

МЕЖБОЛОЧЕЧНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ ПРИ НЕРЕЗОНАНСНОМ КОМПТОНОВСКОМ РАССЕЯНИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ФОТОНА АТОМОМ

*А. Н. Хоперский**, *А. М. Надолинский*, *К. Х. Икьева*, *О. А. Хорошавина*

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

Поступила в редакцию 26 декабря 2010 г.

На примере атома Ag теоретически исследована роль эффекта межболочечных корреляций при нерезонансном комптоновском рассеянии рентгеновского фотона свободным многоэлектронным атомом. Результаты расчета носят предсказательный характер. Развитый математический формализм носит общий характер и применим к широкому набору элементов таблицы Менделеева, для которых остается корректным описание волновых функций состояний рассеяния в нерелятивистском приближении Хартри – Фока.

1. ВВЕДЕНИЕ

Теоретические и экспериментальные исследования нерезонансного комптоновского рассеяния рентгеновских мягкого и жесткого диапазонов энергий (от 300 эВ до 1.5 МэВ) фотона свободным атомом [1, 2] позволяют получать фундаментальную информацию о рассеивающем объекте, в частности, о природе и роли многочастичных эффектов и их квантовой интерференции. Такие исследования широко востребованы современной физикой. В частности, они важны в контексте проблем осуществления управляемого термоядерного синтеза, создания и применения рентгеновского лазера на свободных электронах, физики плазмы, поверхности, ионизирующих излучений и астрофизики.

Программа исследования корреляционных, не локально-обменных и динамических эффектов в состояниях нерезонансного комптоновского рассеяния фотона атомом в рамках модификаций широко используемых в литературе приближения некогерентной функции рассеяния и импульсного приближения представлена в работах [3, 4]. В работе авторов [5] предложена нерелятивистская квантовая теория контактного нерезонансного комптоновского и резонансного ландсберг-манделштам-рамановского рассеяния рентгеновского фотона многоэлектронным атомом вне рамок этих приближений.

В частности, эта теория не содержит ограничения $\eta = qa_0/Z \gg 1$, присущего импульсному приближению [6]. Здесь q — модуль вектора переданного атому импульса, a_0 — радиус Бора, Z — заряд ядра атома. Так, для атома аргона при исследуемых в данной работе энергии падающего фотона 10 кэВ и угле рассеяния 90° имеем $\eta \approx 0.21$ и импульсное приближение становится формально некорректным. Теория и методы расчета работы [5] позволяют осуществлять указанную программу. В работе [5] исследована роль эффектов радиальной релаксации электронных оболочек атомного остатка в поле глубокой вакансии для энергий падающего фотона ($\hbar\omega_1$) в области порога ионизации $1s$ -оболочки (I_{1s}).

В данной работе мы исследуем абсолютные величины и форму дважды дифференциального сечения нерезонансного комптоновского рассеяния в запороговой ($\hbar\omega_1 > I_{1s}$) области рассеяния. При таких энергиях падающего фотона основной вклад в сечение рассеяния дают валентные и субвалентные оболочки атома [7, 8]. Известно, что при возбуждении/ионизации малоэлектронной субвалентной оболочки атома проявляется эффект корреляционной связи этой оболочки с соседними многоэлектронными оболочками [9, 10]. Этот эффект детально исследован для процесса нерезонансного комптоновского рассеяния фотона и электрона (и других заряженных частиц) многоэлектронным атомом в рамках формализма плотности обобщенных сил осцилляторов (ОСО) и приближения случайных фаз с обме-

*E-mail: hopersky_vm_1@rgups.ru

ном (ПСФО) [10–13]. В данной работе мы не устанавливаем каких-либо новых физических явлений вне рамок уже изученного в формализме ОСО и ПСФО эффекта межоболочечных корреляций. Мы преследуем две цели. Первая — в рамках теории авторов работы [5] развить математический формализм для учета эффекта межоболочечных корреляций при нерезонансном комптоновском рассеянии фотона многоэлектронным атомом. Вторая — исследовать степень проявления этого эффекта при нерезонансном комптоновском рассеянии жесткого рентгеновского фотона многоэлектронным атомом. В качестве объекта исследования взят атом аргона (Ag; $Z = 18$, конфигурация основного состояния $[0] = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 ({}^1S_0)$). Выбор объекта исследования обусловлен двумя обстоятельствами. Во-первых, атом Ag — простая многоэлектронная система с 1S_0 -термом основного состояния. Во-вторых, проведенные ранее теоретические [14] и экспериментальные [15, 16] исследования демонстрируют принципиально важную роль межоболочечных корреляций в формировании околопороговой структуры сечения фотоионизации субвалентной $3s$ -оболочки атома Ag. Однако атом Ag взят нами не более, как пример, поскольку подобные результаты устанавливаются для субвалентных и валентных оболочек большого числа атомов с зарядом ядра вплоть до $Z = 56$ (атом Ba) [9, 10]. Таким образом, развитый (в представлении смешивания конфигураций) в данной работе нерелятивистский метод учета межоболочечных корреляций при нерезонансном комптоновском рассеянии фотона многоэлектронным атомом носит общий характер. В самом деле, при соответствующей конкретизации термов начального и конечного состояний рассеяния и смешиваемых конфигураций в амплитуде вероятности перехода теории [5] метод не ограничен тем или иным элементом таблицы Менделеева, а также, например, тем или иным многоэлектронным атомным ионом.

2. ТЕОРИЯ

Рассмотрим процесс нерезонансного (контактно-го; по оператору

$$\hat{Q} \sim \sum_{i=1}^N (\mathbf{A}_i \cdot \mathbf{A}_i),$$

где N — число электронов в атоме и \mathbf{A} — оператор электромагнитного поля в представлении вторичного квантования) комптоновского рассеяния

неполяризованного фотона $n_1 l_1$ -оболочкой атома с 1S_0 -термом основного состояния:

$$\hbar\omega_1 + [0] \rightarrow n_1 l_1^{4l_1+1} \varepsilon l ({}^1L_J) + \hbar\omega_2, \quad (1)$$

где $n_1 l_1 \leq f$, $\varepsilon l > f$, ω_1 (ω_2) — циклическая частота падающего (рассеянного) фотона, f — уровень Ферми (совокупность квантовых чисел валентной оболочки атома) и в схеме LS -связи определен результирующий 1L_J -терм ($J = L$) открытой $n_1 l_1$ -оболочки остова и возбужденного εl -электрона сплошного спектра. В формуле (1) и далее мы не записываем заполненные оболочки. При рассеянии, например, линейно поляризованного фотона полученные в данной работе результаты модифицируются заменой в выражении для сечения рассеяния поляризационного множителя

$$\xi = \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \theta)$$

на $(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2$, где θ — угол рассеяния (угол между волновыми векторами падающего и рассеянного фотонов), \mathbf{e}_1 (\mathbf{e}_2) — вектор поляризации падающего (рассеянного) фотона.

В атоме Ag субвалентная $3s$ -оболочка и валентная $3p$ -оболочка энергетически значительно отделены от внутренних $1s$ -, $2s$ - и $2p$ -оболочек (например, $I_{2p} - I_{3p} \approx 235$ эВ). Это позволяет пренебречь корреляционным влиянием $3s$ - и $3p$ -оболочек на внутренние оболочки. Как результат, волновые функции конечных состояний рассеяния $ns\varepsilon l$ ($n = 1, 2$) и $2p^5\varepsilon l$ рассматриваем в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока. Тогда дважды дифференциальные сечения нерезонансного комптоновского рассеяния неполяризованного фотона ns - ($n = 1, 2$) и $2p$ -оболочками атома Ag в атомной системе единиц ($e = \hbar = m_e = 1$, e и m_e — заряд и масса электрона) принимают вид [5]

при $ns \rightarrow \varepsilon l$ ($n = 1, 2$):

$$\sigma_{ns} = \alpha\beta \int_0^\infty M(\varepsilon) G_{ns}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (2)$$

$$M(\varepsilon) = \sum_{l=0}^\infty [l] R_l^2(ns, \varepsilon l), \quad (3)$$

$$R_l(ns, \varepsilon l) = \int_0^\infty P_{ns}(r) j_l(qr) P_{\varepsilon l}(r) dr, \quad (4)$$

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

$$q = \frac{\omega_1}{c} \sqrt{1 + \beta^2 - 2\beta \cos \theta}, \quad (6)$$

при $2p \rightarrow \varepsilon l$:

$$\sigma_{2p} = 3\alpha\beta \int_0^\infty L(\varepsilon)G_{2p}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (7)$$

$$L(\varepsilon) = \sum_{l=0}^\infty (l+1) [R_l^2(2p, \varepsilon(l+1)) + R_{l+1}^2(2p, \varepsilon l)], \quad (8)$$

$$R_{l_1}(2p, \varepsilon l_2) = \int_0^\infty P_{2p}(r)j_{l_1}(qr)P_{\varepsilon l_2}(r) dr.$$

В выражениях (2)–(8)

$$\frac{d^2 \sigma^{(nl)}}{d\omega_2 d\Omega} \equiv \sigma_{nl}, \quad \alpha = 2\xi r_0^2,$$

r_0 — классический радиус электрона, Ω — пространственный угол вылета рассеянного фотона, $\beta = \omega_2/\omega_1$, $[l] = 2l + 1$, $P_{\varepsilon l}$ — радиальная часть волновой функции εl -электрона, $\gamma_b = \Gamma_{beam}/2\sqrt{\ln 2}$, Γ_{beam} — ширина на половине максимума инструментальной G -функции Гаусса–Лапласа, $\Delta_{nl} = \omega_1 - \omega_2 - I_{nl}$, j_l — сферическая функция Бесселя первого рода порядка l , q — модуль вектора рассеяния (переданного атому импульса), c — скорость света в вакууме.

При рассматриваемых в данной работе энергиях падающего фотона $\omega_1 = 5$ кэВ и 10 кэВ вероятность прямого перехода в конечное состояние рассеяния $3p^5 \varepsilon l$ практически в три раза превышает вероятность перехода в промежуточное виртуальное состояние рассеяния $3s \varepsilon l'$. Это позволяет пренебречь корреляционным влиянием $3s$ -оболочки на $3p$ -оболочку. Как результат, волновую функцию конечного состояния рассеяния $3p^5 \varepsilon l$ рассматриваем в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока. Тогда дважды дифференциальное сечение нерезонансного комптоновского рассеяния неполяризованного фотона $3p$ -оболочкой атома Ag принимает вид (7) с заменой $2p$ на $3p$.

Обратное корреляционное влияние многоэлектронной $3p$ -оболочки на малоэлектронную $3s$ -оболочку учтем в первом порядке квантовомеханической теории возмущений и волновую функцию конечного состояния рассеяния $3s \varepsilon l$ построим в представлении смешивания конфигураций:

$$\phi_l = |3s \varepsilon l\rangle + \int_0^\infty Q_l \frac{dx}{z + i\lambda}, \quad (9)$$

$$Q_l = (-1)^l \sum_{\nu=l\pm 1} V_{l\nu} |3p^5 x l'\rangle, \quad (10)$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{z + i\lambda} = P \frac{1}{z} - i\pi \delta(z). \quad (11)$$

При $l = 0$ сумма в (10) содержит лишь слагаемое с $l' = 1$. В формулах (9) и (11) введены следующие величины: $z = x_0 - x$, «блуждающий» полюс подынтегральной функции $x_0 = \omega_1 - \omega_2 - I_{3p}$, P — символ главного значения интеграла в смысле Коши, δ — дельта-функция Дирака. В (10) матричный элемент \hat{H} -оператора электростатического смешивания конфигураций ($T_i \equiv L_i S_i$)

$$C_1 = l_1^{N_1-1} l_2^{N_2} (l_3^{N_3}, T_3), T, \quad (12)$$

$$C_2 = (l_1^{N_1} l_2^{N_2-1} (l_3^{N_3-1}, T_3'), T_0) x l' T \quad (13)$$

определен в схеме LS -связи конкретизацией общего результата [17] теории неприводимых тензорных операторов для $V = \langle C_1 | \hat{H} | C_2 \rangle$. Именно, для $l_1 = 0$, $l_2 = 1$, $l_3 = l$, $N_1 = 2$, $N_2 = 6$, $N_3 = 1$, $T = {}^1l$ из выражений (12) и (13) получаем:

$$V_{l\nu} = a_{l\nu} F_1(3p \varepsilon l; 3s x l') + b_{l\nu} G_l(3p \varepsilon l; x l' 3s), \quad (14)$$

$$a_{l\nu} = (-1)^g \sqrt{\frac{\max(l, l')}{3[l]}}, \quad (15)$$

$$b_{l\nu} = \frac{2}{[l]} (1 \parallel C^{(l)} \parallel l'). \quad (16)$$

В выражениях (14)–(16) F_1 и G_l — прямой и обменный интегралы электростатического смешивания, $l + l' + 1 = 2g$ — целое число, а также выполнено триадное условие $\{ll'1\}$. В частности, при $l = 1$ и $l' = g = 2$ в случае смешивания конфигураций $3s \varepsilon p$ и $3p^5 x d$ из (15) и (16) следует известный [10] в теории M_1 -фотоионизации атома с 1S_0 -термом основного состояния результат $a_{12} = \sqrt{2}/3$, $b_{12} = -2\sqrt{2}/3$.

Дважды дифференциальное сечение нерезонансного комптоновского рассеяния неполяризованного фотона $3s$ -оболочкой атома Ag (модифицированное по сравнению с выражением из работы [5]) принимает вид

$$\sigma_{3s} = \alpha\beta \int_0^\infty A(\varepsilon)G_{3s}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (17)$$

$$A(\varepsilon) = \sum_{l=0}^\infty [l] |R_l(3s, \varepsilon l) + D_l|^2, \quad (18)$$

$$D_l = \int_0^\infty \psi_l \frac{dx}{z + i\lambda}, \quad (19)$$

$$\psi_l = \sum_{\nu=l\pm 1} (1 \parallel C^{(l)} \parallel l') V_{l\nu} R_l(3p, x l'). \quad (20)$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ОБСУЖДЕНИЕ

Расчеты проведены для энергий падающего фотона $\omega_1 = 5$ кэВ и 10 кэВ. Для ширины инструментальной функции Гаусса–Лапласа принято характерное для современного эксперимента по нерезонансному комптоновскому рассеянию [18] значение $\Gamma_{beam} = 25$ эВ. Это значение намного меньше ширин рассчитанных комптоновских профилей (200–400 эВ) сечений рассеяния. В этом случае информация о роли межоболочечных корреляций практически не искажается из-за величины инструментального разрешения. С другой стороны, принятое значение Γ_{beam} превышает ширины областей ($\Delta\omega$ [эВ]) возникновения резонансных линий ландсберг-мандельштам-рамановского рассеяния — аналогов резонансных линий M_1 ($\Delta\omega \approx 20$ [19]) и M_{23} ($\Delta\omega \sim 10^{-16}$ [20]) — спектров фотопоглощения атома Ag. Это позволяет ограничиться учетом в выражении (1) лишь сплошного спектра конечных состояний рассеяния. Такое ограничение тем более допустимо, что соответствующие резонансные линии подавлены в $\Gamma_{beam}/\Gamma_{nl}$ раз, где, например, естественные ширины распада вакансий Γ_{nl} [эВ] = 0.136 ($2p$, [21]), 0.137 ($3s$, [22]), $\sim 10^{-17}$ ($3p$, [20]). Мы также пренебрегли эффектом спин-орбитального расщепления валентной $3p_{1/2,3/2}$ -оболочки остова (константа расщепления $\delta_{SO} \approx 0.18$ эВ [17]). При расчете параметра Δ_{nl} в функции Гаусса–Лапласа для энергий порогов ионизации оболочек остова приняты экспериментальные значения [17, 23]: I_{nl} [эВ] = 3206.14 ($1s$), 326.32 ($2s$), 249.52 ($2p$), 29.24 ($3s$), 15.85 ($3p$). Здесь для $2p_{1/2,3/2}$ - и $3p_{1/2,3/2}$ -оболочек взяты средние значения.

При расчете главного значения интеграла в формуле (19) использована параболическая интерполяция числителя подынтегральной функции на отрезке $[a, b]$, $a = x_0 - \mu$, $b = x_0 + \mu$, $\mu \sim (I_{3s} - I_{3p}) \cdot 10^{-2}$. При этом получаем

$$P \int_0^\infty \varphi dx \rightarrow f(a) - f(b) + \left(\int_0^a + \int_b^\infty \right) \varphi dx, \quad (21)$$

$$\varphi = f(x)(x_0 - x)^{-1}. \quad (22)$$

Выбор μ в (21) определяется компьютерным экспериментом: на отрезке $[a, b]$ должна воспроизводиться функция $f(x)$ (выбор μ_1) и изменение μ не должно приводить к изменению величины интеграла (выбор $\mu \leq \mu_1$). Формально при $\mu \rightarrow 0$ восстанавливается аналитическое представление главного значе-

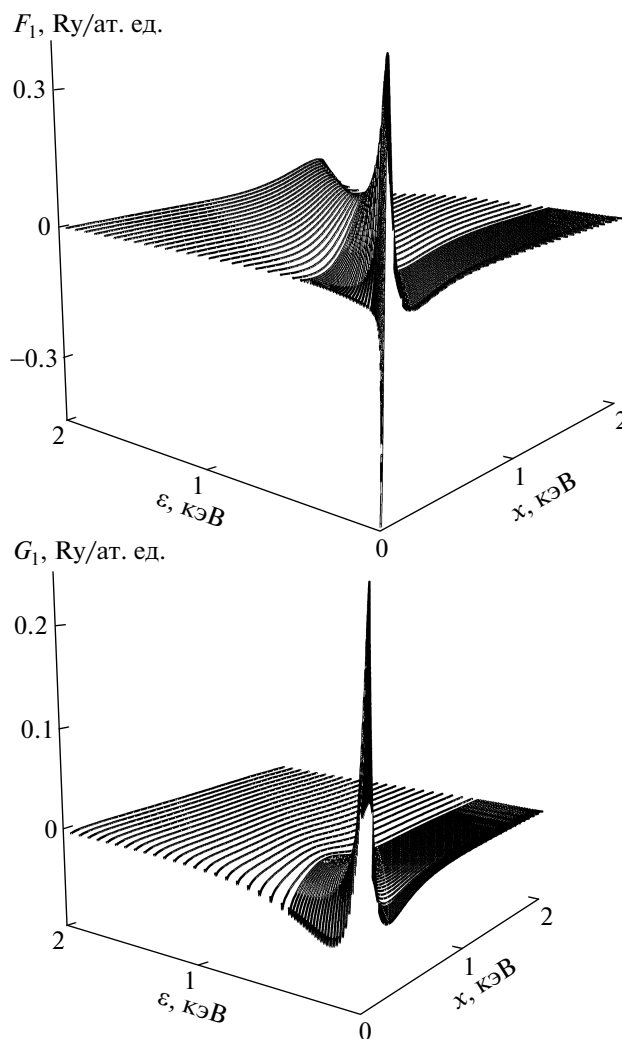


Рис. 1. Значения интегралов электростатического смешивания $F_1(3p\epsilon p; 3sxd)$ и $G_1(3p\epsilon p; xd3s)$ для частичного канала $3s\epsilon p$ нерезонансного комптоновского рассеяния фотона атомом Ag

ния интеграла в смысле Коши. В силу сингулярной структуры функции (22) эффект электростатического смешивания конфигураций $3s\epsilon l$ и $3p^5 x l'$ наиболее сильно проявляется при малых значениях энергий ϵl и $x l'$ электронов сплошного спектра. Это утверждение на рис. 1 иллюстрируют результаты расчета интегралов F_1 и G_1 для частичного канала рассеяния $3s\epsilon p$ в сечении (17): при $\epsilon, x \in (0, 500)$ эВ величины этих интегралов сильно изменяются.

При расчете сечений рассеяния (2), (7) и (17) учтены гармоники l от 0 до 25. Учет высших ($l > 25$) гармоник изменяет результаты не более, чем на 0.1%. Это утверждение иллюстрируют данные таблицы, где приведены относительные вклады

Таблица. Относительные вклады l -гармоник в дважды дифференциальное сечение нерезонансного комптоновского рассеяния рентгеновского фотона атомом Ag по каналам рассеяния $3s\varepsilon l$ и $3p^5\varepsilon l$.

$\theta = 90^\circ, \Gamma_{beam} = 25 \text{ эВ}$

$\hbar\omega_1$, кэВ	l	η_{sl} , %	η_{pl} , %
5	0	6	2
	1	22	13
	2	61	50
	3	7	23
	4	2	9
Σ		98	97
10	0	2	1
	1	9	9
	2	13	11
	3	30	25
	4	25	31
	5	14	16
6	6	5	
Σ		99	98

Примечание. $\eta_{sl} = (\sigma_{3s}^{(l)} / \sigma_{3s}) \cdot 100\%$, σ_{3s} — максимальное значение сечения (17), $\sigma_{3s}^{(l)}$ — максимальное значение сечения (17) для фиксированной l -гармоники из (18).

l -гармоник по каналам рассеяния $3s\varepsilon l$ и $3p^5\varepsilon l$ в зависимости от энергии падающего фотона. Видим, что с увеличением ω_1 процесс нерезонансного комптоновского рассеяния становится все более мультипольным — к участию в рассеянии подключаются все более высокие гармоники, в силу того что с увеличением q из (6) начинают давать вклад соответствующие высоким гармоникам функции Бесселя. Таким образом, в сумме (18) для канала рассеяния $3s\varepsilon l$ гармоники с $l > 10$ практически подавлены по сравнению с гармониками с $l \leq 10$. Поэтому корреляционный интеграл D_l рассчитан лишь для значений l от 0 до 10 (для $l > 10$ принято значение $D_l = 0$). На рис. 2 приведены результаты расчета функции межоболочечных корреляций:

$$\rho = [(\sigma^{MK} - \sigma^{HF}) / \sigma_{max}^{HF}] \cdot 100\%, \quad (23)$$

$$\sigma = \sum_{nl \leq f} \sigma_{nl}. \quad (24)$$

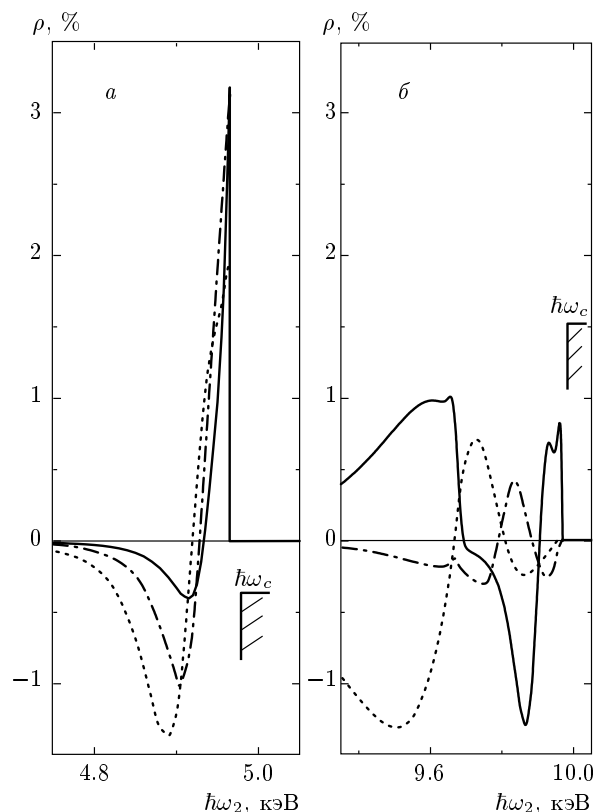


Рис. 2. Графики функции межоболочечных корреляций (23) для атома Ag. Энергии падающего фотона $\hbar\omega_1 = 5$ (а), 10 (б) кэВ, ширина спектрального разрешения $\Gamma_{beam} = 25 \text{ эВ}$. Углы рассеяния: 60° (сплошные кривые), 90° (штрихпунктирные), 120° (пунктирные). Порог обрыва комптоновского профиля $\hbar\omega_c = \hbar\omega_1 - I_{3p}$

Здесь введены следующие индексы: «HF» — расчет полного сечения комптоновского рассеяния (24) в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока (ХФ), «max» — максимальное (фиксированное для каждого угла рассеяния) значение полного ХФ-сечения рассеяния, «MK» — в канале $3s\varepsilon l$ полного сечения рассеяния учтены межоболочечные корреляции по формулам (19) и (20). Рисунок 2 демонстрирует два эффекта. Первый — при $\omega_1 = 5 \text{ кэВ}$ межоболочечные корреляции приводят к перераспределению ХФ-интенсивности рассеяния в область максимумов и порогов обрыва комптоновских профилей. Величина этого перераспределения оказалась приблизительно 3%. При увеличении энергии падающего фотона до 10 кэВ роль межоболочечных корреляций заметно уменьшается ($\sim 1\%$), а характер перераспределения интенсивности рассеяния значительно усложняется. Последнее обстоятельство обу-

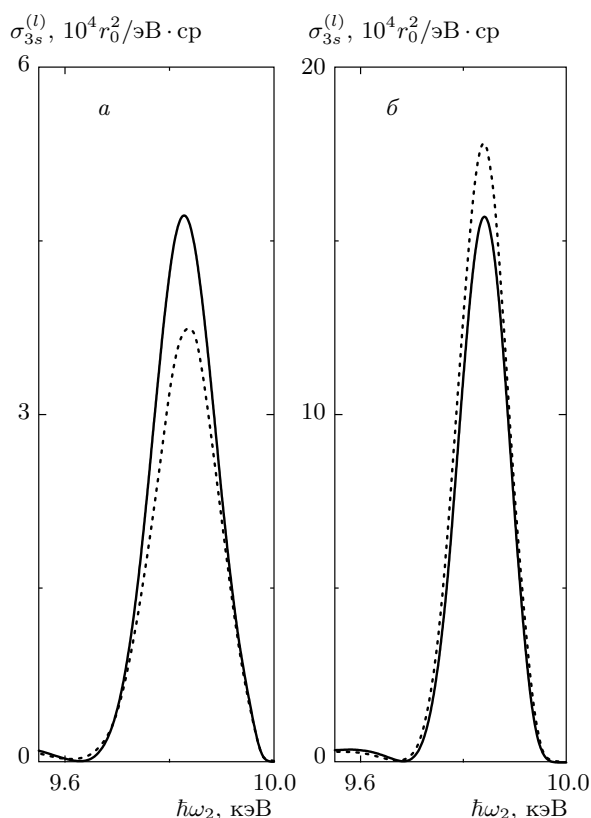


Рис. 3. Дважды дифференциальные сечения нерезонансного комптоновского рассеяния неполяризованного рентгеновского фотона атомом Ag по $l = 1$ (а), 3 (б) гармоникам в частичном канале рассеяния $3s\epsilon l$. Теоретические расчеты данной работы: сплошные кривые — одноконфигурационное приближение Хартри–Фока; пунктирные — с учетом межоболочечных корреляций. $\hbar\omega_1 = 10$ кэВ, $\theta = 90^\circ$, $\Gamma_{beam} = 25$ эВ

словлено прежде всего участием в рассеянии все более высоких l -гармоник. Второй эффект заключается в том, что с увеличением как угла рассеяния, так и энергии падающего фотона область влияния межоболочечных корреляций расширяется. Этот результат воспроизводит тот известный [1, 17] факт, что с увеличением угла рассеяния и энергии падающего фотона комптоновские профили расширяются. Отметим, что установленная незначительная величина влияния эффекта межоболочечных корреляций на полное сечение (24) обусловлена, прежде всего, двумя обстоятельствами. Во-первых, при $\omega_1 = 5$ кэВ и 10 кэВ влияние этого эффекта по каналу рассеяния $3s\epsilon l$ эффективно «погашается» большими значениями сечения рассеяния по каналу $3p^5\epsilon l$. Во-вторых, в l -парциальных каналах рассеяния $3s\epsilon l$ эффект меж-

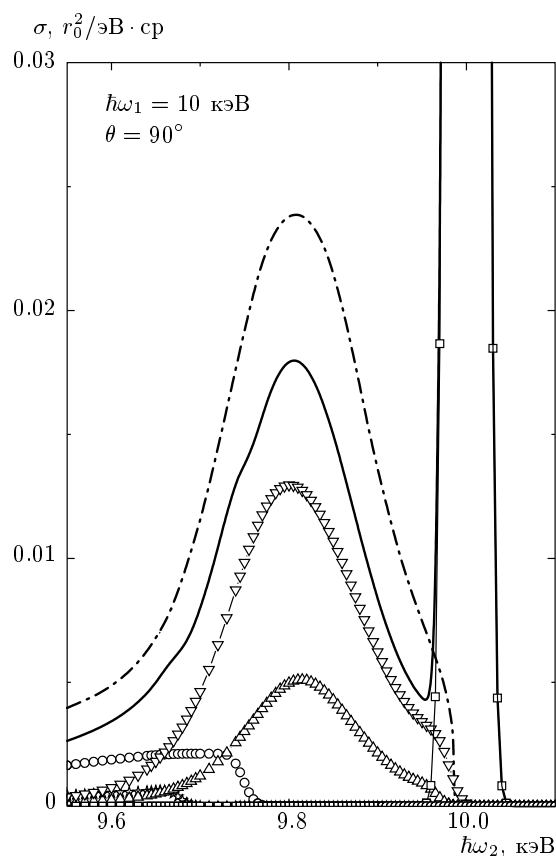


Рис. 4. Дважды дифференциальное сечение рассеяния неполяризованного рентгеновского фотона атомом Ag при $\hbar\omega_1 > I_{1s}$. Теоретические расчеты данной работы: вклады в нерезонансное комптоновское рассеяние переходов $2s \rightarrow \epsilon l$ (\star), $2p \rightarrow \epsilon l$ (\circ), $3s \rightarrow \epsilon l$ (Δ), $3p \rightarrow \epsilon l$ (∇); вклад ($\sigma_{max} = 1.007r_0^2/\text{эВ}\cdot\text{ср}$) томсоновского и рэлеевского рассеяния (\square); сплошная кривая — полное теоретическое сечение рассеяния с учетом эффекта межоболочечных корреляций. Штрихпунктирная кривая — результат импульсного приближения (по табличным данным работы [7]). $\Gamma_{beam} = 25$ эВ

оболочечных корреляций достигает практически на порядок больших величин. В самом деле, например, для $\omega_1 = 10$ кэВ и $\theta = 90^\circ$ (рис. 3) учет этого эффекта в области максимумов парциальных комптоновских профилей приблизительно на 20% понижает ХФ-сечение для $l = 1$ и приблизительно на 12% повышает ХФ-сечение для $l = 3$. Однако такая разнонаправленность влияния корреляций и распределение интенсивности рассеяния по все большему числу l -гармоник приводят к дополнительному «гашению» эффекта изменения ХФ-сечения по каналу рассеяния $3s\epsilon l$.

На рис. 4 дано сравнение результатов расчета полного сечения рассеяния (24) с результатами импульсного приближения, полученными нами по табличным данным работы [7]. При этом дважды дифференциальное сечение упругого томсоновского и рэлеевского (электронами атома) рассеяния [24, 25] с учетом широкой иерархии многочастичных эффектов рассчитано методами работы [26]. Видим, что импульсное приближение дает качественное, но не количественное (в области максимума комптоновского профиля различие составляет приблизительно 25 %) согласие с результатами нашей теории. Вспомним (см. Введение), что при данных значениях ω_1 и θ импульсное приближение формально некорректно. Высокая точность современного эксперимента по исследованию процесса рассеяния фотона атомом (погрешность измерения сечения около 2 % [27] и спектральное разрешение по энергии рассеянного фотона вплоть до 70 мэВ [28, 29]), тем не менее, еще не дает возможности «увидеть» эффект межоболочечных корреляций, величина которого при экспериментальном спектральном разрешении $\Gamma_{beam} = 25$ эВ не превышает 1 %. Таким образом, с методологической точки зрения одноконфигурационное приближение Хартри–Фока при указанных погрешности измерений и спектральном разрешении остается вполне надежным методом расчета абсолютных величин и формы сечения нерезонансного комптоновского рассеяния высокоэнергетического рентгеновского фотона свободным многоэлектронным атомом.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках нерелятивистской квантовой теории авторов [5] развит математический формализм, позволяющий учитывать межоболочечные корреляции при нерезонансном комптоновском рассеянии рентгеновского фотона свободным многоэлектронным атомом. На примере атома Ag получено, что при энергиях падающего фотона 5 кэВ и 10 кэВ (превышающих энергии порогов ионизации остовных оболочек) и для исследованного диапазона углов рассеяния от 60° до 120° эффект межоболочечных корреляций изменяет полное дважды дифференциальное сечение нерезонансного комптоновского рассеяния одноконфигурационного приближения Хартри–Фока на 1–3 %. Установлено, что изменение энергии падающего фотона приводит к изменению степени участия парциальных l -симметрий электронов сплошного спектра в процессе рассеяния. Уста-

новлено также, что эффект межоболочечных корреляций по-разному влияет на парциальные l -сечения рассеяния в канале рассеяния $3s\epsilon l$. Эти два факта качественно воспроизводят физические результаты, полученные в формализме ОСО и ПСФО при исследовании нерезонансного комптоновского рассеяния фотона и электрона многоэлектронным атомом [10–13] и придают теоретическому описанию динамики межоболочечных корреляций достаточно сложный характер. Следует ожидать, что роль этого эффекта в наблюдаемых спектрах рассеяния может значительно возрасти по мере уменьшения энергии падающего фотона. В самом деле, при уменьшении ω_1 ширины комптоновских профилей субвалентных и валентных оболочек атома уменьшаются и возрастает степень энергетического «разрешения» этих профилей. Как результат, эффект «гашения» сечения рассеяния фотона субвалентной оболочкой сечением рассеяния фотона валентной оболочкой уменьшается. При уменьшении ω_1 уменьшается и роль высоких l -гармоник в канале рассеяния фотона $n_1 l_1^{4l_1+1} \epsilon l$ субвалентной $n_1 l_1$ -оболочкой в (1). В этом случае спектральное проявление эффекта межоболочечных корреляций будет определяться, в основном, динамикой l -гармоник, ближайших к гармонике l_1 . Следует также ожидать, что создание перестраиваемого в широком диапазоне частот излучения рентгеновского лазера на свободных электронах [30–32] с генерацией фотонов энергии до 12.4 кэВ (длина волны около 1.0 \AA) сделает возможным детальное и высокочувствительное экспериментальное наблюдение эффекта межоболочечных корреляций при нерезонансном комптоновском рассеянии фотона свободным многоэлектронным атомом.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. P. Kane, Phys. Rep. **218**, 67 (1992).
2. R. H. Pratt, L. A. LaJohn, V. Florescu et al., Radiat. Phys. Chem. **79**, 124 (2010).
3. J. P. J. Carney and R. H. Pratt, Phys. Rev. A **62**, 012705 (2000).
4. T. Surič, Radiat. Phys. Chem. **75**, 1646 (2006).
5. A. N. Hopersky and A. M. Nadolinsky, Phys. Rev. A **77**, 022712 (2008).
6. P. Eisenberger and P. M. Platzmann, Phys. Rev. A **2**, 415 (1970).
7. F. Biggs, L. B. Mendelsohn, and J. B. Mann, Atom. Data Nucl. Data Tables **16**, 201 (1975).

8. P. Jaiswal and A. Shukla, *Phys. Rev. A* **75**, 022504 (2007).
9. М. Я. Амусья, В. К. Иванов, *УФН* **152**, 185 (1987).
10. M. Ya. Amusia and N. A. Cherepkov, *Case Stud. Atom. Phys.* **5**, 47 (1975).
11. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, Z. Felfli, and A. Z. Msezane, *Phys. Rev. A* **64**, 032711 (2001).
12. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, Z. Felfli, and A. Z. Msezane, *Phys. Rev. A* **65**, 062705 (2002).
13. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, Z. Felfli, and A. Z. Msezane, *Surf. Rev. Lett.* **9**, 1155 (2002).
14. М. Я. Амусья, В. К. Иванов, Н. А. Черепков, Л. В. Чернышева, *ЖЭТФ* **66**, 1537 (1974).
15. M. J. Lynch, J. L. Gardner, K. Codling, and G. V. Marr, *Phys. Lett. A* **43**, 237 (1973).
16. R. G. Houlgate, J. B. West, K. Codling, and G. V. Marr, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **9**, 205 (1976).
17. Р. Каразия, *Введение в теорию рентгеновских и электронных спектров свободных атомов*, Мокслас, Вильнюс (1987).
18. S. Huotari, K. Hämäläinen, S. Manninen et al., *J. Phys. Chem. Sol.* **62**, 2205 (2001).
19. O. Wilhelmi, G. Mentzel, B. Magel et al., *Phys. Lett. A* **228**, 283 (1997).
20. H. Katori and F. Shimizu, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3545 (1993).
21. O. P. Sairanen, A. Kivimaki, E. Nommiste et al., *Phys. Rev. A* **54**, 2834 (1996).
22. A. Kikas, S. J. Osborne, A. Ausmees et al., *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **77**, 241 (1996).
23. R. D. Deslattes, E. G. Kessler (Jr.), P. Indelicato et al., *Rev. Mod. Phys.* **75**, 35 (2003).
24. P. P. Kane, L. Kissel, R. H. Pratt, and S. C. Roy, *Phys. Rep.* **140**, 75 (1986).
25. F. Gel'mukhanov and H. Ågren, *Phys. Rep.* **312**, 87 (1999).
26. A. N. Hopersky, V. A. Yavna, and V. A. Popov, *J. Phys. B* **29**, 461 (1996).
27. M. Jung, R. W. Dunford, D. S. Gemmell et al., *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1596 (1998).
28. B. P. Xie, L. F. Zhu, K. Yang et al., *Phys. Rev. A* **82**, 032501 (2010).
29. L. F. Zhu, L. S. Wang, B. P. Xie et al., *J. Phys. B* **44**, 025203 (2011).
30. L. Young, E. P. Kanter, B. Krässig et al., *Nature* **466**, 56 (2010).
31. N. Berrah, J. Bozek, J. T. Costello et al., *J. Mod. Opt.* **57**, 1015 (2010).
32. P. Emma, R. Akre, J. Arthur et al., *Nature Photonics* **4**, 641 (2010).