных атомов) значение константы спин-орбитального расщепления  $2p$ -оболочки атома Zn [17]  $\delta_{SO} \approx 23 \text{ эВ} \ll \Gamma_{beam}$ . В

**Таблица 1.** Рассчитанные нерелятивистские значения энергий  $I_{n_1 l_1}$  порогов ионизации остовных оболочек атомов (без учета эффекта спин-орбитального расщепления  $p_{1/2,3/2}$ - и  $d_{3/2,5/2}$ -оболочек)

$n_1 l_1$	$I_{n_1 l_1}$ , эВ		
	Ti	Fe	Zn
1s	4950.27	7069.68	9564.16
2s	568.32	849.21	1181.30
2p	468.05	724.47	1031.37
3s	74.25	108.01	145.83
3p	45.15	69.48	97.24
3d	8.54	12.16	15.24
4s	5.79	6.79	7.63

общем случае, когда  $\delta_{SO} \approx \Gamma_{beam}$ , достаточно надежным методом учета эффекта спин-орбитального расщепления  $p$ -,  $d$ - и  $f$ -оболочек атомного остова в рамках нашей нерелятивистской теории оказывается доопределение в (24), (25) и (29) чисел заполнения

$$N_1 \rightarrow N_1(j) = 2j + 1, \quad j = l_1 - 1/2, l_1 + 1/2,$$

в (5) — энергетических параметров

$$\Delta_{n_1 l_1} \rightarrow \Delta_{n_1}(j),$$

$$\delta_{SO} = \Delta_{n_1}(l_1 + 1/2) - \Delta_{n_1}(l_1 - 1/2)$$

и последующее суммирование вероятностей рассеяния (2):

$$\sigma_{n_1 l_1} \rightarrow \sum_j \sigma_{n_1}(j).$$

При расчете величин  $H_{s,p,d}$  из (23), (24) и (25) учтены значения мультипольности  $l$  от 0 до  $l_{max} = 25$ . Учет высших гармоник ( $l > l_{max}$ ) изменяет результаты расчета не более чем на 0.1%. Здесь, в качестве важного методологического результата, заметим следующее. Проведенные нами численные эксперименты показали, что при  $qr \equiv x \rightarrow 0$  (см.  $j_l(qr)$  при  $r \rightarrow 0$ ; в случае комптоновского рассеяния  $q_{min} = I_{n_1 l_1}/c$  при  $\theta = 0$ ) для  $l \gg 1$  традиционно используемое при вычислении функций Бесселя рекуррентное соотношение [9]

$$j_{l+1}(x) + j_{l-1}(x) = \frac{1}{x} [l] j_l(x), \quad l \geq 1,$$

$$j_0(x) = \frac{1}{x} \sin x,$$

$$j_1(x) = \frac{1}{x} (j_0(x) - \cos x),$$

оказывается куда менее эффективным алгоритмом, нежели интегральное представление Пуассона (8). Для реализации последнего требуется лишь достаточно густое разбиение интервала интегрирования  $z \in [0; 1]$ .

Результаты расчета представлены на рис. 1, 2 (аналогичные результаты для  $\omega_1 = 14.93$  кэВ и  $\theta = 141^\circ$  не приведены) и в табл. 2. Там же для сравнения приведены результаты расчета для атома Zn из работы авторов [7].

На рис. 1 представлены результаты расчета парциальных дважды дифференциальных сечений нерезонансного комптоновского рассеяния (2). Как и следовало ожидать, увеличение числа электронов в  $3d$ -оболочке последовательности атомов Ti, Fe и

Zn приводит к увеличению вклада этой оболочки в вероятность рассеяния. Парциальные дважды дифференциальные сечения нерезонансного комптоновского рассеяния в импульсном приближении получены по формуле [3, 8]

$$\sigma_{n_1 l_1} = \rho r_0^2 \frac{\beta}{q} N_1 J_{n_1 l_1}(Q) \eta, \quad (33)$$

$$\eta = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctg \left( \frac{\Delta_{n_1 l_1}}{\gamma_b} \right). \quad (34)$$

Здесь для учета величины спектрального разрешения эксперимента ( $\gamma_b \neq 0$ ) определена модулирующая  $\eta$ -функция (в работах [3, 8] принято  $\gamma_b = 0$ ,  $\eta = 1$ ), а функция комптоновского профиля  $J_{n_1 l_1}(Q)$  для  $n_1 l_1$ -электрона остова взята из табличных данных работы [3]. Во избежание загромождения рис. 1 результаты расчета по формуле (33) не приведены. Сравнение результатов расчета сечений рассеяния по формулам (2) и (33) показывают следующее. Переход от импульсного приближения к нашей теории сопровождается заметным перераспределением вероятности рассеяния между оболочками. Так, например, в случае атома Ti при  $\omega_1 = 22.10$  кэВ и  $\theta = 133^\circ$  относительные вклады  $n_1 l_1$ -оболочек остова в вероятность рассеяния в окрестности максимума ( $\omega_2 \approx 20.63$  кэВ,  $|Q| \approx 0.10$  ат.ед.) комптоновского профиля в импульсном приближении составили (в %) 1.1 (1s), 4.4 (2s), 6.7 (2p), 12.3 (3s), 23.8 (3p), 7.7 (3d), 44.0 (4s). В рамках нашей теории имеем 0.0 (1s), 5.7 (2s), 5.7 (2p), 23.4 (3s), 27.3 (3p), 10.3 (3d), 27.6 (4s). Физической причиной такого перераспределения вероятности рассеяния оказывается тот факт, что импульсное приближение по построению не учитывает [2–4], во-первых, бесконечной мультипольности ( $l$  от 0 до  $\infty$  в формуле (20))  $\varepsilon l$ -состояний сплошного спектра по каждому  $n_1 l_1 \rightarrow \varepsilon l$  каналу рассеяния и, во-вторых, энергетической отделенности (по параметру  $\Delta_{n_1 l_1}$  в формуле (5)) порогов ионизации  $n_1 l_1$ -оболочек атомного остова.

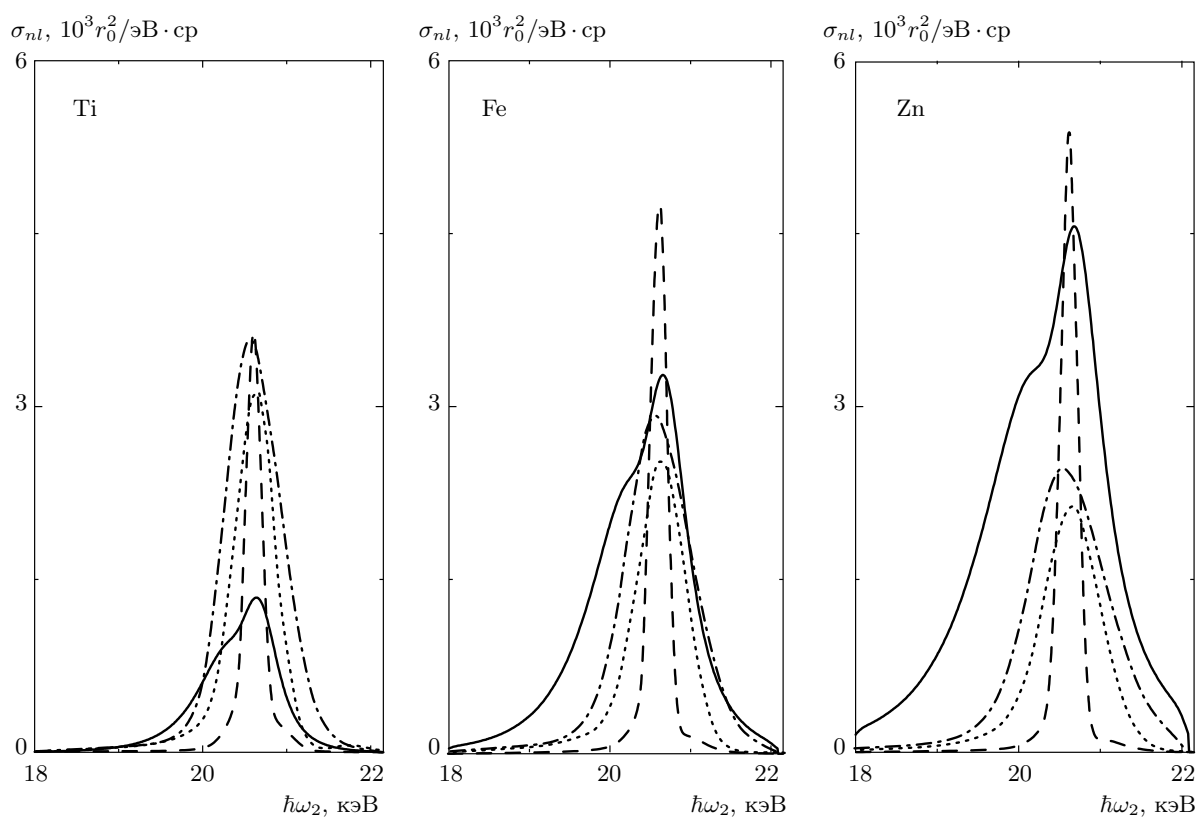
На рис. 2 представлены полные дважды дифференциальные сечения нерезонансного комптоновского рассеяния рентгеновского фотона атомами Ti, Fe и Zn:

$$\sigma = \sum_{n_1 l_1 \leq f} \sigma_{n_1 l_1}. \quad (35)$$

Как и следовало ожидать (см. Введение), импульсное приближение приводит к сильной переоценке вероятности рассеяния, прежде всего, в области энергий рассеянного фотона перед томсоновской (контактное рассеяние) и рэлеевской (аномально-дисперсионное рассеяние) линиями упругого ( $\omega_2 = \omega_1$ ) рассеяния фотона электронами атома [18–20]. В самом

**Таблица 2.** Сравнение результатов расчета полных однократно дифференциальных сечений нерезонансного комптоновского рассеяния (36) неполяризованного рентгеновского фотона атомами Ti, Fe (теория данной работы) и Zn (из работы [7]) с результатами эксперимента [15, 16]. ИП — импульсное приближение (по данным работы [3])

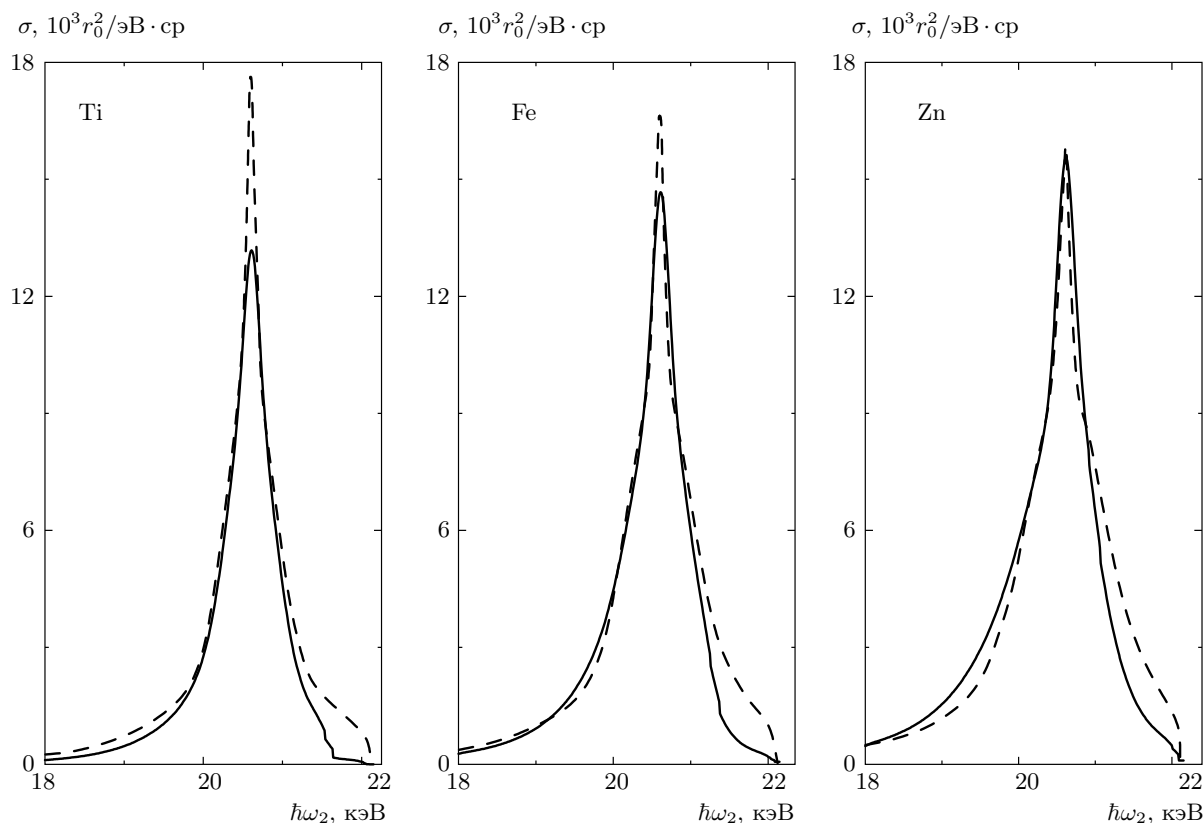
$\hbar\omega_1$ , кэВ	$\theta$ , град.	Атом	$d\sigma/d\Omega$ , бн/ср			
			Данная работа	[16]	[15]	ИП
14.93	141	Ti	0.919	$0.943 \pm 0.066$		1.055
		Fe	1.170	$1.018 \pm 0.071$		1.227
		Zn	1.403	$1.266 \pm 0.089$		1.405
22.10	133	Ti	0.832		$0.950 \pm 0.060$	1.018
		Fe	1.057		$1.170 \pm 0.060$	1.202
		Zn	1.279		$1.220 \pm 0.060$	1.359



**Рис. 1.** Парциальные дважды дифференциальные сечения нерезонансного комптоновского рассеяния (2) неполяризованного рентгеновского фотона атомами Ti, Fe (теория данной работы) и Zn (из работы [7]): пунктирные кривые —  $3s$ , штрихпунктирные кривые —  $3p$ , сплошные кривые —  $3d$ , штриховые кривые —  $4s$ . Вклад глубоких  $1s$ -,  $2s$ - и  $2p$ -оболочек не показан.  $\sigma_{nl} \equiv \sigma_{n_1 l_1}$ .  $\hbar\omega_1 = 22.10$  кэВ,  $\theta = 133^\circ$ ,  $\Gamma_{beam} = 180$  эВ (параметры эксперимента [15])

деле, например, при  $\omega_2 = 22.0$  кэВ глубокие  $1s$ -,  $2s$ - и  $2p$ -оболочки атома Ti в процессе неупругого рассеяния фотона практически не участвуют. Однако в импульсном приближении (см. данные [3] при  $|Q| = 5$  ат. ед.) их вклад в вероятность рассеяния ока-

зывается доминирующим (в %): 15.1 ( $1s$ ), 8.5 ( $2s$ ), 64.3 ( $2p$ ). Как было установлено выше, в данном случае переоцененная в импульсном приближении вероятность рассеяния перераспределяется на валентные и субвалентные оболочки атома.



**Рис. 2.** Полные дважды дифференциальные сечения нерезонансного комптоновского рассеяния (35) неполяризованного рентгеновского фотона атомами Ti, Fe (теория данной работы) и Zn (из работы [7]): сплошные кривые — результат нашей теории, штриховые кривые — результат импульсного приближения (по данным работы [3]).  $\hbar\omega_1 = 22.10$  кэВ,  $\theta = 133^\circ$ ,  $\Gamma_{beam} = 180$  эВ (параметры эксперимента [15])

Таким образом, переход от импульсного приближения к нашей теории сопровождается увеличением «окна прозрачности» (по отношению к эффекту неупругого рассеяния фотона атомом) в окрестности линии упругого рассеяния. Другими словами, расширяется интервал энергий  $\omega_2$ , где заметно уменьшается вероятность регистрации рассеянного рентгеновского фотона. Линии упругого рассеяния на рис. 2 не изображены во избежание его загромождения. Результаты расчета дважды дифференциального сечения томсоновского и рэлеевского рассеяния рентгеновского фотона энергии  $\omega_1 = 14.93, 22.10$  кэВ атомом Zn приведены в работе авторов [7]. Видимая часть «ступенчатой» структуры сечения рассеяния (35) в рамках нашей теории соответствует энергетическому положению порогов обрыва комптоновских профилей для глубоких  $2s$ - и  $2p$ -оболочек  $\omega_2^{max} = \omega_1 - I_{n_1 l_1}$ .

В табл. 2 дано сравнение результатов расчета полных однократно дифференциальных сечений

нерезонансного комптоновского рассеяния рентгеновского фотона атомами Ti, Fe и Zn,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int_0^\infty \sigma d\omega_2, \tag{36}$$

с результатами эксперимента работ [15, 16]. Результаты нашей теории, как и результаты импульсного приближения, согласуются с результатами эксперимента в пределах его погрешности ( $\pm 7\%$ ). Однако необходимо заметить следующее. При измерении абсолютной величины и формы интегрального сечения рассеяния (36) теряется часть физической информации, даваемой дважды дифференциальным сечением рассеяния (35). В частности (прежде всего в контексте нашей теории), теряется информация о переоценке импульсным приближением вероятности нерезонансного комптоновского рассеяния в окрестности линии упругого рассеяния. Строго говоря, в силу использования указанного во Введении неравенства импульсное приближение некорректно для



любых значений энергий рассеиваемых фотонов. Однако в исследуемых в данной работе диапазонах энергий рентгеновского фотона (10–25 кэВ) некорректность импульсного приближения в окрестности линии упругого томсоновского и рэлеевского рассеяния проявляется особенно ярко. Для экспериментального подтверждения этого теоретического факта необходимы (отсутствующие на данный момент в исследуемых областях энергий рентгеновского фотона) измерения с высоким спектральным разрешением абсолютных величин и формы именно дважды дифференциальных сечений рассеяния (35).

Как и следовало ожидать (рис. 2), результаты импульсного приближения превышают результаты нашей теории. Расхождения между теорией и экспериментом в абсолютных значениях сечения (36) как интегральной характеристики процесса рассеяния могут быть уменьшены после учета (в рамках нашей теории, а не импульсного приближения), прежде всего, эффектов однократного возбуждения (ландсберг–мандельштам–рамановское рассеяние) [6], кратного возбуждения/ионизации (кратного ландсберг–мандельштам–рамановского и (или) комптоновского рассеяния) [5] оболочек атома, мультиплетного расщепления и конфигурационного смешивания [11] в состояниях рассеяния. Решение такой задачи требует отдельного рассмотрения. Не следует, конечно, забывать того, что эксперимент в работах [15, 16] проведен с тонкими металлическими пленками, а не со свободными атомами. В этом случае факт коллективизации, прежде всего, внешних оболочек (дающих существенный вклад в области максимума комптоновского профиля свободного атома) атомов, образующих металл, вносит в теоретическую интерпретацию результатов эксперимента дополнительную погрешность.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вне рамок импульсного приближения построена нерелятивистская квантовая теория нерезонансного комптоновского рассеяния рентгеновского фотона свободным многоэлектронным атомом с открытой  $s$ -,  $p$ -,  $d$ - или  $f$ -оболочкой остова. Волновые функции начального и конечного состояний рассеяния получены в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока с учетом эффектов радиальной релаксации одноэлектронных состояний в поле остовных вакансий. Пример перехода к многоконфигурационному приближению для атома с  $^1S_0$ -термом основного состояния дан в работах авторов [21, 22] (учет меж-

болочечных корреляций при нерезонансном комптоновском рассеянии рентгеновского фотона атомами Ne и Ar).

Результаты тестового расчета абсолютных величин и формы дважды дифференциальных сечений рассеяния для атомов Ti и Fe (рис. 1, 2) носят предсказательный характер. Результаты расчета однократно дифференциальных сечений рассеяния (табл. 2) хорошо согласуются с результатами эксперимента.

Интенсивно исследуется (см., например, экспериментальные работы [15, 23–25]) процесс неупругого рассеяния фотона рентгеновского и гамма-диапазонов энергий атомом с незаполненной  $f$ -оболочкой ( $Z \geq 58$ ). В рамках нашей теории (см. выражение (29)) такие исследования в рентгеновском диапазоне энергий фотонов представляют самостоятельный интерес.

Следует ожидать, что новые высокоточные экспериментальные исследования нерезонансного комптоновского рассеяния рентгеновского фотона многоэлектронным атомом подтвердят некорректность импульсного приближения, но, тем не менее, лишней раз дадут обоснование применимости аналитической структуры (возникающей из принципа соответствия и требования инвариантности гамильтониана атома относительно калибровочных преобразований электромагнитного поля, требования замены оператора импульса  $n$ -электрона атома  $p_n \rightarrow p_n - (e/c)A_n$  [26])  $\hat{C}$ -оператора контактного перехода в его нерелятивистской форме. Следует также ожидать, что теория данной работы найдет свои приложения при интерпретации результатов будущих экспериментов, например, с рентгеновским лазером на свободных электронах (энергия падающего на атом фотона от 0.20 до 12 кэВ) [27, 28], в области исследований управляемого термоядерного синтеза [29, 30] и астрофизике [31, 32].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. R. H. Pratt, L. A. LaJohn, V. Florescu et al., *Radiat. Phys. Chem.* **79**, 124 (2010).
2. P. Eisenberger and P. M. Platzmann, *Phys. Rev. A* **2**, 415 (1970).
3. F. Biggs, L. B. Mendelsohn, and J. B. Mann, *Atom. Data Nucl. Data Tabl.* **16**, 201 (1975).
4. P. P. Kane, *Phys. Rep.* **218**, 67 (1992).
5. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, В. А. Явна, *ЖЭТФ* **128**, 698 (2005).

6. A. N. Hoppersky and A. M. Nadolinsky, *Phys. Rev. A* **77**, 022712 (2008).
7. A. N. Hoppersky, A. M. Nadolinsky, K. Kh. Ikoeva, and O. A. Khoroshavina, *J. Phys. B* **44**, 209801 (2011).
8. Р. Каразия, *Введение в теорию рентгеновских и электронных спектров свободных атомов*, Мокслас, Вильнюс (1987).
9. *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовица и И. Стиган, Наука, Москва (1979).
10. А. П. Юцис, А. Ю. Савукина, *Математические основы теории атома*, Минтис, Вильнюс (1973).
11. Ch. Froese Fischer, T. Brage, and P. Jönsson, *Computational Atomic Structure — An MCHF Approach*, Inst. Phys. Publ., Bristol and Philadelphia (1997).
12. F. Hund, *Z. Phys. A* **33**, 345 (1925).
13. L. B. Mendelsohn, F. Biggs, and J. B. Mann, *Chem. Phys. Lett.* **26**, 521 (1974).
14. P. Jaiswal and A. Shukla, *Phys. Rev. A* **75**, 022504 (2007).
15. A. Kumar, J. S. Shahi, S. Puri et al., *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **194**, 99 (2002).
16. P. Singh, D. Mehta, S. Kumar et al., *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **222**, 1 (2004).
17. R. D. Deslattes, E. G. Kessler (Jr.), P. Indelicato et al., *Rev. Mod. Phys.* **75**, 35 (2003).
18. P. P. Kane, L. Kissel, R. H. Pratt, and S. C. Roy, *Phys. Rep.* **140**, 75 (1986).
19. F. Gel'mukhanov and H. Ågren, *Phys. Rep.* **312**, 87 (1999).
20. A. N. Hoppersky and V. A. Yavna, *Scattering of Photons by Many-Electron Systems*, Springer, Berlin (2010).
21. A. N. Hoppersky, A. M. Nadolinsky, and S. A. Novikov, *Phys. Rev. A* **82**, 042710 (2010).
22. А. Н. Хоперский, А. М. Надолинский, К. Х. Икоева, О. А. Хорошавина, *ЖЭТФ* **140**, 844 (2011).
23. D. Schaupp, H. Czerwinski, F. Smend et al., *Z. Phys. A* **319**, 1 (1984).
24. A. G. Karydas and T. Paradellis, *J. Phys. B* **30**, 1893 (1997).
25. S. Kumar, V. Sharma, S. Kumar et al., *J. Appl. Phys.* **105**, 104909 (2009).
26. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1969).
27. L. Young, E. P. Kanter, B. Krässig et al., *Nature* **466**, 56 (2010).
28. P. Emma, R. Akre, J. Arthur et al., *Nature Photonics* **4**, 641 (2010).
29. J. D. Lindl, P. Amendt, R. L. Berger et al., *Phys. Plasmas* **11**, 339 (2004).
30. S. H. Glenzer and R. Redmer, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 1625 (2009).
31. B. A. Remington, R. P. Drake, and D. D. Ryutov, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 775 (2006).
32. B. A. Remington, *Plasma Phys. Control. Fusion* **47**, 191 (2005).