Vol. A39 (1971) ACTA PHYSICA POLONICA Fasc. 1

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ. 3. ТЕОРИЯ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ

Quantum Theory of X-ray Scattering. 3. Theory of Multiple Scattering

Ф. А. Бабушкин

Коми государственный педагогический институт, Сыктывкар*

(Поступила в редакцию 20 июня 1970 г.)

Рассматривается квантовая теория упругого рассеяния рентгеновских лучей с учетом многократного рассеяния. В качестве примера вычисляется дифференциальное сечение двойного рассеяния рентгеновских лучей в газах.

Quantum theory of X-ray elastic scattering is discussed and multiple scattering calculated. The calculation of the differential cross-section for double X-ray scattering in gases is given as an example.

Общий формализм теории многократного рассеяния микрочастицы квантовой системой разработан Ватсоном [1, 2]. Японские физики [3, 4] на основе этого формализма построили теорию многократного рассеяния медленных нейтронов. В данной работе, во многом следуя [3] дается теория многократного рассеяния рентгеновских лучей.

Рассеяние рентгеновского кванта с энергией ε_i на системе из N идентичных атомов (молекул) без учета отдачи (в отличии от рассеяния нейтронов в данном случае отдачей можно пренебречь) описывается оператором $T(\varepsilon_i)$, определяемым интегральным уравнением

$$\begin{aligned} T(\varepsilon_i) &= V+V\cdot G_0(\varepsilon_i)\cdot T(\varepsilon_i) \\ &= V+VG_0(\varepsilon_i)V+VG_0(\varepsilon_i)VG_0(\varepsilon_i)V+\ldots \end{aligned} \tag{1}$$

Оператор взаимодействия рентгеновского кванта с электронами рассеивающей системы определяется выражением

$$V=-\frac{e^2}{mc^2}\cdot\sum_\beta \hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r}_\beta)\cdot\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r}_\beta) \tag{2}$$

где суммирование проводится по всем электронам системы

$$\sum_\beta \rightarrow \sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{\nu=1}^{Z} \tag{3}$$

* Адрес: Коми государственный педагогический институт, Кафедра физики, г. Сыктывкар, СССР.

$\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r})$ — векторный потенциал электромагнитного поля в представлении вторичного квантования

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{k}} \sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{Vk}} \cdot \{\boldsymbol{e_k} \cdot \hat{a}_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{e}^{i\boldsymbol{kr}} + \boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}} \cdot \hat{a}^+_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{e}^{-i\boldsymbol{kr}}\}. \tag{4}$$

Пропагатор свободного рентгеновского кванта выберем в виде

$$G_0(\varepsilon_i) = \frac{1}{\varepsilon_i - \hat{H}_\gamma + i\eta} - \frac{1}{\varepsilon_i + \hat{H}_\gamma - i\eta} = \frac{2\hat{H}_\gamma}{\varepsilon_i^2 - \hat{H}_\gamma^2 + 2i\eta\hat{H}_\gamma}. \tag{5}$$

Выбор пропагатора в виде (5) обусловлен математическими удобствами последующих вычислений.

Вероятность и сечение рассеяния определяются квадратом абсолютного значения матричного элемента

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{k}_f, f'|T(\varepsilon_i)|\boldsymbol{k}_i, i'\rangle &\equiv T_{fi} \\
&= T_{fi}^{(1)} + T_{fi}^{(2)} + T_{fi}^{(3)} + \ldots = \sum_n T_{fi}^{(n)} \\
T_{fi}^{(1)} &= \langle \boldsymbol{k}_f, f'|V|\boldsymbol{k}_i, i'\rangle \\
T_{fi}^{(2)} &= \langle \boldsymbol{k}_f, f'|VG_0V|\boldsymbol{k}_i, i'\rangle \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{6}$$

$$T_{fi} = \sum_n T_{fi}^{(n)} = -\frac{e^2}{mc^2} \cdot \frac{2\lambda c\hbar}{V} \cdot f_0 \cdot \frac{\boldsymbol{e}_f \cdot \boldsymbol{e}_i}{(k_f \cdot k_i)^{1/2}} \left\langle f \left| \sum_\alpha e^{-i\boldsymbol{k}_f \cdot \boldsymbol{r}_\alpha} \cdot e^{i\boldsymbol{k}_i \boldsymbol{r}_\alpha} \right| i \right\rangle +$$

$$+ \left(\frac{e^2}{mc^2} \cdot \frac{2\pi c\hbar}{V} f_0\right)^2 \cdot \frac{\boldsymbol{e}_f \cdot \boldsymbol{e}_i}{(k_f \cdot k_i)^{1/2}} \cdot \left\langle f \left| \sum_{\alpha \neq \beta} e^{-i\boldsymbol{k}_f \cdot \boldsymbol{r}_\beta} \cdot D(\boldsymbol{r}_\beta - \boldsymbol{r}_\alpha)\, e^{i\boldsymbol{k}_i \boldsymbol{r}_\alpha} \right| i \right\rangle -$$

$$- \left(\frac{e^2}{mc^2} \cdot \frac{2\pi c\hbar}{V} \cdot f_0\right)^3 \cdot \frac{\boldsymbol{e}_f \cdot \boldsymbol{e}_i}{(\boldsymbol{k}_f \cdot \boldsymbol{k}_i)^{1/2}} \cdot \left\langle f \left| \sum_{\substack{\alpha \neq \beta \\ \beta \neq \gamma}} e^{i\boldsymbol{k}_f \boldsymbol{r}_\gamma} \cdot D(\boldsymbol{r}_\gamma - \boldsymbol{r}_\beta)\, D \cdot (\boldsymbol{r}_\beta - \boldsymbol{r}_\alpha)\, e^{i\boldsymbol{k}_i \boldsymbol{r}_\alpha} \right| i \right\rangle + \ldots$$

здесь f_0 — форм-фактор атома и

$$D(\boldsymbol{r}_\beta - \boldsymbol{r}_\alpha) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{k} \cdot \frac{2\varepsilon}{\varepsilon_i^2 - \varepsilon^2} \cdot e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}_\beta - \boldsymbol{r}_\alpha)} = -\frac{1}{\pi c\hbar} \cdot \frac{\cos k_i|\boldsymbol{r}_\beta - \boldsymbol{r}_\alpha|}{|\boldsymbol{r}_\beta - \boldsymbol{r}_\alpha|}. \tag{7}$$

Каждый член в (6) можно представить диаграммами (см. рис. 1), как это сделано в работе [3].

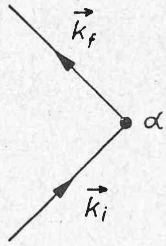

Рис. 1. Первый член в (6), однократное рассеяние

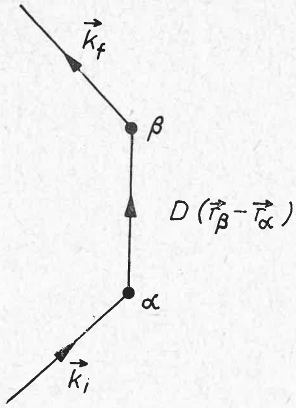

Рис. 2. Второй член в (6), двойное рассеяние

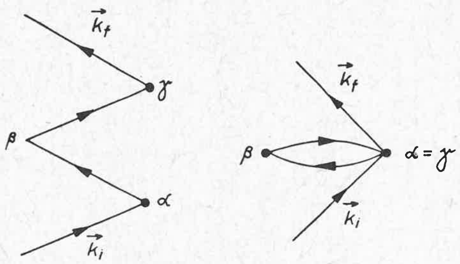

Рис. 3. Третий член в (6), тройное рассеяние

Двойное дифференциальное сечение определяется

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_f\cdot d\Omega}=\left(\frac{V\cdot k_f}{2\pi c\hbar}\right)^2\cdot\sum_{fi}\varrho_i\,|T_{fi}|^2\cdot\delta\,(E_f-E_i)$$

$$=\frac{1+\cos^2\vartheta}{2}\cdot\frac{k_f}{k_i}\left(\frac{V}{2\pi c\hbar}\right)^2\cdot\frac{1}{2\pi\hbar}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dt\cdot e^{i(\varepsilon_f-\varepsilon_i)t/\hbar}\cdot\sum_{m=1}^{\infty}\cdot\sum_{n=1}^{\infty}\cdot\sum_{\substack{\alpha\neq\beta\\ \beta\neq\gamma\\ \vdots}}\cdot\sum_{\substack{\alpha'\neq\beta'\\ \beta'\neq\gamma'\\ \vdots}}\times$$

$$\times\left(-\frac{e^2}{mc^2}\cdot\frac{2\pi c\hbar}{V}\cdot f_0\right)^{m+n}\cdot\langle e^{-i\boldsymbol{k}_i\boldsymbol{r}_\alpha(0)}\cdot D(\boldsymbol{r}_\beta(0)-\boldsymbol{r}_\alpha(0))\ldots D(\boldsymbol{r}_\mu(0)-\boldsymbol{r}_\nu(0))\times$$

$$\times e^{i\boldsymbol{k}_f\boldsymbol{r}_\nu(0)} \cdot e^{i\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{r}_{\nu'}(t)} \cdot D(\boldsymbol{r}_{\mu'}(t)-\boldsymbol{r}_{\nu'}(t)\ldots D(\boldsymbol{r}_{\beta'}(t)-\boldsymbol{r}_{\alpha'}(t)) \cdot e^{i\boldsymbol{k}_i\boldsymbol{r}_\alpha(t)}\rangle_T$$

$$= \frac{1+\cos^2\vartheta}{2} \cdot \frac{k_f}{k_i}\left(\frac{V}{2\pi c\hbar}\right)^2 \cdot \frac{1}{2\pi\hbar}\int\limits_{-\infty}^{-\infty} dt \cdot e^{i(\varepsilon_f-\varepsilon_i)t/\hbar} \cdot \sum_{m,n}\left(-\frac{e^2}{mc^2}\cdot\frac{2\pi c\hbar}{V} f_0\right)^{m+n} \times$$

$$\times \int d\boldsymbol{x}_1 \cdot d\boldsymbol{x}_2 \ldots d\boldsymbol{x}_m \cdot \int d\boldsymbol{x}'_1 \cdot d\boldsymbol{x}'_2 \ldots d\boldsymbol{x}'_n \cdot e^{i\boldsymbol{k}_f(\boldsymbol{x}_m-\boldsymbol{x}'_n)} \cdot e^{i\boldsymbol{k}_i(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}'_1)}\times$$

$$\times D(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_1)\ldots D(\boldsymbol{x}_m-\boldsymbol{x}_{m-1}) \cdot D(\boldsymbol{x}'_n-\boldsymbol{x}'_{n-1})\ldots D(\boldsymbol{x}'_2-\boldsymbol{x}'_1)\times$$

$$\times G(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots \boldsymbol{x}_m, 0; t, \boldsymbol{x}'_n, \boldsymbol{x}'_{n-1}, \ldots \boldsymbol{x}'_1) \tag{8}$$

здесь:

$$\boldsymbol{r}(t) = \exp\left(i\,\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)\boldsymbol{r}\exp\left(-i\,\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right) \tag{9}$$

G — $(m + n)$ — частичная пространственно-временная кореляционная функция, определенная в работе [3]:

$$G(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots \boldsymbol{x}_m, 0; t, \boldsymbol{x}'_n, \boldsymbol{x}'_{n-1}, \ldots \boldsymbol{x}'_1)$$

$$= \sum_{\substack{\alpha\neq\beta\\ \beta\neq\gamma\\ \vdots}} \cdot \sum_{\substack{\alpha'\neq\beta'\\ \beta'=\gamma'\\ \vdots}} \langle \delta(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{r}_\alpha(0)) \cdot \delta(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{r}_\beta(0))\ldots\delta(\boldsymbol{x}_m-\boldsymbol{r}_\nu(0)) \cdot \delta(\boldsymbol{x}'_n-\boldsymbol{r}_{\nu'}(t))\ldots\delta(\boldsymbol{x}'_1-\boldsymbol{r}_{\alpha'}(t))\rangle_T \tag{10}$$

$\langle\ldots\rangle_T$ означает статистическое усреднение по начальным состояниям.

Выражение (8) является наиболее общим для двойного дифференциального сечения рассеяния рентгеновских лучей веществом, которое включает все эффекты многократного рассеяния.

Первый член (8) $(m = n = 1)$ дает хорошо известное выражение для однократного рассеяния

$$\frac{d^2\sigma^{(1)}}{d\varepsilon_f d\Omega} = \sigma_0 \cdot f_0^2 \cdot N \cdot S(\boldsymbol{K}, \omega) \tag{11}$$

где $S(\boldsymbol{K}, \omega)$ — динамический форм-фактор системы.

Учет следующих членов суммы (8) $(m = 1, a = 2)$, проведенный в том же самом приближении, что и в работе [3] (рассматривается упругое рассеяние в газообразной системе из N атомов, взаимодействием которых в поправочном члене пренебрегаем; $t \to 0$, что справедливо для рассеяния рентгеновских лучей с большой степенью точности; рассеивающий объем для облегчения вычислений выбран сферическим и радиусом R) приводит к следующему выражению

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma_0 \cdot f_0^2\left\{N \cdot S(\boldsymbol{K}) + \frac{N^2}{V^2}\cdot f_0 \cdot \frac{8\pi}{k^2}\cdot\frac{e^2}{mc^2}(1+3\sin^2 2kR)\right\}. \tag{12}$$

При обычных плотностях $\sim 3 \cdot 10^{19}$ см$^{-3}$ и $\lambda \sim 10^{-8}$ см поправочный член имеет порядок $\sim(1 \div 4) \cdot f_0 \cdot 10^{12}$, при плотностях $\sim 10^{22}$ см$^{-3}$ имеем $\sim(1 \div 4) f_0 \cdot 10^{17}$, что для веществ с большим Z дает уже ощутимую поправку к однократному рассеянию.

ЛИТЕРАТУРА

[1] М. Гольдбергер, К. Ватсон, *Теория столкновений*, „Мир", Москва 1967.
[2] Т. Ю. Ву, Т. Омура, *Квантовая теория рассеяния*, „Наука", Москва 1969.
[3] S. Sunakawa, Y. Fukui, T. Nishigori, *Progr. Theor. Phys.*, **35**, 228 (1966).
[4] T. Nishigori, S. Yamasaki, S. Sunakawa, *Progr. Theor. Phys.*, **39**, 37 (1968).