

**Compton photon scattering by an electrons of atom with an open shell**  
**Nadolinsky A.1, Ikoeva K.<sup>2</sup>**  
**Комптоновское рассеяние фотона электронами атома с открытой оболочкой**  
**Надолинский А. М.<sup>1</sup>, Икоева К. Х.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Надолинский Алексей Михайлович / Nadolinsky Alexey Mikhailovich – доктор физико-математических наук, профессор,

кафедра физики,

Ростовский государственный университет путей сообщения, г. Ростов–на–Дону;

<sup>2</sup>Икоева Кетино Хазбиевна / Ikoeva Ketino Khazbievna – старший преподаватель, кафедра математики и физики,

Юго-Осетинский государственный университет им. А. А. Тибилова, г. Цхинвал

**Аннотация:** в одноконфигурационном приближении Хартри-Фока вне рамок, традиционно используемых в литературе импульсного приближения, построена нерелятивистская квантовая теория нерезонансного комптоновского рассеяния фотона свободным многоэлектронным атомом с открытой оболочкой в основном состоянии. Представлены результаты расчета для атомов с открытой (Ti, Fe) и заполненной (Zn) 3d оболочкой остова.

**Abstract:** in one-configurational Hartree-Fock approximation outside the framework, traditionally used in the literature of the impulse approximation, constructed nonrelativistic quantum theory nonresonance photon Compton scattering by a free many-electron atom with an open shell of the ground state. Calculations results are presented for atoms with open (Ti, Fe) and filled (Zn) 3d shell of the core.

**Ключевые слова:** комптоновское рассеяние, функция Бесселя, конфигурационное смешивание, межоболочечные корреляции.

**Keywords:** Compton scattering, Bessel function, configurations mixing, intershell correlations.

Комптоновское нерезонансное (контактное; в представлении диаграмм Фейнмана в вершине взаимодействия сходятся четыре линии: падающего и рассеянного фотонов, вакансии и возбужденного электрона) рассеяние фотона многоэлектронным атомом – один из фундаментальных процессов в микромире

Амплитуда вероятности этого процесса в нерелятивистском приближении как матричный элемент оператора контактного перехода

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

в гамильтониане взаимодействия электромагнитного поля ( $A_n \equiv A(\mathbf{r}_n, 0)$ ) – оператор поля в представлении вторичного квантования,  $\mathbf{r}_n$  – радиус-вектор  $n$  – электрона атома) с электронами атома ( $N$  – число электронов в атоме,  $e$  – заряд электрона и  $m_e$  – его масса,  $c$  – скорость света в вакууме) традиционно рассматривается в импульсном приближении [1]. Однако, как показали, в частности, исследования авторов [2], в широких диапазонах энергий фотона и углов рассеяния импульсное приближение становится существенно некорректным. Так, в частности, к *переоценке* вкладов атомных оболочек в вероятность рассеяния.

В данной работе мы проводим обобщение теории работы [2] на случай свободного атома с *открытой*  $s$ ,  $p$ ,  $d$  или  $f$  оболочкой в основном состоянии. Исследованы абсолютные значения и форма сечений контактного рассеяния фотона атомами титана и железа с открытой 3d оболочкой остова и атомом цинка ( $^1S_0$ ) – атомом с полностью заполненной 3d оболочкой остова. Отметим, что атомы Ti и Fe имеют практическую ценность, например, как для астрофизики, так и как подгруппы биологически важных элементов.

Рассмотрен процесс нерезонансного комптоновского ( $\hbar\omega_2 < \hbar\omega_1$ ) рассеяния линейно поляризованного фотона  $n_1 l_1$  оболочкой атома вида:

$$\hbar\omega_1 + A \rightarrow B + \hbar\omega_2. \quad (2)$$

Здесь  $\hbar\omega_1(\hbar\omega_2)$  – циклическая частота падающего (рассеянного) фотона,  $A$  и  $B$  – соответственно начальное и конечное состояния рассеяния. Волновые функции начального и конечного состояний

рассеяния получены в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока с учетом эффектов радиальной релаксации одноэлектронных состояний атома в поле остовных вакансий.

Построенная в данной работе квантовая теория контактного комптоновского рассеяния фотона свободным многоэлектронным атомом с *открытой*  $s$ ,  $p$ ,  $d$  или  $f$  оболочкой остова позволила установить следующее. 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.

При этом переход от импульсного приближения к нашей теории сопровождается заметным *перераспределением* вероятности рассеяния между оболочками. Физической причиной такого перераспределения вероятности рассеяния оказывается тот факт, что импульсное приближение по построению не учитывает, прежде всего, (а) бесконечной мультипольности ( $l$  от 0 до  $\infty$ )  $\varepsilon l$  состояний сплошного спектра по каждому  $n_1 l_1 \rightarrow \varepsilon l$  каналу рассеяния и (б) энергетической отделенности порогов ионизации  $n_1 l_1$  оболочек остова.

Установлено, что 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. В данном случае переоцененная в импульсном приближении вероятность рассеяния перераспределяется на валентные и субвалентные оболочки атома.

Тем самым, переход от импульсного приближения к нашей теории сопровождается увеличением «окна прозрачности» (по отношению к эффекту неупругого рассеяния фотона атомом) в окрестности линии упругого рассеяния – расширяется интервал энергий  $\Omega_2$ , где заметно уменьшается вероятность регистрации рассеянного рентгеновского фотона.

Как и следовало ожидать, результаты импульсного приближения превышают результаты нашей теории. Расхождения между теорией и экспериментом в абсолютных значениях сечения 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), кратного возбуждения/ионизации оболочек атома (кратное ландсберг–мандельштам–рамановское и (или) комптоновское рассеяние), мультиплетного расщепления и конфигурационного смешивания в состояниях рассеяния.

### Литература

1. Pratt R. H., LaJohn L. A., Florescu V., Surič T., Chatterjee B. K., Roy S. C. Compton scattering revisited. Radiat. Phys. Chem., 2010, V. 79, P. 124–131.
2. Hopersky A. N., Nadolinsky A. M. Nonrelativistic Quantum Theory of the Contact Inelastic Scattering of an X-Ray Photon by an Atom. Phys. Rev. A, 2008, V. 77, P. 2712–2716.