

О Т З Ы В

официального оппонента, доктора физ.-мат. наук Иванова Вадима Константиновича на диссертацию ИКОЕВОЙ Кетино Хазбиевны «Комптовское рассеяние фотона электронами атома, атомного иона и линейной молекулы», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – «Оптика».

Диссертация Икоевой К.Х. посвящена теоретическому исследованию нелинейного процесса комптоновского рассеяния рентгеновского излучения электронами свободных многоэлектронных систем.

В последние десятилетия в спектроскопических методах исследования электронного строения вещества достигнут большой прогресс за счет как применения поляризованного излучения большой интенсивности, создаваемого синхротронами и лазерами, так и создания новых методов, в частности, спектрального метода исследования характеристик фундаментального в микромире процесса неупругого рассеяния фотона многоэлектронной системой. Анализ результатов прецизионных измерений спектров нерезонансного комптоновского рассеяния фотона в диапазоне энергий от 200 эВ до 1.5 МэВ показал, что в этих областях энергий имеется набор аномалий в зависимостях сечений рассеяния от энергии падающего фотона, происхождение которых на основе существующих теорий понятно лишь качественно и в большей степени предположительно. Теоретические исследования корреляционных, нелокально-обменных и динамических эффектов в процессах нерезонансного комптоновского рассеяния традиционно проводились в рамках модификаций импульсного приближения и приближения некогерентной функции рассеяния. Необходимо отметить, что эти приближения хорошо определены при достаточно больших переданных импульсах для данного ядра, иначе при выполнении условия $qa_0/Z \gg 1$ (q – модуль вектора переданного атому импульса, a_0 – радиус Бора и Z – заряд ядра атома). Такое ограничение приводит к формальной

неприменимости этих приближений в широких областях энергий рассеиваемого фотона. Поэтому разработка методов расчета характеристик процесса комптоновского рассеяния, позволяющих выйти за рамки области применения используемых современных приближений является весьма актуальной задачей оптики.

Представленная диссертационная работа посвящена вопросам описания и интерпретации спектров нерезонансного комптоновского рассеяния при энергиях падающего излучения, превышающих пороговые энергии ионизации электронных оболочек. В силу сказанного актуальность и практическое значение темы диссертации Икоевой К.Х. представляются несомненными. Автором диссертации дано обобщение квантовомеханических методов расчета спектральных характеристик процесса контактного неупругого рассеяния фотона на случай атомов и ионов изоэлектронной последовательности с d симметрией в остове. Это обобщение проведено на базе широко используемого в современной спектроскопии приближения Хартри-Фока, многоконфигурационного приближения, теории неортогональных орбиталей, методов теории многих тел.

Диссертация Икоевой К.Х. состоит из Введения, трех глав и Заключения и содержит библиографию из 133 наименований.

Во *Введении* показана актуальность темы исследований, выполненных в данной диссертации, обоснован выбор объектов исследования и сформулированы основные задачи, решаемые автором. Определена структура диссертации и сформулированы научные положения, выносимые на защиту.

Первая глава диссертации содержит обзор современных теоретических методов исследования процесса нерезонансного неупругого рассеяния фотона многоэлектронной системой, основанных, в основном, на различных модификациях импульсного приближения и приближения некогерентной функции рассеяния. Во второй части этой главы приведены

экспериментальные и теоретические результаты исследования спектров комптоновского рассеяния. Показано, что существующие теоретические модели описания спектральных характеристик этого процесса приводят к существенным расхождениям с экспериментом, прежде всего, в области энергии порога обрыва комптоновского профиля. Проведенный анализ экспериментальных и теоретических результатов позволил автору конкретизировать основные научные задачи, решаемые в диссертации.

Во *второй* главе диссертации автором представлен и применен метод расчета спектров контактного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами атома и атомного иона. В целом глава состоит из четырех разделов. Раздел 2.1 посвящен установлению аналитической структуры выражений для расчета дважды дифференциального сечения нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами атомной системы с 1S_0 -термами в их основном состоянии и ионами с d -симметрией в остове.

В Разделе 2.2, используя сформулированные в предыдущем разделе методы, выполнен расчет абсолютных величин и формы дважды дифференциального сечения процесса нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами атома Zn (элемента с полностью заполненной $3d$ -оболочкой в его основном состоянии). При вычислениях учтен многоэлектронный эффект радиальной релаксации оболочек в поле остовных вакансий, а также эффекты упругого (рэлеевского и томсоновского) рассеяния – эффекты, существенно определяющих теоретические абсолютные величины и форму дважды дифференциального сечения процесса в области нерезонансного рассеяния. Полученные результаты сравниваются с результатами более простых расчетов других авторов в рамках импульсного приближения, а также с имеющимися экспериментальными данными по однократным дифференциальным сечениям.

В Разделе 2.3 представлены результаты первого теоретического исследования процесса комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами многозарядного атомного иона с d -симметрией валентной оболочки остова. В рамках *одноконфигурационного* приближения Хартри–Фока проведены расчеты для изоэлектронного ряда никелеподобных положительных ионов (Zn^{2+} , Kr^{8+} , Mo^{14+}). Поскольку других данных по комптоновскому рассеянию на этих ионах отсутствуют, то результаты диссертанта носят предсказательный характер.

В Разделе 2.4, на примере свободного атома ^{18}Ar , в рамках метода смешивания конфигураций развит алгоритм расчета, позволяющий исследовать влияние эффекта межоболочечных корреляций как форму спектра нерезонансного комптоновского рассеяния, так и на абсолютные значения дважды дифференциального сечения в диапазонах энергий, значительно превышающих энергии порогов ионизации электронных оболочек атома аргона. Показано, что при энергиях фотона 5 - 10 кэВ вклад межоболочечных эффектов становится незначительным, однако результаты, полученные в рамках развитого метода в работе, существенно отличаются от результатов, полученных ранее в более упрощенном импульсном приближении.

До диссертационной работы автора не существовало неэмпирических расчетов процесса нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами молекулы, учитывающих многочастичный характер этого процесса. *Третья* глава, состоящая из двух разделов, посвящена этому процессу в линейной молекуле фтороводорода. В Разделе 3.1 в рамках одноцентрового нерелятивистского описания молекулярных орбиталей развит кваномеханический метод расчета дважды дифференциального сечения процесса нерезонансного комптоновского рассеяния линейно поляризованного фотона электронами линейной молекулы. Здесь же рассмотрены несколько различных случаев ориентации оси молекулы по

отношению к векторам поляризации падающего и рассеянного молекулой фотона.

В Разделе 3.2 на примере свободной неоноподобной молекулы HF, в рамках двух схем предполагаемого эксперимента, изложены результаты исследований процесса нерезонансного комптоновского рассеяния. При этом предсказываемый, в частности, теорией молекулярных спектров поглощения, ориентационный эффект автор обнаруживает и в спектрах нерезонансного неупругого рассеяния комптоновского рассеяния. Результаты этого раздела также носят предсказательный характер из-за отсутствия экспериментальных данных.

В *Заключении* диссертации дана краткая сводка основных результатов и выводов диссертации.

Остановливаясь на работе в целом, следует отметить, что автором, К.Х. Икоевой, проделана большая работа, получен целый ряд новых, практически важных результатов, часть которых представляет большой методический интерес. Примененный автором метод несомненно является шагом вперед по сравнению с ранее использованными для расчетов приближениями.

Следует также отметить, что теоретические вычисления, проведенные в диссертационной работе Икоевой К.Х., формируют более детальные представления о нелинейных процессах, происходящих при взаимодействии электромагнитного излучения с веществом. Несомненный интерес представляют полученные диссертантом количественные характеристики влияния многочастичных эффектов при взаимодействии фотона с многоэлектронными системами. Достоверность полученных результатов определяется использованием проверенным аппаратом квантовой механики, а также сравнением с другими расчетами и экспериментальными данными. Результаты диссертации, несомненно, окажут стимулирующее влияние на экспериментальные исследования.

По диссертации следует сделать ряд замечаний:

1. Автор учитывал релятивистские поправки лишь при расчете энергий порогов ионизации основных оболочек атомов (ионов). Однако оператор перехода и волновые функции электронов взяты в рамках нерелятивистского приближения Хартри-Фока. Следовало бы оценить, насколько учет релятивистской структуры оператора рассеяния и волновых функций изменил полученные результаты по комптоновскому рассеянию. Это бы существенно дополнило проведенное исследование.
2. Разработанный автором метод вычисления допускает учет эффектов конфигурационного смешивания и кратного возбуждения (ионизации) при описании вероятности нерезонансного комптоновского рассеяния фотона многоэлектронной системой. Однако учет этих эффектов (за исключением учета межоболочечных корреляций в атоме Ag) в вычислениях не были проведены. Остается нераскрытым вопрос о том, насколько упомянутые эффекты велики и как они влияют на величину вероятности комптоновского рассеяния.
3. Эффект межоболочечных корреляций в атомах и ориентационный эффект для линейной молекулы в диссертации исследованы лишь атома Ag и молекулы HF. Конечно, для полноты картины следовало бы провести вычисления или привести оценки вклада этих эффектов для других рассмотренных серий элементов.

Рукопись диссертации и ее оформление производят хорошее впечатление. Однако видимо в силу обилия фактического материала, автору не всегда удавалось избавиться от тяжеловесности изложения.

Данные замечания не затрагивают существа проделанной работы и полученных в диссертации результатов. Достоверность результатов диссертации обеспечивается корректной постановкой задач, последовательным применением обоснованных квантово-механических методов, хорошим согласием теоретических результатов с результатами существующих экспериментов. Представленные результаты и сформулированные выводы непротиворечивы и согласуются с

