На правах рукописи

Cieres

Икоева Кетино Хазбиевна

# КОМПТОНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ ФОТОНА ЭЛЕКТРОНАМИ АТОМА, АТОМНОГО ИОНА И ЛИНЕЙНОЙ МОЛЕКУЛЫ

01.04.05 — Оптика

# ΑΒΤΟΡΕΦΕΡΑΤ

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Воронеж – 2018

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Ростовский государственный университет путей сообщения» (ФГБОУ ВО РГУПС)

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, доцент Надолинский Алексей Михайлович		
Официальные оппоненты:	Дербов Владимир Леонардович, доктор физико- математических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», кафедра «Теоретическая физика», профессор		
	Иванов Вадим Константинович, доктор физико- математических наук, профессор, ФГАОУ ВО «Санкт- Петербургский политехнический университет Петра Великого», кафедра «Экспериментальная физика», профессор		
Ведущая организация:	ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»		

Защита состоится 14 июня 2018 г. в 15 час. 00 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.038.06 при Воронежском государственном университете по адресу: 394018, г. Воронеж, Университетская площадь, 1, ауд. 428.

С диссертацией можно ознакомиться в Зональной научной библиотеке Воронежского государственного университета и на сайте вуза по адресу: http://www.science.vsu.ru/disser

Автореферат разослан «<u>12</u>» <u>апреля</u> 2018 г.

Ученый секретарь диссертационного совета

6M

Дрождин С.Н.

# ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

#### Актуальность исследования

Теоретические исследования фундаментальных нелинейных процессов взаимодействия электромагнитного излучения с веществом широко востребованы современной физикой. К таковым относится исследование нелинейного процесса нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения малых длин волн (от вакуумного ультрафиолетового до гамма-диапазона) электронами таких систем как атомы, их ионы или молекулы.

Вплоть до настоящего времени при расчетах электронно-энергетической структуры рассеивающих многоэлектронных систем и спектральных характеристик процесса нерезонансного комптоновского рассеяния обычно используют различные модификации импульсного приближения и приближения некогерентной функции рассеяния [1–3]. Одно из базовых допущений этих приближений сводится к требованию представления волновой функции фотоэлектрона в сплошном спектре энергий в виде плоской волны [1]. Как результат, традиционно используемые приближенияя "игнорируют" не только наличие бесконечной *l*-мультипольности физически различных одноэлектронных состояний процесса рассеяния, но не учитывают и фазу рассеяния. Это обстоятельство, в свою очередь, означает пренебрежение одним из важных многоэлектронных эффектов, определяющих, как абсолютные значения спектральных характеристик, так и структуру, и форму спектра рассеяния – эффекта монопольной (радиальной) перестройки электронных оболочек рассеивающей системы при возникновении остовных вакансий [4]. Более того, в рамках корректного описания и интерпретации процесса импульсного приближения для комптоновского рассеяния процесса необходимо соблюдение неравенства [5]  $I_{nl}(\hbar\omega_1 - \hbar\omega_2)^{-1} << 1$  – условия применимости данного приближения. Здесь  $I_{nl}$  – энергии порогов ионизации электронных оболочек,  $\hbar = h/2\pi$ ,  $\omega_1(\omega_2)$  – круговая частота падающего (рассеянного) фотонов. Это условие формально тождественно исключению из описания процесса рассеяния значений энергий порогов ионизации. В свою очередь, это приводит к значительной переоценке парциальных вкладов электронных оболочек в сечения рассеяния, прежде всего, в области формирования максимумов комптоновских профилей.

Таким образом, необходимость разработки методов расчета характеристик процесса комптоновского рассеяния электромагнитного излучения многоэлектронными системами *вне* рамок вышеуказанных приближений – одна из *актуальных* задач современной оптики не только для корректного описания и интерпретации результатов уже существующих экспериментов, но и для их прогнозирования.

#### Степень разработанности

В последние два десятилетия, в связи с интенсивным развитием техники высокоточных экспериментальных исследований (например, создание рентгеновских лазеров на свободных электронах) открывается возможность с высоким спектральным разрешением исследования электронной структуры и оптических свойств вещества методами спектроскопии рассеяния. До исследований, проведенных в настоящей диссертации, основные методы теоретического описания нелинейного процесса нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения многочастичной системой ограничивались применением различных модификаций вышеуказанных приближений. Однако эти приближения содержат ряд некорректных физических допущений, что приводит к значительным погрешностям при теоретических расчетах и интерпретации спектров рассеяния (прежде всего, в области энергий «обрыва» комптоновских профилей многоэлектронных систем). Попыток выхода за рамки этих приближений в опубликованной литературе не было. Такая попытка и послужила основанием для выбора тематики нашего исследования.

# Цель и задачи диссертации

Основной целью диссертации является теоретическое описание и интерпретация спектров нерезонансного комптоновского рассеяния – рассеяния электромагнитного излучения электронами многочастичных систем, при условии, что энергия падающего на систему излучения значительно превышает энергию порогов ионизации её электронных оболочек. Для осуществления указанной цели были поставлены следующие *основные* задачи исследований:

- 1. Выявить роль эффектов монопольной (радиальной) перестройки электронных оболочек и межоболочечных корреляций при нерезонансном комптоновском рассеянии электромагнитного излучения электронами свободного атома;
- 2. Описать *эволюцию* формирования структуры спектров нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения при переходе от нейтрального атома к положительным ионам его изоэлектронной последовательности;
- 3. Установить индивидуальные (по симметрии возбуждения/ионизации) роли ориентационных эффектов в процессе нерезонансного комптоновском рассеяния электромагнитного излучения электронами линейной молекулы.

# Объекты и предмет исследования

В качестве объектов исследования выбраны системы с  ${}^{1}S_{0}$  термом основного состояния – атомы Zn и Ar, ряд никелеподобных (Zn<sup>2+</sup>, Kr<sup>8+</sup> и Mo<sup>14+</sup>) атомных ионов с *d* –симметрией в остове и линейная неоноподобная молекула фтороводорода HF.

Выбор качестве объекта исследования атома <sup>30</sup>Zn обусловлен тем обстоятельством, что цинк – это простейший элемент системы Д.И.Менделеева с полностью заполненной 3d – оболочкой в основном состоянии. Выбор атома <sup>18</sup>Ar обусловлен тем, что его исследование позволило выделить роль *многоэлектронных эффектов* в исследуемых в диссертации процессах рассеяния без учета влияния, прежде всего, коллективных эффектов, наблюдаемых в конденсированных средах.

Образование из атома в результате потери внешних оболочек положительных многозарядных *ионов* сопровождается существенным изменением электростатического поля, что дает возможность получения дополнительной информации о динамике многоэлектронных эффектов в процессе рассеяния. Исследование процесса нерезонансного комптоновского рассеяния электронами *молекулы* позволяет исследовать генезис указанных эффектов при несферичности многоэлектронной системы.

Предметом исследования выступили, прежде всего, спектральные характеристики выше перечисленных объектов.

Методологическая и теоретическая основа исследования. При решении каждой из задач диссертации ставилось требование получить абсолютные (а не относительные) значения исследуемых дифференциальных сечений рассеяния. Такая методология позволяет не только провести детальное сравнение с результатами существующих экспериментов, но и дать теоретическое предсказание для проведения новых экспериментов. Такой подход позволяет исследовать и область применимости нерелятивистской квантовой механики при описании процессов рассеяния. Для описания волновых функций и матричных элементов операторов переходов (рассеяния) использованы методы теории неортогональных орбиталей, теории неприводимых тензорных операторов, теории многих тел в рамках нерелятивистской квантовой теории возмущений. Радиальные части волновых функций одночастичных состояний получены численным решением системы одноэлектронных уравнений Хартри-Фока.

Научную новизну диссертации определяют следующие основные результаты:

- 1. Впервые установлена роль эффектов монопольной (радиальной) перестройки электронных оболочек и межоболочечных корреляций в становлении абсолютных значений, структуры и формы сечения нелинейного процесса комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами свободного атома.
- 2. Впервые дано количественное описание и физическая интерпретация *генезиса* спектра процесса нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения при переходе от нейтрального атома к ионам его изоэлектронной последовательности.
- 3. Впервые в спектрах нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами свободной молекулы установлен *ориентационный* эффект при изменении пространственного положения оси молекулы.

# Теоретическая и практическая значимость работы.

Показанная некорректность физических допущений многих модификаций импульсного приближения при описании и интерпретации экспериментальных спектров комптоновского рассеяния должна стимулировать разработку новых методов прецизионного описания данного процесса.

Выявленный факт существования ориентационного эффекта в спектрах нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами линейной молекулы важен для решения задач синтеза, анализа и контроля ориентированных в пространстве многоэлектронных систем.

Практическая значимость работы состоит в следующем. Результаты диссертации могут найти свои приложения при детальной интерпретации результатов исследований, например, с рентгеновским лазером [6], в области исследований управляемого термоядерного синтеза [7], астрофизике [8], при синтезе и изучении новых биологически важных соединений [9], их реакционной способности, решении задач медицинской диагностики [10]. Это, несомненно, может быть реализовано в силу как существенного продвижения в области развития аналитических и численных методов расчета, так и неуклонного возрастания возможностей средств вычислений.

#### Научные положения, выносимые на защиту

- 1. Процесс нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами атома с d симметрией в остове сопровождается образованием различных состояний непрерывного спектра энергий бесконечного набора l –симметрий. Значения лидирующих в процессе рассеяния l –симметрий определяются соответствующими диапазонами углов рассеяния и энергий падающих фотонов.
- 2. С увеличением величины заряда ядра Ni-подобного иона с *d* –симметрией в остове интегральная интенсивность нерезонансного комптоновского рассеяния перераспределяется:
  - в длинноволновую область спектра рассеяния по энергии рассеянного фотона и
  - в область энергий резонансного комбинационного рассеяния.
- 3. В процессе комптоновского рассеяния изменение энергии фотона, падающего на атом Ar, сопровождается изменением величины относительного вклада парциальных *l* симметрий электронов непрерывного спектра. При этом эффект межоболочечных корреляций разнонаправленно влияет на величины парциальных сечений рассеяния по 3sɛl каналу рассеяния.
- 4. Изменение положения оси молекулы HF относительно плоскости рассеяния сопровождается сильным ориентационным эффектом в спектрах нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами молекулы.

Достоверность и обоснованность результатов диссертации обеспечивается корректным использованием математического аппарата нерелятивистской квантовой

механики. При использовании хорошо апробированных численных методов современной атомной и молекулярной физики достигнуто хорошее количественное согласие с результатами существующих экспериментов.

*Апробация работы.* Результаты исследований, выполненных в диссертации, были представлены на следующих конференциях:

1. Всероссийская конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по физике Секция 4: Спектроскопия и строение вещества (Владивосток, Россия, 12–14 мая 2010).

2. X Международная научно-практическая конференция "European research: innovation in science, education and technology" (Москва, Россия, 23-24 ноября 2015).

3. XXXV Международная научно-практическая конференция "Научная дискуссия: вопросы математики, физики, химии, биологии". Секция 3.5 Оптика (Москва, Россия, 26 ноября 2015).

# Публикации

По теме диссертации опубликовано 13 печатных работ, из них 10 статей в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ.

#### Структура и объём диссертации

Диссертационная работа состоит из Введения, 3-х глав и Заключения. Объём работы составляет 124 страницы, включая 22 рисунка, 7 таблиц и библиографию из 133 наименований, из которых работы автора составляют 13 наименований.

#### Содержание работы

Во Введении дано обоснование актуальности темы исследований, сформулирована основная цель диссертации и поставлены задачи исследований, изложены основные научные результаты и сформулированы положения, выносимые на защиту, охарактеризована научная новизна и практическая ценность результатов, полученных в диссертации.

В Первой главе представлен краткий обзор литературных работ, посвященных экспериментальным теоретическим исследованиям И процесса нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами атома. Основная цель обзора – охарактеризовать существующее в настоящее время состояние исследований процесса и продемонстрировать актуальность решаемых в диссертации задач. Особое внимание уделено моделям теоретического описания процесса в диапазонах энергий, когда величины энергий падающих на атом фотонов существенно превышают значения  $\hbar\omega_I$ энергий порогов ионизации электронных оболочек систем. Анализ существующих в литературе результатов исследований привёл к выводу: для избавления от физических некорректных допущений (присущих вышеуказанным приближениям) при описании и интерпретации экспериментальных спектров необходима разработка новых квантовомеханических методов расчета спектров нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами многоэлектронных систем - атома, атомного иона (его изоэлектрнной последовательности) и молекулы.

Во Второй главе диссертации развит метод расчета спектра нерезонансного комптоновского рассеяния как контактного типа неупругого рассеяния фотона многоэлектронной системой. Амплитуда вероятности этого процесса в нерелятивистском приближении определена матричным элементом контактной части оператора взаимодействия свободного электромагнитного поля в полном гамильтониане квантовой системы «атом (ион) ⊕ фотон» [11,12]:

$$\hat{Q}_{1} = \frac{e^{2}}{2m_{e}c^{2}} \sum_{i=1}^{N} (\vec{A}_{i} \cdot \vec{A}_{i}), \quad \vec{A}_{i} \equiv \vec{A}(0, \vec{r}_{i}),$$
(1)

Здесь определено: N – число электронов в атоме (его ионе), e – заряд электрона и  $m_e$  – его масса, c – скорость света в вакууме.  $\vec{A}$  – оператор векторного потенциала свободного электромагнитного поля в момент времени t = 0 и  $\vec{r_i}$  – радиус-вектор i–электрона атома (иона). Процессы неупругого *резонансного* рассеяния фотона электронами атома, определяемые *линейными* по полю слагаемыми  $\hat{Q}_2 \sim \sum_{i=1}^{N} (\vec{p_i} \cdot \vec{A_i})$  полного гамильтониана нами не рассматривались – в рассматриваемых нами диапазонах энергий фотона вклады от линейных амплитуд, резонирующие лишь при  $\hbar\omega \cong I_{1s}$ , становятся пренебежимо малыми [см., например, Carney J.P.J. and Pratt R.H., Phys. Rev. A – 2000. – V. 62. – 012705].

В Разделе 2.1 представлена аналитическая структура выражения для расчета дважды дифференциального сечения комптоновского рассеяния фотона электронами системы с $^{1}S_{0}$ - термом основного состояния и d-симметрией в остове, когда конечным состоянием рассеяния оказывается состояние «атомный (ионный) остаток, рассеянный фотон  $\oplus$  электрон в *сплошном* спектре». Эти результаты позволили в следующих разделах диссертации учитывать широкий круг многоэлектронных эффектов.

В случае рассеяния *nl*-оболочкой атома линейно поляризованного (перпендикулярно плоскости рассеяния,  $\bot$ ) фотона, в принятой нами атомной ( $e = m_e = \hbar = 1$ ) системе имеем:

$$\frac{d^2 \sigma_{nl,\perp}}{d\omega_2 d\Omega} \equiv \sigma_{nl,\perp} = r_0^2 \beta \int_0^\infty A_{nl} G_{nl} d\varepsilon, \qquad (2)$$

где  $\Omega$  – пространственный угол вылета рассеянного  $\omega_2$  фотона,  $\omega_1(\omega_2)$  – энергия падающего (рассеянного) фотона,  $r_0$  – радиус электрона,  $\beta = \omega_2 / \omega_1$ ,  $G_{nl}$  – инструментальная функция Гаусса и  $\varepsilon$  – энергия электрона сплошного спектра. Конкретизация  $A_{nl}$  – функции из (2) приводит к следующим выражениям:

(*a*)  $ns \rightarrow \varepsilon l$  канал рассеяния:

$$A_{ns} = \sum_{l=0}^{\infty} (4l+2)R_l^2(ns,\varepsilon l),$$
(3)

(б)  $np \rightarrow \varepsilon l$  канал рассеяния:

$$A_{np} = 6\sum_{l=0}^{\infty} (l+1) [R_l^2(np,\varepsilon(l+1) + R_{l+1}^2(np,\varepsilon l)],$$
(4)

(в)  $nd \rightarrow \varepsilon l$  канал рассеяния:

$$A_{nd} = 2D_{nd} + 5\sum_{l=2}^{\infty} D_{nd}^{(l)} , \qquad (5)$$

$$D_{nd} = 5R_2^2(nd,\varepsilon s) + 6R_1^2(nd,\varepsilon p) + 9R_3^2(nd,\varepsilon p),$$
(6)

$$D_{nd}^{(l)} = a_l R_{l-2}^2 (nd, \varepsilon l) + b_l R_l^2 (nd, \varepsilon l) + c_l R_{l+2}^2 (nd, \varepsilon l),$$
(7)

$$a_{l} = \frac{3l(l-1)}{2l-1}, \quad b_{l} = \frac{2l(l+1)(2l+1)}{(2l-1)(2l+3)}, \quad c_{l} = \frac{3(l+1)(l+2)}{(2l+3)}.$$
(8)

В выражениях (3) ÷ (8) обозначено:  $R_l(a,b) = \langle a | j_l(qr) | b \rangle$ ,  $j_l$  – сферическая функция Бесселя,  $q = (\omega_1/c)(1+\beta^2-2\beta\cos\theta)^{1/2}$  и  $\theta$  – угол между волновыми векторами  $\vec{k_1}$ – падающего и  $\vec{k_2}$ –рассеянного фотонов (угол рассеяния). В случае неполяризованных фотонов в (2) появляется множитель (1/2)(1 + cos<sup>2</sup>  $\theta$ ).

В Разделе 2.2 на примере атома Zn, в рамках сформулированных в Разделе 2.1 методов, выполнен расчет абсолютных значений и формы дважды дифференциального сечения процесса комптоновского рассеяния фотона электронами атома с *d*-симметрией в остове. Расчеты выполнены для двух углов рассеяния (141° и 133°) и двух значений энергий

падающих на атом Zn фотонов (14.93 и 22.10 кэВ) – внеэмиссионных диапазонах энергий, исследованных в экспериментах работ [13] и [14]. Волновые функции начального и конечного состояний процесса рассеяния определены в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока с учетом эффектов радиальной релаксации одноэлектронных состояний в поле возникающих остовных вакансий. Методами монографии [15] учтены эффекты упругого томсоновского и рэлеевского рассеяния.

Полученные результаты расчета абсолютных значений спектра нерезонансного комптоновского рассеяния, представленные на Рисунке 1, имеют предсказательный характер. На Рисунке 1 и далее по тексту автореферата обозначено  $\sigma \equiv d^2 \sigma / d(\hbar \omega_2) d\Omega$ . Отметим, что при получении сечений рассеяния nl-оболочками атома мы ограничились учетом переходов в  $\varepsilon l$ -состояния *непрерывного* спектра энергий гармониками лишь до  $l \leq 25$ : учет вкладов старших гармоник (l > 25) изменяет представленные результаты не более чем на 0.1 %.

Получено, что в исследованных диапазонах энергий падающих фотонов лидирующий вклад в вероятность процесса нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами атома Zn дает *много*электронная субвалентная 3*d*-оболочка. Кроме этого установлено, что с ростом  $\hbar\omega_1$  энергии падающего на атом фотона абсолютные значения вкладов субвалентных и валентной оболочек атома уменьшаются, комптоновские профили заметно расширяются, а их максимумы сдвигаются в длинноволновую (по энергии



Дважды дифференциальное сечение процесса комптоновского рассеяния неполяризованного излучения электронами свободного атома Zn. Сплошная кривая – комптоновское рассеяние ( $\sigma_{\perp}^{K}$ ) и штрих-пунктир – томсоновское и рэлеевское упругое рассеяние ( $\sigma_{\perp}^{TP}$ ) – результат диссертации: В максимумах линий упругого рассеяния для энергии фотона  $\hbar\omega_1 = 14.93$  кэВ получено  $\sigma_{\perp} = \sigma_{\perp}^{K} + \sigma_{\perp}^{TP} = 0.257 r_0^2/(3B \cdot cp)$  и для  $\hbar\omega_1 = 22.10$  кэВ  $\sigma_{\perp} = 0.150 r_0^2/(3B \cdot cp)$ . Светлый кружок – импульсное приближение (*наш* расчет по табулированным данным работы [16]). Ширина спектрального разрешения по энергии рассеянного фотона  $G_{nt}$ -инструментальной функции Гаусса принята равной  $\Gamma_{heam} = 180$  эВ.

рассеянного фотона) часть спектра. Отметим, что полученный результат воспроизводит достаточно известный факт [5] о направленности и эволюции процесса комптоновского рассеяния фотона многоэлектронными атомами.

Кроме того, установлено, что, как с увеличением  $\hbar\omega_1$  энергии падающего на атом фотона, так и с ростом  $\theta$  угла рассеяния процесс комптоновского рассеяния становится все более и более *мультипольным* – вероятность рассеяния существенно перераспределяется по всё бо́льшему количеству *l*–гармоник и участие в процессе рассеяния каждого парциального канала рассеяния  $nl \rightarrow \varepsilon l$  ( $l = 0, 1, ..., \infty$ ) принципиально определяет как величину, так и направленность перераспределения вероятности рассеяния.

Рисунок 1 также демонстрирует, что результаты, полученные в рамках импульсного приближения [по данным работы [16] (1975, F. Biggs *et al*)] качественно, но не количественно согласуется с нашими результатами. Именно: импульсное приближение дает сильную переоценку значений вероятности рассеяния, и, прежде всего, в областях энергий рассеянного фотона непосредственно перед рэлеевской (аномально–дисперсионное рассеяние) и томсоновской (контактное рассеяние) линиями упругого рассеяния.

Надежность полученных в диссертации результатов демонстрирует Таблица 1. Видим хорошее согласием результатов диссертации с результатами экспериментов работ [13] и [14] по измерению абсолютных значений однократно [сечение (2) проинтегрировано по  $\hbar\omega_2$ -энергии рассеянного фотона] дифференциальных сечений процесса рассеяния фотона электронами атома Zn (отличие составляет ~ 2–4 %).

В Разделе 2.3 диссертации представлены результаты первого теоретического исследования процесса нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами многозарядного атомного иона с *d*-симметрией валентной оболочки остова. Расчеты проведены для изоэлектронного ряда *никелеподобных* ионов  $Zn^{2+}$ ,  $Kr^{8+}$  и Mo<sup>14+</sup>. Волновые функции как начального, так и конечных состояний рассеяния получены в рамках одноконфигурационного приближения Хартри–Фока. При суммировании по гармоникам в сечениях рассеяния, как и в предыдущем Разделе, учтены значения  $0 \le l \le 25$ .

На Рисунке 2 показаны доминирующие парциальные вклады от субвалентных 3s, 3p и валентной 3d оболочек ионов в полное сечение процесса. Как и следовало ожидать, в случае Ni-подобного иона, определяющий вклад в вероятность рассеяния вносит *многоэ*лектронная 3d оболочка иона. С увеличением заряда ядра атомного иона абсолютные значения максимумов вкладов заметно уменьшаются, при этом комптоновские профили заметно расширяются. Действительно, с ростом заряда ядра иона средние радиусы nl оболочек остова иона уменьшаются, а  $\varepsilon l$ -состояния *сплошного* спектра энергий всё более deлокализуются. Как результат, уменьшаются величины амплитуд вероятностей  $n_1l_1 \rightarrow \varepsilon l$  контактных переходов. При этом (см. Рисунок 3), уменьшение интенсивности рассеяния по лидирующим  $l \sim 1-4$  гармоникам в каждом из  $n_1l_1 \rightarrow \varepsilon l$  каналов перехода сопровождается её перераспределением: (a) на высокие гармоники (*уширение* комптоновских профилей) и ( $\delta$ ) в

Таблица 1. Сравнение результатов диссертации с результатами эксперимента работ [13,14] для *абсолютных однократно* дифференциальных сечений процесса нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами атома Zn. Ширина спектрального разрешения эксперимента по энергии рассеянногог фотона  $\Gamma_{beam} = 180$  эВ.

<i>ћ</i> ω <sub>1</sub> , кэВ θ, 1	0 =====	$\sigma_{\perp}(\hbar\omega_{1},  heta)$ , барн/стерадиан		
	ө, град	Результат диссертации	[13]	[14]
14.93	141	1.403	$1.266 \pm 0.089$	
22.10	133	1.279		1.220±0.060

расширяющуюся область «тени» – диапазон энергий процесса резонансного

комбинационногорассеяния между линиями рэлеевского и томсоновского *упругого* рассеяния и "порогом обрыва" комптоновского профиля ( $\hbar\omega_2 \cong \hbar\omega_1 - I_{3d}$ ).

Последнее утверждение следует из результатов расчета *интегральной* (по  $\hbar\omega_2$  энергиям рассеянного фотона) интенсивности  $(d\sigma_{\perp}^K/d\Omega)$  комптоновского рассеяния исследуемых ионов. Так, например, при переходе от Zn<sup>2+</sup> к Mo<sup>14+</sup> величина указанного однократно дифференциального сечения рассеяния при  $\hbar\omega_1 = 25$  кэВ,  $\theta = 90^\circ$  и  $\Gamma_{beam} = 5$  эВ уменьшается почти на ~ 22 % и соответствующая интенсивность комптоновского рассеяния перераспределяется в область «тени».

Необходимо отметить, что результаты экспериментального и теоретического исследования процесса нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами *атомного иона* изоэлектронной последовательности в литературе отсутствуют.

В Разделе 2.4 в рамках метода смешивания конфигураций [17] на примере атома Ar развит алгоритм расчета, позволяющий исследовать степень влияния эффекта межоболочечных корреляций на абсолютные значения структуру дважды И дифференциального сечения нерезонансного комптоновского рассеяния в диапазонах энергий, значительно превышающих энергии порогов ионизации его оболочек.

Как известно [4], в процессе возбуждения (ионизации) малоэлектронной субвалентной электронной оболочки возникает эффект корреляционной связи данной оболочки с *много*электронными соседними оболочками. В атоме Ar таковыми, подверженными прямому (конечное состояние рассеяния  $3p^5\varepsilon l$ ) и обратному (конечное состояние рассеяния  $3s\varepsilon l$ ) корреляционному влиянию, являются субвалентная малоэлектронная 3s и валентная многоэлектронная 3p оболочки (значительно отделенные от внутренних 1s, 2s и 2p оболочек). Как результат, общие аналитические структуры теории [17] в случае рассеяния



Рисунок 2.

Парциальные вклады валентной 3*d* (сплошная кривая) и субвалентных 3*s* (штрих-пунктир), 3*p* (штрих) оболочек остова в дважды дифференциальное сечение комптоновского рассеяния линейно-поляризованного ( $\perp$ ) фотона электронами Ni–подобных атомных ионов Zn<sup>2+</sup>, Kr<sup>8+</sup> и Mo<sup>14+</sup>.  $\hbar\omega_1 = 25$  кэB,  $\theta = 90^\circ$ ,  $\Gamma_{beam} = 5$  эB.

неполяризованного фотона принимают вид:

(a) 
$$ns \to \varepsilon l$$
 канал рассеяния  $(n = 1, 2)$ :  
 $\sigma_{ns} = \zeta \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \int_{0}^{\infty} R_{l}^{2} (ns, \varepsilon l) G_{ns} d\varepsilon,$ 
(9)

(б)  $np \rightarrow \varepsilon l$  канал рассеяния (n = 2,3):

$$\sigma_{np} = 3\zeta \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \int_{0}^{\infty} L_l G_{np} d\varepsilon, \qquad (10)$$

$$L_{l} = R_{l}^{2}(np,\varepsilon(l+1) + R_{l+1}^{2}(np,\varepsilon l),$$

$$(11)$$

(в)  $3s \rightarrow \varepsilon l$  канал рассеяния (n = 2,3):

$$\sigma_{3s} = \zeta \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \int_{0}^{s} |A_{l}|^{2} G_{3s} d\varepsilon, \qquad (12)$$

$$A_{l} = R_{l}(3s,\varepsilon l) + \sum_{l'=l\pm 1} \int_{0}^{\infty} \frac{W_{ll'}R_{l}(3p,xl')}{z+i\lambda} dx, \qquad (13)$$

$$W_{ll'} = (1 \| C^{(l)} \| l') \langle 3s \varepsilon l | \hat{H} | 3p^5 x l' \rangle.$$
(14)

Здесь обозначено:  $\zeta = r_0^2 \cdot \beta (1 + \cos^2 \theta)$ ,  $z = \omega_1 - \omega_2 - I_{3p} - x$ ,  $\lambda \to 0$ . Структура выражения (13) соответствует учету смешивания  $3s\epsilon l$  и  $3p^5 x l'$  конфигураций по  $\hat{H}$ -оператору электростатического взаимодействия.

При расчетах сечений учтены гармоники  $0 \le l \le 25$ . Наш расчет показал, что учет более старших (l > 25) гармоник изменяет теоретические результаты не более чем на 0.1 %. увеличением значения q-модуля вектора переданного атому импульса начинают вносить



Рисунок 3

Полные дважды дифференциальные сечения процесса комптоновского рассеяния линейно-поляризованного фотона ( $\perp$ ) электронами Ni–подобных атомных ионов: Zn<sup>2+</sup> (сплошная кривая), Kr<sup>8+</sup> (пунктир) и Mo<sup>14+</sup> (штрих-пунктир). Г<sub>beam</sub> = 5 эВ. Стрелкой указано энергетическое положение линии *упругого* рэлеевского (*P*) и томсоновского (*T*) рассеяния.

вклад соответствующие высоким гармоникам сферические  $j_l(qr)$ -функции Бесселя).

Показано, что для исследованных в диссертации областях углов рассеяния и в диапазоне энергий падающего на атом фотона  $5 \div 10$  кэВ (существенно превышающих значения энергий порогов ионизации атомных оболочек) эффект межоболочечных корреляций изменяет величину полного дважды дифференциального сечения процесса комптоновского рассеяния, полученную в рамках одноконфигурационного приближения Хартри-Фока, достаточно слабо – на ~ 1 - 3 %.

Установленная незначительность действия эффекта межоболочечных корреляций на полное сечение рассеяния обусловлена, прежде всего, двумя обстоятельствами:

1) При величинах энергий падающего на атом фотона  $\hbar\omega_1 = 5$  и 10 кэВ заметное проявление данного эффекта по 3sel-каналу комптоновского рассеяния эффективно "*погашается*" большими величинами сечения по альтернативному каналу  $3p^5el$ .

2) В парциальных  $3s\epsilon l$ -каналах комптоновского рассеяния данный эффект корреляций практически на порядок достигает бо́льших величин, но действует *разно*направленно. Действительно, Рис. 4 показывает, что, например для  $\hbar\omega_1 = 10$  кэВ, учет данного эффекта в области максимумов парциальных комптоновских профилей на ~ 20 % понижает *Хартри-Фоковское* сечение для l = 1 и на ~ 12 % повышает его для l = 3.

Также установлено, что для атома Ar импульсное приближение согласуется с нашими результатами лишь качественно, но не количественно. Получено, что в области максимума комптоновского профиля превышение, даваемое импульсным приближением в абсолютной величине дважды дифференциального сечения, составляет ~ 25 %.

В **Третьей Главе** вне рамок импульсного приближения проведено исследование процесса нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами *линейной молекулы* с учетом многочастичных и *ориентационных* эффектов. Объектом исследования выбрана свободная *неоноподобная* молекула фтороводорода HF.

В **Разделе 3.1** проведено построение дважды дифференциального сечения процесса комптоновского рассеяния в рамках *одноцентрового* [18] нерелятивистского описания молекулярных орбиталей (МО):

$$\frac{d^2 \sigma_{\perp}}{d\omega_2 d\Omega} \equiv \sigma_{\perp} = r_0^2 \beta \sum_{\mu^a} \sum_{\mu^b} N_a \int_0^\infty (R^2 + M^2) G d\varepsilon , \qquad (15)$$

$$R = \hat{L}D^{(2n)}, \quad M = \hat{L}D^{(2n+1)}, \tag{16}$$
$$D^{(2n)} = (4n+1)\langle al_1 | j_{2n}(kr) | bl_2 \rangle S_{\eta}^{(2n)}, \tag{17}$$

$$\hat{L} = \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{l_2=0}^{\infty} \alpha_{al_1} \alpha_{bl_2} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n , \qquad (18)$$

где  $N_a$  – число заполнения  $|a\rangle$ –МО, G – инструментальная функция Гаусса-Лапласа,  $\varepsilon$  – энергия электрона непрерывного спектра,  $\hat{L}$  – оператор тройного суммирования,  $\alpha_{al}$  – коэффициент участия  $|a_l\rangle$ –радиальной части базисной волновой функции l–симметрии в одноцентровом представлении для МО,  $\mu$  – фиксированная (для линейной молекулы) проекция на ось квантования полного момента МО,  $\eta = \mu^b - \mu^a$  и  $S_{\eta}^{(2n)}$  – сферическая функция, конкретизируемая выбором типа пространственной ориентации молекулы в начальном состоянии рассеяния.

При расчете матричных элементов оператора контактного перехода  $j_t(kr)$  учтены эффекты радиальной релаксации волновых функций остова и ионизированных состояний рассеяния в полях образующихся вакансий. Отметим, что структура амплитуд вероятностей переходов воспроизводит хорошо известный теоретический факт [19]: в молекулах

многоэлектронный эффект монопольной перестройки электронных оболочек в поле возникающих вакансий носит не только атомный, но также и *молекулярный характер*. Образование внутренней вакансии в остове приводит к изменению, как *состава*, так и *степени участия* атомных *l*-гармоник в волновой функции MO.

Волновые функции МО конечных состояний рассеяния молекулы HF определены нерелятивистскими методами, развитыми и детально изложенными в работе [20]. При построении одноэлектронных волновых функций МО как основного, так и ионизированных состояний молекулы мы ограничились учетом орбитальных квантовых чисел  $l_{1,2} \le 10$  и рассмотрением  $\sigma$ -,  $\pi$ - и  $\delta$ -симметрий МО. Представлено описание использованных при расчетах *типов ориентации* молекулы рассеивающей фотон.

Именно: в схеме (*a*) – ось молекулы лежит в плоскости рассеяния параллельно волновому вектору падающего на молекулу фотона, сонаправлена оси квантования и перпендикулярна векторам поляризации падающего и рассеянного молекулой фотона. Схема (б): ось молекулы параллельна векторам поляризации падающего и рассеянного фотона, перпендикулярна плоскости рассеяния и сонаправлена оси квантования.



#### Рисунок 4.

Парциальные дважды дифференциальные сечения процесса комптоновского рассеяния неполяризованного фотона электронами свободного атома Ar по каналу рассеяния  $3s\varepsilon l$ . Энергия падающего фотона  $\hbar\omega_1 = 10$  кэВ. Одноконфигурационное приближение Хартри-Фока – сплошные кривые; расчет с учтетом межоболочечных корреляций – штриховые кривые.  $\theta = 90^\circ$ ,  $\Gamma_{heam} = 25$  зВ.

Расчеты сечений нерезонансного комптоновского рассеяния проведены для угла рассеяния  $\theta = 90^{\circ}$  и энергий падающего на молекулу фотона  $\hbar\omega_1 = 1100 \div 2700$  эВ. Выбор таких энергий фотона определен, прежде всего, тем, что возникающие структуры сечений комптоновского рассеяния лежат далеко вне энергетической области возникновения  $K_{\alpha}$  – спектра фотоэмиссии молекулы НF ( $3\sigma$ ,  $1\pi \rightarrow 1\sigma$  радиационные переходы в остове)  $\hbar\omega_2 \cong 670 \div 690$  эВ [21], практически с ним не перекрываясь.

**В** Разделе 3.2 изложены результаты иследований процесса нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами молекулы НF и проведено их обсуждение.

Результаты расчета для линейно-поляризованного фотона и ориентированной в пространстве молекулы представлены на Рисунке 5. Рисунок демонстрирует: при переходе от (*a*)-схемы к ( $\delta$ )-схеме эксперимента обнаруживается заметный *ориентационный эффект*. Именно, *во-первых*, практически на порядок уменьшаются абсолютные величины сечения рассеяния. Во-вторых, в области энергий  $\hbar\omega_2 \cong \hbar\omega_1 - I_{1\sigma}$  (где  $I_{1\sigma}$  – энергия порога ионизации 1 $\sigma$ -МО основного состояния молекулы HF) в (*a*)-схеме вклады в вероятность



Рисунок 5.

Дважды дифференциальные сечения процесса комптоновского рассеяния линейно *поляризованного* ( $\perp$ ) фотона электронами линейной молекулы HF в (*a*)– и (б)–схемах предполагаемого эксперимента (см. текст) при угле рассеяния  $\theta = 90^{\circ}$ .  $\hbar\omega_1 (\hbar\omega_2)$  – энергия падающего (рассеянного) фотона соответственно.  $\Gamma_{beam} = 1$  эВ.

рассеяния дают  $1\sigma \rightarrow \epsilon \chi$  переходы из глубокой  $1\sigma$ –MO, наблюдаемые в виде дополнительной ярко выраженной широкой структуры спектра неупругого рассеяния. При этом, для ( $\delta$ )–схемы вероятность рассеяния в указанной области практически равна нулю.

В силу отсутствия эксперимента по неупругому нерезонансному рассеянию фотона электронами *ориентированной* в пространстве молекулы НF результаты исследований третьей главы имеют предсказательный характер.

В Заключении приводятся основные результаты диссертационной работы.

# Краткая сводка основных результатов и выводов

1. В первом порядке теории возмущений по оператору контактного взаимодействия развиты методы расчёта спектральных характеристик нелинейного процесса комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами свободного атома и атомного иона с *d* –симметрией в остове. Разработан комплекс программ для персональных ЭВМ, позволяющий расчитывать вклады многоэлектронных эффектов при расчете спектральных характеристик процесса комптоновского рассеяния.

2. Ha примере атома Zn проведено исследование структуры дважды дифференциального сечения нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами свободного атома с заполненной d -оболочкой остова. Учтен эффект радиальной релаксации электронных оболочек в поле возникающих в остове вакансий и эффекты рэлеевского и томсоновского упругого рассеяния. Полученные результаты имеют предсказательный характер. Для энергии падающих фотонов 14.93 и 22.10 кэВ и углах рассеяния 141 и 133° результаты диссертации хорошо согласуются с результатами экспериментов по измерению однократно дифференциального сечения процесса.

3. Для ряда Ni-подобных ионов с *d* –симметрией в остове (Zn<sup>2+</sup>, Kr<sup>8+</sup> и Mo<sup>14+</sup>) *вне* рамок импульсного приближения исследована энергетическая и угловая зависимость процесса нерезонансного комптоновского рассеяния линейно поляризованного фотона электронами. Исследование позволило установить следующее:

- обнаружен эффект мультипольности каждого парциального  $nl \rightarrow \varepsilon l$   $(l = 0, 1, ..., \infty)$ канала рассеяния nl-оболочкой остова, существенно определяющий величину и направленность перераспределения вероятности нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами иона. При этом, с ростом заряда ядра Ni-подобного иона и при неизменных углах рассеяния  $\theta$  и величинах энергии падающего на многоэлектронную систему фотона  $\hbar\omega_1$  происходит концентрация лидирующих lгармоник по всем *основным*  $nl \rightarrow \varepsilon l$  каналам рассеяния в окрестности значений, близких к l = 3 (комптоновский электрон сплошного спектра f-симметрии).
- интегральная интенсивность нерезонансного комптоновского рассеяния перераспределяется
- в длинноволновую область спектра рассеяния по энергии рассеянного фотона и
- в диапазон энергий комбинационного резонансного рассеяния перед линией рэлеевского и томсоновского *упругого* рассеяния.

4. На примере атома Ar исследованы природа и роль эффекта межоболочечных корреляций в процессе нерезонансного комптоновского рассеяния. Установлено, что:

- эффект межоболочечных корреляций разнонаправленно воздействует на парциальные сечения процесса в 3*s*ɛ*l* канале рассеяния.
- при уменьшении энергии ħω<sub>1</sub> падающего фотона ширины комптоновских профилей как субвалентных, так и валентных оболочек атома-рассеивателя уменьшаются и, при этом, возрастает степень энергетического "разрешения" этих профилей. Как результат, эффект "гашения" сечения рассеяния фотона субвалентной оболочкой сечением рассеяния валентной падает. При уменьшении энергии ħω<sub>1</sub> фотона уменьшается и роль "больших"

*l*-гармоник в  $n_l l_1^{4l_l+1} \epsilon l$  канале рассеяния субвалентной  $n_l l_1$  оболочкой. В данном случае

спектральное проявление эффекта межоболочечных корреляций будет определяться, в основном, динамикой l-гармоник, ближайшими к гармонике  $l_1$ .

Как результат, эти два факта качественно воспроизводят результаты, полученные в рамках формализма плотности обобщенных сил осцилляторов и приближении случайных фаз с обменом при изучении процесса комптоновского рассеяния многоэлектронными атомами [22] и указывают на относительно сложный характер теоретического описания эффекта межоболочечных корреляций.

Обнаружено также, что, импульсное приближение, как и ожидалось, приводит к качественному, но не количественному согласию с результатами диссертации (в области появления максимума комптоновского профиля отличие составило ~ 25 %).

5. На примере молекулы фтороводорода НF выполнено первое теоретическое исследование процесса нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами линейной молекулы. Как результат:

- построен метод расчета сечения процесса нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами линейной молекулы в газовой фазе *вне* рамок импульсного приближения. Этот метод носит общий характер и применимость его к той или иной *линейной* молекуле ограничена лишь требованием корректности использования нерелятивистских методов построения волновых функций молекулярных орбиталей состояний рассеяния.
- для трех схем эксперимента рассчитаны абсолютные величины и форма дважды дифференциального сечения процесса нерезонансного комптоновского рассеяния электронами неоноподобной молекулы HF.

Установлено, что переход между рассмотренными схемами эксперимента сопровождается сильным *ориентационным* эффектом.

# Список цитированной литературы

- 1. Eisenberger, P. Compton scattering of X-rays from bound electrons / P. Eisenberger, P.M. Platzmann // Physical Review A. 1970. V. 2. P. 415–423.
- Namito, Y. Compton scattering of 20- to 40 keV photons / Y. Namito, S. Ban, H. Hirayama, N. Nariyama, H. Nakashima, Y. Nakane, Y. Sakamoto, N. Sasamoto, Y. Asano, S. Tanaka // Physical Review A. 1995. V. 51. P. 3036–3043.
- 3. **Pratt, R.H.** Compton scattering revisited / R.H. Pratt, L.A. LaJohn, V. Florescu, T. Surič, B.K. Chatterjee, S.C. Roy // Radiation Physics and Chemistry. 2010. V. 79. P. 124–131.
- 4. Амусья, М.Я. Межоболочечное взаимодействие в атомах / М.Я. Амусья, В.К. Иванов // Успехи Физических Наук. – 1987. – Т. 152. – С. 185–230.
- Kane, P.P. Inelastic scattering of X-rays and gamma rays by inner shell electrons / P.P. Kane // Physics Reports – Review Section of Physics Letters. – 1992. – V. 218. – P. 67–139.
- Emma, P. First lasing and operation of an angstrom-wavelength free-electron laser / P. Emma, R. Akre, J. Arthur, R. Bionta, C. Bostedt, J. Bozek, A. Brachmann, P. Bucksbaum, R. Coffee, F.-J. Decker, Y. Ding, D. Dowell, S. Edstrom, A. Fisher, J. Frisch, S. Gilevich, J. Hastings, G. Hays, Ph. Hering, Z. Huang, R. Iverson, H. Loos, M. Messerschmidt, A. Miahnahri, S. Moeller, H.-D. Nuhn, G. Pile, D. Ratner, J. Rzepiela, D. Schultz, T. Smith, P. Stefan, H. Tompkins, J. Turner, J. Welch, W. White, J. Wu, G Yocky., J. Galayda // Nature Photonics. – 2010. – V. 4. – P. 641–647.
- 7. Glenzer, S.H. X-ray Thomson scattering in high energy density plasmas / S.H. Glenzer, R. Redmer // Reviews of Modern Physics. 2009. V. 81. P. 1625–1663.
- Remington, B.A. Experimental astrophysics with high power lasers and Z pinches / B.A. Remington, R.P. Drake, D.D. Ryutov / // Reviews of Modern Physics. 2006. V. 78. P. 775–807.
- 9. Hugtenburg, R.P. Anomalous Rayleigh scattering with dillute concentrations of elements of biological importance / R.P Hugtenburg., D.A Bradley. // Nuclear Instruments & Methods in

Physics Research B – Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2004. – V. 213. – P. 552–555.

- 10. Lanza, G.M. Molecular imaging with computed tomography / G.M. Lanza, D. Pan // Contrast Media & Molecular Imaging. 2014. V. 9. P. 1–2.
- 11. Дирак, П.А.М. Принципы квантовой механики / П.А.М. Дирак, М. : Наука, 1979. 480 с.
- 12. Каразия, Р.И. Введение в теорию рентгеновских и электронных спектров свободных атомов / Р.И. Каразия, Вильнюс : Мокслас, 1987. 276 с.
- Singh, P.P. Large angle elastic and inelastic scattering of 14.93 keV photons / P.P. Singh, D. Mehta, S. Kumar, M. Sharma, S. Puri, J.S. Shahi, N. Singh // Nuclear Instruments & Methods in Physics Research B Beam Interactions with Materials and Atoms. –2004. –V. 222. P. 1–10.
- 14. **Kumar, S.** Differential cross-section measurements for inelastic scattering of 22.1 keV photons by elements with  $4 \le Z \le 69$  / S. Kumar, J.S. Shahi, S. Puri, D. Mehta, N. Singh // Nuclear Instruments & Methods in Physics Research B Beam Interactions with Materials and Atoms. 2002. V. 194. P. 99–104.
- 15. Hopersky, A.N. Scattering of Photons by Many-Electron Systems / A.N. Hopersky, V.A. Yavna, Berlin-Heidelberg : Springer-Verlag, 2010. 134 p.
- 16. **Biggs, F.** Hartree-Fock Compton profiles for the elements / F. Biggs, L. Mendelsohn, J.B. Mann // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1975. V. 16. P.201–309.
- 17. Hopersky, A.N. Intershell correlations in Compton photon scattering by an atom / A.N. Hopersky, A.M. Nadolinsky, S.A. Novikov // Physical Review A. 2010. V. 82. P. 042710.
- 18. **Bishop, D.M.** Single–Center Molecular Wave Functions / D.M. Bishop // Advances in Quantum Chemistry. 1967. V. 3. P. 25–59.
- 19. **Нефедов, В.И.** Электронная структура химических соединений / В.И. Нефедов, В.И. Вовна, М. : Наука, 1987. 347 с.
- 20. Сухоруков, В.Л. Спектры поглощения внутренних оболочек молекул с водородными лигандами / В.Л. Сухоруков, В.А. Явна, В.Ф. Демехин // Известия АН СССР. Серия физическая. 1982. Т.46. С.763–769.
- 21. Надолинский, А.М. Резонансное неупругое рассеяние рентгеновского фотона линейной молекулой / А.М. Надолинский, В.А. Явна, А.Н. Хоперский, А.С. Каспржицкий // Оптика и спектроскопия. –2008. Т. 105. С. 892–899.
- 22. Amusia, M.Ya. Octupole contributions to the generalized oscillator strengths of discrete dipole transitions in noble–gas atoms / M.Ya. Amusia, L.V. Chernysheva, Z. Felfli, A.Z. Msezane // Physical Review A. 2007. V. 75. P. 2703–2713.

# Публикации автора

# Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК РФ

- Хоперский, А.Н. Межоболочечные корреляции при нерезонансном Комптоновском рассеянии рентгеновского фотона атомом / А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский, К.Х. Икоева, О.А. Хорошавина // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 2011. – Т. 140. – вып. 5(11). – С. 844–851.
- 2. Хоперский, А.Н. О полноте набора одночастичных состояний многоэлектронного атома/ А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский, К.Х. Икоева, О.А Хорошавина. // Оптика и спектроскопия. – 2011. – Т. 111. – №. 5. – С. 785–787.
- 3. **Икоева, К.Х.** О полноте набора одночастичных состояний многоэлектронного атома в расширенном пространстве Гильберта / К.Х. Икоева, О.А. Хорошавина, А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский // Вестник РГУПС. Физико-математические науки. 2011. № 2. С. 160–163.
- Hopersky, A.N. X-ray–photon Compton scattering by an atom with *d* symmetry in the core / A.N. Hopersky, A.M. Nadolinsky, K.Kh. Ikoeva, O.A. Khoroshavina // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. – 2011. – V.44. – P. 145202 (5 pages).

- 5. **Хоперский, А.Н.** Нерезонансное Комптоновское рассеяние рентгеновского фотона атомом с *d* симметрией в остове / А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский, К.Х. Икоева, О.А. Хорошавина // Оптика и спектроскопия. 2011. Т. 111. №. 6. С. 924–929.
- Корошавина, О.А. Эффект межоболочечных корреляций при нерезонансном Комптоновском рассеянии фотона свободным атомом / О.А. Хорошавина, К.Х. Икоева, А.М. Надолинский, А.Н. Хоперский // Вестник РГУПС. Физико-математические науки. – 2011. – № 3. – С. 167–174.
- 7. **Хоперский, А.Н.** Нерезонансное Комптоновское рассеяние рентгеновского фотона Niподобным атомным ионом / А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский, К.Х. Икоева, О.А. Хорошавина, А.С. Каспржицкий // Оптика и спектроскопия. – 2012. – Т. 112. – №. 1. – С. 3–9.
- Хоперский, А.Н. Нерезонансное Комптоновское рассеяние рентгеновского фотона линейной молекулой / А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский, К.Х. Икоева, А.С. Каспржицкий, В.А. Явна // Вестник РГУПС. Физико-математические науки. – 2014. – № 4. – С. 139–142.
- 9. Хоперский, А.Н. Гигантский автоионизационный резонанс при Комптоновском рассеянии рентгеновского фотона атомом с открытой оболочкой / А.Н. Хоперский, А.М Надолинский., В.А. Явна, К.Х. Икоева, Р.В. Конеев // Вестник РГУПС. Физикоматематические науки. 2013. № 4. С. 148–158.
- Hopersky, A.N. X-ray-photon Compton scattering by a linear molecule / A.N. Hopersky, A.M. Nadolinsky, S.A Novikov., V.A Yavna., K.Kh. Ikoeva // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2015. V.48. P. 175203 (8 pages).

# Публикации в других изданиях

- 11. **Икоева, К.Х.** Нерезонансное Комптоновское рассеяние фотона свободным атомом/ Икоева К.Х. // Материалы Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по физике. Россия, Владивосток, Май 2010. – С. 146–147.
- 12. Nadolinsky, A.M. Compton photon scattering by an electrons of atom with an open shell / A.M Nadolinsky., K.Kh. Ikoeva // Eur. research № 9 (10) / Сб. ст. по мат. Х межд. науч.-практ. конф. Eur. Research: Innov. in Science, Ed. and Тесhnology. (Россия, Москва, 23-24 ноября 2015). М. 2015. 107с. Р. 7–9.
- 13. Надолинский, А.М. Комптоновское рассеяние фотона электронами линейной молекулы / А.М. Надолинский, К.Х. Икоева // Сб. ст. по материалам XXXIV-XXXV междунар. науч.-практ. конф. «Научная дискуссия: вопросы математики, физики, химии, биологии» – № 10-11 (28). – М., Изд. «Интернаука», 2015. – 128 с. – С. 45–49.

# Икоева Кетино Хазбиевна КОМПТОНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ ФОТОНА ЭЛЕКТРОНАМИ АТОМА, АТОМНОГО ИОНА И ЛИНЕЙНОЙ МОЛЕКУЛЫ

Автореферат диссертации

Подписано к печати \_\_.\_\_.2018. Формат 60×84/16. Бумага офсетная. Усл. печ. л. 1,0. Тираж 80 экз. Заказ № Юго-Осетинский государственный университет им. А.А. Тибилова. Ризография ЮОГУ