

COMPTONOV JAV V M-HLADINE VODÍKOVÉHO ATÓMU

JÁN FISCHER, JÁN WEISS
Katedra fyziky Prírodovedeckej fakulty UK v Bratislave

Podrobné teórie tzv. neperiodických atómových dejov, ku ktorým okrem Comptonovho javu patrí napr. fotoefekt a zrazy, vznikli až po objavení kvantovej mechaniky. Prvé hrubé výsledky v teórii Comptonovho javu na voľnom elektróne dosiahli sa, pravda, už metódami klasickej fyziky na podklade fotónovej teórie žiarenia.

Kvantovo-mechanická teória Comptonovho javu na *viazanom* elektróne (vo vodíkovom atóme), najmä odvodenie rozdeľovacej funkcie pre smerové rozdelenie Comptonových (odrazových) elektrónov, pochádza od G. Wentzla [1] a opiera sa o Diracovu kvantovo-mechanickú teóriu žiarenia.

V ďalšom nadviažeme na práce G. Wentzla, resp. jedného z autorov [2], novej vlny do veľkej kocky objemu $V = \beta$. Potom budú zložky vlnového vektora stojacých vln $\vec{k}_s \left(\left| \vec{k} \right| = \frac{2\pi}{\lambda} \right)$ „kvantované“, t. j. budú tvoriť postupnosť diskretných hodnôt:

$$k_{sx} = \frac{2\pi}{l} s_1; \quad k_{sy} = \frac{2\pi}{l} s_2; \quad k_{sz} = \frac{2\pi}{l} s_3 \quad (s_1, s_2, s_3 = 1, 2, 3, \dots).$$

Trojnica hodnôt s_1, s_2, s_3 však ešte neurčuje polarizáciu vlny. Preto patria ku každej trojici čísel s_1, s_2, s_3 dve na seba kolmé, ale ináč nezávislé zložky elektromagnetických kmitov.

Na základe formálnej analógie výrazov pre energiu žiariaceho poľa a systém harmonických oscilátorov možno podľa Diraca elektromagnetické pole na- hrať sústavou harmonických (nespriahnutých) oscilátorov, vymenajúcich si energiu s korpuskulárnou sústavou atómu. Počet oscilátorov je daný počtom stojacých vln dutinového žiarenia. Ich (kruhová) frekvencia je $\omega_s = c \left| \vec{k}_s \right|$ a energia $\epsilon_s = N_s \cdot \hbar \omega_s$. $N_s = 0, 1, 2, \dots$ sú kvantové čísla poľa. Úhnmá energia poľa je $\sum_s N_s \cdot \hbar \omega_s$. Pre oscilátory platí známe výberové pravidlo: $\Delta N_s = \pm 1$ a $\Delta N_s = 0$ pre všetky $s \neq r$.

§ 2. V práci použijeme tieto symboly (sú usporiadané v abecednom poriadku):

a_{nl}, a_{nl} v čase pomaly premenné pravdepodobnostné amplitúdy diskretného stavu, resp. stavu so spojitou (kladnou) energiou elektrónu
 $\alpha = \frac{me^2}{\hbar^2}$ prevrátená hodnota Bohrovho prvého vodíkového polomeru
 c rýchlosť svetla
 e náboj elektrónu

$\vec{e}_n, \vec{e}_n$ jednotkový vektor vo smere elektrického vektora primárnej, resp. rozptylenej vlny
 ϵ_{n_1, n_2} element poruchovej matice [bez konšt. faktora, definovaný rov. (5, 4)]
 $\Phi(N_1, N_2, \dots)$ vlnová funkcia systému „oscilátorov“ reprezentujúcich elektromagnetické pole

$g = \frac{N_1 \hbar \omega_1}{V}$ hustota energie primárnej vlny

$T(1 + |\mu_0| + 2in)$ gamá funkcia komplexnej premennej

$\hat{H}_i$ operátor interakčnej energie poľa a elektrónu
 $\vec{k}_1, \vec{k}_2$ vlnový vektor primárnej a rozptylenej vlny $\vec{\Delta k} = \vec{k}_2 - \vec{k}_1$

α spojitý parameter energie $W_\alpha = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$
 $\alpha_0 = \frac{Z\alpha}{2n_0}$ (z práce [2])

m hmota elektrónu
 m spojitý kvantový parameter v parabolických súradniciach

μ_0 magnetické kvantové číslo elektrónu
 $n = \frac{Z\alpha}{2\kappa}$ (z práce [2])

$n_0 = n_1 + n_2 + \mu_0 + 1$ hlavné kvantové číslo

n_1, n_2 parabolické kvantové čísla

N_s kvantové číslo elektromagnetického poľa

$N_{n_1 n_2 n_0}$ normovacia konštanta vlnovej funkcie diskretného stavu vodíkového atómu v parabolických súradniciach

$$N_{n_1 n_2 l_0} = \left(\frac{2(Z\alpha)^{2|\mu_0|+3}}{\pi n_0^{2|\mu_0|+4}} \cdot \frac{n_1! n_2!}{[(|\mu_0| + n_1)! (|\mu_0| + n_2)!]^2} \right)^{\frac{1}{2}} \text{ pre } \mu_0 \neq 0$$

$$N_{n_1 n_2 0} = \frac{(Z\alpha)^{\frac{3}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}} n_0^{\frac{3}{2}} n_1! n_2!} \text{ pre } \mu_0 = 0$$

N úhrnná pravdepodobnosť Comptonovho javu (5, 1), (5, 2)

ω_1, ω_2 kruhová frekvencia primárnej a rozptýlenej röntgenovej vlny

$$\Delta\omega = \frac{1}{\hbar} (W_z - W_{n_1}) - (\omega_1 - \omega_{n_2})$$

$$p = \frac{|\Delta k|}{4k_0} \text{ (z práce [2]; tam označené } \omega)$$

$$\psi_{n_l} = u_{n_l} e^{\frac{i}{\hbar} W_{n_l} t}$$

charakteristická funkcia vodlkového atómu v diskretnom stacionárnom stave

$$\psi_{n_l} = u_{n_l} e^{\frac{i}{\hbar} W_{n_l} t}$$

charakteristická funkcia vodlkového atómu v stave so spojitou (kladnou) energiou elektrónu

$\psi_{n_1 n_2 l_0}$ vlnová funkcia Comptonovho elektrónu v parabolických súradniciach

$\vec{r}$ polohový vektor elektrónu

r, ϑ, φ sférické súradnice s polárnou osou vo smere vektora

$$\vec{\Delta k} = \vec{k}_{r_2} - \vec{k}_{r_1}$$

ϱ pomocná veličina bez fyzikálneho významu; jej hodnota je $\varrho = \frac{1}{2}$

s, t pomocné veličiny pre definíciu Laguerrových polynómov:

$$L_{\mu_0+n_1}^{\mu_0}(\xi) = (-1)^{\mu_0} \cdot \left[\frac{\partial^{\mu_0+n_1}}{\partial t^{\mu_0+n_1}} \left(\frac{t^{\mu_0} e^{-\frac{\xi t}{1-t}}}{(1-t)^{\mu_0+1}} \right) \right]_{t=0}$$

a analogický výraz so „s“ pre $L_{\mu_0+n_2}^{\mu_0}(\eta)$

t čas (sec)

$U_{n_1 l_1, n_2 l_2}$ element poruchovej matice (4, 5)

V rýchlosť Comptonovho elektrónu

$$W_{n_1} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{Z\alpha}{3} \right)^2 \text{ energia elektrónu v } M\text{-hladine}$$

$$W_z = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \text{ energia elektrónu v spojitom spektre}$$

$$z_1 = -\frac{2\kappa_0}{\kappa} \left[p + i \left(\varrho + \frac{t}{1-t} \right) \right] \text{ (z práce [2])}$$

$$z_2 = -\frac{2\kappa_0}{\kappa} \left[-p + i \left(\varrho + \frac{s}{1-s} \right) \right] \text{ (z práce [2])}$$

ξ, η, φ parabolické súradnice

$$x = \frac{1}{2} (\xi - \eta); \quad y = \sqrt{\xi\eta} \cos \varphi; \quad z = \sqrt{\xi\eta} \sin \varphi.$$

§ 3. Budeme skúmať sústavu pozostávajúcu z popísaného elektromagnetického poľa a jedného atómu s jedným elektrónom v rôznych stavoch M -hladiny. Budeme ďalej predpokladať:

a) že energia na atóm dopadajúceho fotónu $\hbar\omega$ je malá oproti relativistickej energii elektrónu:

$$\hbar\omega \ll mc^2, \quad (mc^2 = 0,51 \text{ MeV}),$$

t. j. vlnová dĺžka dopadajúceho žiarenia je veľká oproti Comptonovej vlnovej dĺžke $\lambda = \frac{h}{mc} = 0,024 \text{ Å}$;

b) kinetická energia Comptonových (odrazových) elektrónov je veľká oproti ich väzbovej energii v atóme

$$\left(W = \frac{R\hbar c}{9} = 1,5 \text{ eV, resp. } \frac{R\hbar c}{9} Z^2 = 1,5 Z^2 \text{ eV} \right).$$

Energia našej zloženej sústavy skladá sa z energie atomárneho elektrónu nerušeného elektromagnetickým poľom H^e , z energie elektromagnetického poľa H^p a z interakčnej energie poľa s atómom H^i :

$$H = H^e + H^p + H^i.$$

Interakčnú energiu H^i považujeme za poruchu.

Charakteristickú funkciu nerušenej zloženej sústavy píšeme ako súčin charakteristickej funkcie sústavy oscilátorov reprezentujúcich elektromagnetické pole a charakteristickej funkcie vodlkového atómu

$$\psi_{n_l} = u_{n_l} e^{\frac{i}{\hbar} W_{n_l} t}$$

pre diskretne stavy elektrónu,

$$\psi_{n_l} = u_{n_l} e^{\frac{i}{\hbar} W_{n_l} t}$$

pre spojité spektrum.

$$\kappa^2 = \frac{2m W_z}{\hbar^2}.$$

Prítom spojitý parameter energie κ súvisí s energiou elektrónu podľa vzťahu

$$(3,2)$$

Charakteristické funkcie vodľkového atómu ψ_{n_l}, ψ_{n_l} spĺňajú Schrödingrovu rovnicu v tomto tvare:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}^a \psi. \quad (3.3)$$

Charakteristickú funkciu systému oscilátorov označíme $\Phi(N_1, N_2, \dots)$. Vlnovú funkciu atomárneho elektrónu v elektromagnetickom poli röntgenovej vlny (rušená sústavou) ψ hľadáme podľa Diraca v podobe rozvoja podľa charakteristických funkcií sústavy nerušenej

$$\begin{aligned} \psi = & \sum_n \sum_{l, N_1, N_2, \dots} a_{nl}(N_1, N_2, \dots) u_{nl} \Phi(N_1, N_2, \dots) e^{i\left(\frac{W_n}{\hbar} + \sum_s N_s \omega_s\right)t} + \\ & + \int d\kappa \sum_{l, N_1, N_2, \dots} a_{\kappa l}(N_1, N_2, \dots) u_{\kappa l} \Phi(N_1, N_2, \dots) e^{i\left(\frac{W_\kappa}{\hbar} + \sum_s N_s \omega_s\right)t}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Podľa Diracovej poruchovej teórie dostaneme pre rozvojové koeficienty a_{nl} , resp. $a_{\kappa l}$ (v čase pomaly sa meniace pravdepodobnostné amplitúdy) známym spôsobom diferenciálne rovnice

$$\begin{aligned} = & \sum_n \sum_{l, N_1', N_2', \dots} a_{nl}(N_1', N_2', \dots) U_{nl, n(N_1), n(N_2), \dots; N_1', N_2', \dots} \cdot \\ & \cdot e^{i\left[\frac{W_{n'} - W_{n(N_1)}}{\hbar} + \sum_s (N_s' - N_s) \omega_s\right]t} + \\ & + \int d\kappa' \sum_{l, N_1', N_2', \dots} a_{\kappa' l}(N_1', N_2', \dots) U_{\kappa' l, n(N_1), n(N_2), \dots; N_1', N_2', \dots} \cdot \\ & \cdot e^{i\left[\frac{W_{\kappa'} - W_{n(N_1)}}{\hbar} + \sum_s (N_s' - N_s) \omega_s\right]t} \end{aligned} \quad (3.5)$$

$U_{nl, n(N_1), n(N_2), \dots}$ je element poruchovej matice. Príslušný operátor energie vzájomného pôsobenia elektromagnetického pola a atomárneho elektrónu $\hat{H}^i$ („porucha“) má tvar [4] (§ 27)

$$\hat{H}^i = -\frac{e}{mc} (\hat{A} p) + \frac{i\hbar e}{2mc} \hat{A} + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{A}, \quad (3.6)$$

kde $\hat{A}$ je vektorpotenciál elektromagnetického pola vlny,

$$\vec{H} = \text{rot } \vec{A}, \quad \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{d\vec{A}}{dt},$$

($\vec{E}, \vec{H}$ je vektor intenzity elektrického, resp. magnetického pola),

$$\vec{p} = m\vec{v} + \frac{e}{c} \vec{A}$$

($\vec{p}$ je kinetický impulz a $\vec{v}$ je tu polo hový vektor elektrónu).

Pretože pre každé $\vec{A}$ platí

$$\text{rot } \vec{A} = \text{rot } (\vec{A} + \text{grad } F),$$

možno voliť funkciu F , resp. $\vec{A}$ tak, aby $\text{div } \vec{A} = 0$. Potom sa $\hat{H}^i$ redukuje na dva členy

$$\hat{H}^i = -\frac{e}{mc} (\hat{A} p) + \frac{e^2}{m^2 c^2} \hat{A}. \quad (3.7)$$

§ 4. Podľa vyberového pravidla pre harmonický oscilátor ide pri elementárnom Comptonovom jave o nasledujúcu zmenu celkovej sústavy:

Jeden fotón r_1 -ho oscilátora zanikne: $N_{r_1}' = N_{r_1} - 1$; jeden fotón r_2 -ho oscilátora vznikne: $N_{r_2}' = N_{r_2} + 1$ a všetky ostatné $N_s \neq N_{r_1}, N_{r_2}$ sa nemenia: $N_s' = N_s$ (pre $s \neq r_1, r_2$), pričom stavu s energiou W_n do stavu so spojitým spektrom energie W_{κ} čo je spojené s emisou elektrónov z atómu.

Počítaný stav sústavy je daný týmito hodnotami amplitúd a :

$$a_{n_{r_1}}(0, 0, \dots, 0, N_{r_1}, 0) = 1. \quad (4.1)$$

Všetky ostatné pravdepodobnostné amplitúdy $a = 0$.

Pravdepodobnosť, že po uplynutí t sekúnd od okamžiku „zapojenia“ poruchy $\hat{H}^i$ sústava sa bude nachádzať v opísanom stave, t. j., že nastane elementárny Comptonov jav, je daná štvorcom absolútnej hodnoty amplitúdy

$$a_{n_{r_1}}(0, 0, \dots, 1, \dots, N_{r_1} - 1, 0, \dots). \quad (4.2)$$

Túto pravdepodobnosť vypočítame v prvom priblížení podľa Diraca z rovnice (3.5), keď v nej na pravej strane podľa (4.1) za $a_{n_{r_1}}(0, 0, \dots, N_{r_1}, \dots)$ budeme písať 1 a za všetky ostatné amplitúdy $a = 0$, t. j. hodnoty *nulého priblíženia*. Analogicky treba pokračovať pri vypočítavaní vyšších aproximácií.

Dostaneme tak

$$a_{n_{r_1}} = U_{n_{r_1}, n_{r_1}} \frac{e^{i\Delta\omega t} - 1}{W_{n_1} - W_{n_1} - \hbar(\omega_{r_1} - \omega_{r_2})}, \quad (4.3)$$

kde

$$\Delta\omega = \frac{1}{\hbar} (W_{n_1} - W_{n_1}) - (\omega_{r_1} - \omega_{r_2}). \quad (4.4)$$

Matcový element poruchovej energie $U_{n_{r_1}, n_{r_1}}(N_1, N_2, \dots; N_1, N_2, \dots)$ má podľa Diraca [3]¹ tento tvar:

¹ [3] Rovnice (17,8), resp. (17,12). — Opačné znamienko v exponente e -funkcie vy-

$$U_{n_1 l_1, n_2 l_2}(N_1, N_2, \dots; N'_1, N'_2, \dots) = \\ = \frac{2\pi e^2}{m} (e_1 e_2) \left(\frac{\hbar N_{r_1}}{V \omega_{r_1}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\hbar(N_{r_2} + 1)}{V \omega_{r_2}} \right)^{\frac{1}{2}} \int u_{n_2 l_2}^* e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}} u_{n_1 l_1} d\tau. \quad (4.5)$$

$\vec{e}_1, \vec{e}_2$ sú jednotkové vektory vo smere elektrického vektora pôvodnej a rozptýlenej röntgenovej vlny; $N_{r_2} = 1$. Maticový element $U_{n_1 l_1, n_2 l_2}$ pochádza od druhej časti poruchovej energie (3,7), od člena $\frac{e^2}{2mc^2} A$. Prvý člen interakčnej

energie $-\frac{e}{mc} \hat{A} \cdot \hat{p}$ nedáva, ako vieme, pri výpočte maticového elementu $U_{n_1 l_1, n_2 l_2}$ v prvom priblížení príspevok. Menovateľ $W_z - W_{n_1} - \hbar(\omega_{r_1} - \omega_{r_2})$ v „rezonancií“ vyjadruje zachovanie energie pri Comptonovom jave. V tomto prípade preberá odrazový elektrón celý rozdiel energií fotónov $W_z - W_{n_1} = \hbar(\omega_{r_1} - \omega_{r_2})$.

§ 5. Úhrnná pravdepodobnosť Comptonovho javu, t. j. počet za čas t z vodľového atómu v stave W_{n_1} emitovaných odrazových elektrónov, je daná výrazom

$$N = \sum_{l_2} \int d\mathbf{x} |a_{x l_2}|^2. \quad (5.1)$$

Keď sa zaujíname aj o smerové rozdelenie týchto elektrónov, vyjadríme tento počet s Wentzlovom [1]² v tvare

$$N = \int d\mathbf{r} \left| \sum_{l_2} \int d\mathbf{x} a_{x l_2} u_{x l_2} \right|^2, \quad (5.2)$$

kde za $a_{x l_2}$ dosadíme podľa rov. (4,3), (4,4) a (4,5) a $u_{x l_2}$ je charakteristická funkcia spojitého spektra atómu vodíka. V prvom rade pôjde o výpočet výrazu

$$\sum_{l_2} \varepsilon_{n_1 l_1, n_2 l_2} (\vec{\Delta k})^{n_2 l_2}, \quad (5.3)$$

$$\text{kde } \vec{\Delta k} = \vec{k}_{r_2} - \vec{k}_{r_1} \text{ a}$$

$$\varepsilon_{n_1 l_1, n_2 l_2} = \int d\mathbf{r} e^{i(\vec{r} \cdot \vec{\Delta k})} u_{n_1 l_1} u_{n_2 l_2}^*. \quad (5.4)$$

Keď problém napíšeme v polárnych súradniciach a polárnu os položíme do smeru vektora $\vec{\Delta k}$, potom integrand v (5,4) bude závisieť od súradnice ϑ aj exponenciálne, práve prostredníctvom retardáčného faktora $e^{i(\vec{r} \cdot \vec{\Delta k})}$. Preto pre kvantové číslo l_2 nedostaneme výberové pravidlo a súčet podľa l_2 bude nekonečný a spravidla ťažko spočítateľný. Túto ťažkosť možno podľa Wentzla [1]³ plynúť z toho, že kvôli zhode s inou prácou jedného z autorov použili sme Schrödingerovu

rovnica v tvare $\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$, t. j. v tvare $-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$, namiesto $+i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$.

² [1], § 7, str. 352.

³ [1], § 11.

obísť tak, že sa problém rieši v parabolických súradniciach ξ, η, φ , ktoré definujeme:

$$x = \frac{1}{2} (\xi - \eta), \quad y = (\xi \eta)^{\frac{1}{2}} \cos \varphi, \quad z = (\xi \eta)^{\frac{1}{2}} \sin \varphi, \\ r = \frac{1}{2} (\xi + \eta); \quad d\mathbf{r} = \frac{1}{4} (\xi + \eta) d\xi d\eta d\varphi.$$

Použitie parabolických súradníc má tú výhodu, že stavy elektrónu v spojitom spektre nie sú určené spojitým parametrom energie ε a diskretným kvantovým číslom l_2 , ale *dvoma spojitými* parametrami ε, m .⁴ (Magnetické kvantové číslo μ_0 je v obidvoch prípadoch totožné.) Následkom toho nekonečný súčet podľa kvantového čísla l_2 (5,3) prejde v nekonečný integrál podľa spojitého parametra m , ktorý možno jednoduchšie vyčíslit.

§ 6. Obrátime sa teraz k vlastnému výpočtu vlnových funkcií z rôznych elektrónových stavov M -hladiny emitovaných Comptonových elektrónov a z týchto funkcií odvodíme rozdeltovacu funkciu odrazových elektrónov podľa rôznych smerov emisie z atómu.

Pre náš výpočet použijeme všeobecné vzorec, odvodené jedným z autorov v inej práci. Vlnová funkcia ψ Comptonovho elektrónu, emitovaného zo holickej kvantové čísla diskretného stavu; μ_0 magnetické kvantové číslo; $n_1 + n_2 + \mu_0 + 1 = n_0$ hlavné kvantové číslo)

$$\psi = - \frac{e^{\frac{\pi i}{2}(1 - |\mu_0|)}}{8\pi \kappa_0 r^{1+2in}} \cdot N_{n_1 n_2 \mu_0} \cdot \Gamma(1 + |\mu_0| + 2in) e^{\pi i \varphi} e^{-i\varphi} (|\mu_0| + \\ + n_1) ! (|\mu_0| + n_2) ! \sin |\mu_0| \vartheta \frac{\cos \mu_0 \varphi}{\sin \mu_0 \varphi}.$$

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sum_{r=0}^{n_1} \sum_{\delta=0}^{n_2} \frac{1}{r! \delta!} \left(\frac{|\mu_0| + n_1 - r}{|\mu_0|} \right) \left(\frac{|\mu_0| + n_2 - \delta}{|\mu_0|} \right) \right\}$$

$$\left. \frac{\partial^r \partial \vartheta^\delta}{\partial r! \partial \vartheta^\delta} \left[\frac{\left(\frac{z_1 + 1}{2} \right) \left(\frac{z_2 + 1}{2} \right)^{2in}}{\left(\varepsilon(1 + \cos \vartheta) \left(z_1 - \frac{1}{2} \right) \left(z_2 + \frac{1}{2} \right) + \varepsilon(1 - \cos \vartheta) \left(z_1 + \frac{1}{2} \right) \left(z_2 - \frac{1}{2} \right) \right)^{\frac{1}{2} + \frac{\mu_0}{2} + i\vartheta}} \right] \right\}_{r=\delta=0}^{\frac{1}{2} + \frac{\mu_0}{2} + i\vartheta} \quad (6.1)$$

Pritom píšeme $\cos \mu_0 \varphi$ pre $\mu_0 \geq 0$ a $\sin \mu_0 \varphi$ pre $\mu_0 < 0$. $N_{n_1 n_2 \mu_0}$ sú normovacie konštanty počítateľného stavu, $\Gamma(1 + |\mu_0| + 2in)$ je gamma funkcia komplexného argumentu.

⁴ Parameter „ m “ v ďalších výrazoch nevystupuje spoločne s hmotou elektrónu, ktorú sme označili rovnakým písmenom.

⁵ [2], str. 503, rov. (21).

V zmysle zjednodušujúcich predpokladov, vyslovených v § 3, vzorec (6,1) čiastočne zjednodušíme. Číslo n vo vzorci znamená podiel $n = \frac{Z\alpha}{2\kappa}$, kde

$$\frac{\hbar^2}{2m} (Z\alpha)^2 \text{ je väzbová energia elektrónu v } K\text{-hladine a } \frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 \text{ je kinetická energia}$$

Comptonových elektrónov. Podľa predpokladu je $\frac{Z\alpha}{2\kappa} = n \ll 1$. Zanedbáme

$2in$ popri 1. Ako na analogickom výraze ukázal Wentzel [1]⁶ možno výraz $\left[\left(z_1 + \frac{1}{2} \right) \left(z_2 + \frac{1}{2} \right) \right]^{2in}$ v (6,1) pred vykonaním naznačených diferenciácií pre $n \ll 1$ položiť rovné 1. Zlomok vo veľkej zátvorke výrazu (6,1) sa potom zjednoduší na

$$\frac{1}{\kappa(1 + \cos \vartheta) \left(z_1 - \frac{1}{2} \right) \left(z_2 + \frac{1}{2} \right) + \kappa(1 - \cos \vartheta) \left(z_1 + \frac{1}{2} \right) \left(z_2 - \frac{1}{2} \right)}$$

Pretože neberieme zreteľ na spin elektrónu, máme v M -hladine vodikového atómu deväť počítacích stavov. Budeme mať nasledujúce kombinácie parádnu bude $n_1 + n_2 + \mu_0 + 1 = n_0 = 3: 200, 020, 110, 101^+, 101^-, 011^+, 011^-, 002^+, 002^-$.

V súlade s tým dostaneme pre Comptonov elektrón deväť vlnových funkcií, ktoré označíme ψ_{000}^+ , ψ_{020}^+ , ψ_{110}^+ , ψ_{001}^+ , ψ_{101}^+ , ψ_{011}^+ , ψ_{002}^+ , ψ_{002}^- . Vo vzorci (6,1) vykonáme naznačené diferenciácie podľa ϱ , t a s , pričom podľa § 2 platí

$$\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{2i\kappa_0}{\kappa} \frac{1}{(1-t)^2} \frac{\partial}{\partial z_1}; \quad \frac{\partial}{\partial s} = -\frac{2i\kappa_0}{\kappa} \frac{1}{(1-s)^2} \frac{\partial}{\partial z_2};$$

$$\frac{\partial}{\partial \varrho} = -\frac{2i\kappa_0}{\kappa} \left(\frac{\partial}{\partial z_1} + \frac{\partial}{\partial z_2} \right).$$

(6,2)

Ked' potom za čísla z_1 a z_2 a $\Delta_{n_1 n_2 \mu_0}$ dosadíme podľa § 2 príslušné hodnoty, dostaneme pre funkcie $\psi_{n_1 n_2 \mu_0}^+$:

$$\psi_{000}^+ = -\frac{2i(Z\alpha)^{\frac{5}{2}} \kappa}{9\pi^{\frac{3}{2}} \left(\kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 + \frac{Z^2 \alpha^2}{9} + 2\kappa |\vec{\Delta}k| \cos \vartheta \right)^4} \frac{e^{-i\kappa r}}{r} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \kappa^4 + |\vec{\Delta}k|^4 + 2\kappa^2 |\vec{\Delta}k|^2 - 2 \frac{Z^2 \alpha^2}{9} \left(\kappa^2 + 3|\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{18} \right) + 4\kappa |\vec{\Delta}k| \left(\kappa^2 + \right. \right.$$

$$\left. + |\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{3} \right) \cos \vartheta + 4\kappa^2 \left(|\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{9} \right) \cos^2 \vartheta - 4i \frac{Z\alpha}{3} \left[|\vec{\Delta}k| \left(\kappa^2 + \right. \right.$$

$$\left. + |\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{9} \right) + \kappa \left(\kappa^2 + 3|\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{9} \right) \cos \vartheta + 2\kappa^2 |\vec{\Delta}k| \cos^2 \vartheta \left. \right\};$$

⁶ [1] — Pozri poznámku pod čiarou na str. 362 citovanej práce.

$$\psi_{000}^- = -\frac{2i(Z\alpha)^{\frac{5}{2}} \kappa}{9\pi^{\frac{3}{2}} \left(\kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 + \frac{Z^2 \alpha^2}{9} + 2\kappa |\vec{\Delta}k| \cos \vartheta \right)^4} \frac{e^{-i\kappa r}}{r} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \kappa^4 + |\vec{\Delta}k|^4 + 2\kappa^2 |\vec{\Delta}k|^2 - 2 \frac{Z^2 \alpha^2}{9} \left(\kappa^2 + 3|\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{18} \right) + \right.$$

$$\left. + 4\kappa |\vec{\Delta}k| \left(\kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{3} \right) \cos \vartheta + 4\kappa^2 \left(|\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{9} \right) \cos^2 \vartheta + \right.$$

$$\left. + 4i \frac{Z\alpha}{3} \left[|\vec{\Delta}k| \left(\kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{9} \right) + \kappa \left(\kappa^2 + 3|\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{9} \right) \cos \vartheta + \right. \right.$$

$$\left. + 2\kappa^2 |\vec{\Delta}k| \cos^2 \vartheta \right] \left. \right\};$$

$$\psi_{110}^+ = -\frac{2i(Z\alpha)^{\frac{5}{2}} \kappa}{9\pi^{\frac{3}{2}} \left(\kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 + \frac{Z^2 \alpha^2}{9} + 2\kappa |\vec{\Delta}k| \cos \vartheta \right)^4} \frac{e^{-i\kappa r}}{r} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \kappa^4 + |\vec{\Delta}k|^4 + 2\kappa^2 |\vec{\Delta}k|^2 + 2 \frac{Z^2 \alpha^2}{9} \left(-3\kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 + \frac{Z^2 \alpha^2}{18} \right) + 4\kappa |\vec{\Delta}k| \left(\kappa^2 + \right. \right.$$

$$\left. + |\vec{\Delta}k|^2 + \frac{Z^2 \alpha^2}{9} \right) \cos \vartheta + 4\kappa^2 \left(|\vec{\Delta}k|^2 + 2 \frac{Z^2 \alpha^2}{9} \right) \cos^2 \vartheta \left. \right\};$$

$$\psi_{101}^+ = \frac{8(Z\alpha)^{\frac{5}{2}} \kappa^2}{27\pi^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{\sin \vartheta \sin \varphi}{\left(\kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 + \frac{Z^2 \alpha^2}{9} + 2\kappa |\vec{\Delta}k| \cos \vartheta \right)^4} \frac{e^{-i\kappa r}}{r} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{9} + 2\kappa |\vec{\Delta}k| \cos \vartheta - 2i \frac{Z\alpha}{3} (|\vec{\Delta}k| + \kappa \cos \vartheta) \right\};$$

$$\psi_{101}^- = \frac{8(Z\alpha)^{\frac{5}{2}} \kappa^2}{27\pi^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{\sin \vartheta \sin \varphi}{\left(\kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 + \frac{Z^2 \alpha^2}{9} + 2\kappa |\vec{\Delta}k| \cos \vartheta \right)^4} \frac{e^{-i\kappa r}}{r} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{9} + 2\kappa |\vec{\Delta}k| \cos \vartheta - 2i \frac{Z\alpha}{3} (|\vec{\Delta}k| + \kappa \cos \vartheta) \right\};$$

$$\psi_{011}^+ = \frac{8(Z\alpha)^{\frac{5}{2}} \kappa^2}{27\pi^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{\sin \vartheta \cos \varphi}{\left(\kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 + \frac{Z^2 \alpha^2}{9} + 2\kappa |\vec{\Delta}k| \cos \vartheta \right)^4} \frac{e^{-i\kappa r}}{r} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{9} + 2\kappa |\vec{\Delta}k| \cos \vartheta + 2i \frac{Z\alpha}{3} (|\vec{\Delta}k| + \kappa \cos \vartheta) \right\};$$

$$\psi_{011}^- = \frac{8(Z\alpha)^{\frac{5}{2}} \kappa^2}{27\pi^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{\sin \vartheta \sin \varphi}{\left(\kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 + \frac{Z^2 \alpha^2}{9} + 2\kappa |\vec{\Delta}k| \cos \vartheta \right)^4} \frac{e^{-i\kappa r}}{r} \cdot$$

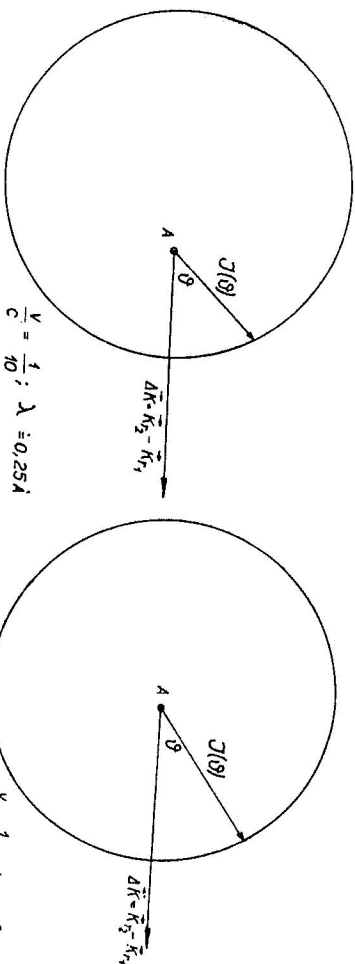
$$\cdot \left\{ \kappa^2 + |\vec{\Delta}k|^2 - \frac{Z^2 \alpha^2}{9} + 2\kappa |\vec{\Delta}k| \cos \vartheta + 2i \frac{Z\alpha}{3} (|\vec{\Delta}k| + \kappa \cos \vartheta) \right\};$$

Smerové rozdelenie z M -hladiny emitovaných Comptonových elektrónov sa len málo líši od smerového rozdelenia elektrónov z K - a L -hladiny, čo obzvlášť jasne vynikne, keď vo vzorci (8,5)

$$\frac{1 + 4 \frac{v}{c} \cos \vartheta}{\left(1 + \frac{v}{c} \cos \vartheta\right)^8}$$

rozvineme podľa mocnín $\frac{v}{c}$ a relativistické členy, t. j. členy kvadratické a vyššie v rozvoji zanedbáme:

$$J(\vartheta, \varphi)_K \sim \left(1 + 4 \frac{v}{c} \cos \vartheta\right) \left(1 - 8 \frac{v}{c} \cos \vartheta + \dots\right) = 1 - 4 \frac{v}{c} \cos \vartheta + \dots$$



Obr. 2a, b.

Keď si v rovnakom priblížení napíšeme podobné rozdeľovacie funkcie pre Comptonove elektróny emitované z K - a L -hladiny podľa prác G. Wentzla [1] a jedného z autorov [2] a rozvineme podľa mocnín $\frac{v}{c}$ a relativistické členy zanedbáme, dostaneme tak:

$$J(\vartheta, \varphi)_K \sim \frac{1}{\left(1 + \frac{v}{c} \cos \vartheta\right)^4} = 1 - 4 \frac{v}{c} \cos \vartheta + \dots$$

$$J(\vartheta, \varphi)_L \sim \frac{1 + 2 \frac{v}{c} \cos \vartheta}{\left(1 + \frac{v}{c} \cos \vartheta\right)^6} = 1 - 4 \frac{v}{c} \cos \vartheta + \dots$$

Maximálna emisia vo smere $\vartheta = \pi$ bude tým výraznejšia, čím bude pomer $\frac{v}{c}$ väčší. Obr. 2 znázorňuje polárny diagram závislosti J od ϑ pre dve hodnoty pomeru $\frac{v}{c}$ a ľubovoľnú hladinu.

§ 9. Nakoniec ešte porovnáme absolútnu hodnotu úhrnnej pravdepodobnosti pre emisiu Comptonovho elektrónu z M -hladiny, t. j. súčet pravdepodobností emisie do všetkých smerov, s absolútnymi hodnotami úhrnnej pravdepodobností v K - a L -hladine. Úhrnná pravdepodobnosť Comptonovho javu, t. j. pravdepodobnosť, že za čas t s atómom spríadené pole žiarenia prejde zo stavu $N_1, N_2, \dots, N_r, \dots, N_r, \dots$ do stavu $N_1, N_2, \dots, N_r + 1, \dots, N_r - 1, \dots$ a súčasne atóm z počiatočného stavu n_1, l_1 prejde do ktoréhokoľvek stavu so spojitou (kladnou) energiou elektrónu, je podľa § 5 rov. (5,2)

$$N = \int d\tau \left| \sum_{l_2} \int d\mathbf{x} u_{x l_2}^* u_{x l_2} \right|^2.$$

Dosadíme tu za $u_{x l_2}$ podľa (4,3) a (4,5) a dostaneme

$$N = 4\pi^2 \left[\frac{e^2}{m} (e_{r_1} \cdot e_{r_2}) \right]^2 \cdot \frac{2\hbar^2 N_{r_1}}{V^2 \omega_{r_1} \omega_{r_2}} \int d\tau \left| \int d\mathbf{x} \frac{e^{i\Delta\omega t} - 1}{\hbar \Delta\omega} \cdot \sum_{n_1 l_1, n_2 l_2} \epsilon(\vec{A} \vec{k}) u_{x l_2} \right|^2, \quad (9,1)$$

kde

$$\Delta\omega = \frac{1}{\hbar} (W_x - W_{n_1}) - (\omega_{r_1} - \omega_{r_2}), \quad (9,2)$$

$$\epsilon(\vec{A} \vec{k}) = \int u_{x l_2}^* e^{i(\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} u_{n_1 l_1} d\tau \quad (9,3)$$

a kládli sme $N_{r_1} = 1$.

Výraz $\sum_{l_2} \epsilon(\vec{A} \vec{k}) u_{x l_2}$ sme v § 6 vypočítali a naši sme preň vyjadrenie [rov. (6,1)]

$$\frac{e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{r}}}{r} A_x(\vartheta, \varphi).$$

Faktor pred integrálom v (9,1) označíme

$$C = \frac{8\pi^2 e^4 \hbar^2 (e_{r_1} \cdot e_{r_2})^2 N_{r_1}}{m^2 V^2 \omega_{r_1} \omega_{r_2}} \quad (9,4)$$

a priestorový element $d\tau$ vyjadríme vo sférických súradniciach

$$d\tau = r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi.$$

Potom bude (9,1)

$$N = C \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi \int d\mathbf{x} \frac{e^{i\Delta\omega t} - 1}{\hbar \Delta\omega} \cdot \frac{e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{r}}}{r} A_x(\vartheta, \varphi) \cdot \int_0^\infty d\mathbf{x}' \frac{e^{-i\Delta\omega' t} - 1}{\hbar \Delta\omega'} \cdot \frac{e^{-i\mathbf{x}' \cdot \mathbf{r}}}{r} A_x^*(\vartheta, \varphi). \quad (9,5)$$

Integráciu podľa r a z' vykonáme podľa Fourierovej teoremy

$$\int_0^\infty dr \int_0^\infty dz' \frac{e^{-it\Delta\omega'} - 1}{\hbar\Delta\omega'} A_z^*(\theta, \varphi) e^{ir(x-z)} = \pi \frac{e^{-it\Delta\omega} - 1}{\hbar\Delta\omega} A_z^*(\theta, \varphi). \quad (9,6)$$

Tento výsledok dosadíme do (9,5) a vykonáme integráciu podľa z

$$N = \frac{C\pi}{\hbar^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin\theta d\theta d\varphi \int_0^\infty \frac{\sin^2 \frac{t}{2} \left[\frac{1}{\hbar} (W_z - W_{n_1}) - (\omega_{r_1} - \omega_{r_2}) \right]}{\left[\frac{1}{4} \left(\frac{1}{\hbar} (W_z - W_{n_1}) - (\omega_{r_1} - \omega_{r_2}) \right) \right]^2} |A_z(\theta, \varphi)|^2 dz. \quad (9,7)$$

Zavedieme substitúciu

$$\frac{1}{2} \left[\frac{1}{\hbar} (W_z - W_{n_1}) - (\omega_{r_1} - \omega_{r_2}) \right] = \xi; \quad dW_z = 2\hbar d\xi \quad (9,8)$$

a (9,7) upravíme

$$N = \frac{2C\pi^2 t}{\hbar} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin\theta d\theta d\varphi \int_{\xi_0}^\infty \left(\frac{dW_z}{dz} \right)^{-1} |A_z(\theta, \varphi)|^2 \frac{\sin^2 \xi t}{\pi \xi^2 t} d\xi. \quad (9,9)$$

Výraz $\frac{\sin^2 \xi t}{\pi \xi^2 t}$ má vlastnosť delta funkcie $\delta(\xi)$ pre $t \rightarrow \infty$. Integračná hranica $\xi_0 = -\frac{W_{n_1}}{\hbar} - (\omega_{r_1} - \omega_{r_2})$. Integrál podľa ξ bude preto

$$\left(\frac{dW_z}{dz} \right)^{-1} |A_z(\theta, \varphi)|^2 \quad (9,10)$$

s hodnotou z , vyhovujúcou podmienke

$$\frac{W_z - W_{n_1}}{\hbar} - (\omega_{r_1} - \omega_{r_2}) = 0.$$

Funkcia $\frac{|A_z(\theta, \varphi)|^2}{r^2}$ je totožná s výrazom (7,2), ktorý vzhľadom na podmienky uvedené v § 3, totiž $\hbar\omega \ll mc^2$ a $\left(\frac{Z\alpha}{3}\right)^2 \ll z^2$ sa zjednoduší na (8,5). Keď teda za $|A_z(\theta, \varphi)|^2$ dosadíme podľa (8,5), bude pravdepodobnosť elementárneho Comptonovho javu podľa (9,9), (9,10), resp. (9,4) a (3,2)

$$N = \frac{64}{27} \cdot \frac{\pi e^4 (Z\alpha)^5 t}{m\hbar z^2} \cdot \frac{N_{r_1}(\epsilon_{r_1}, \epsilon_{r_2})^2}{V^2 \omega_{r_1} \omega_{r_2}} \cdot \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1 + 4 \frac{v}{c} \cos\theta}{\left(1 + \frac{v}{c} \cos\theta\right)^8} \sin\theta d\theta d\varphi. \quad (9,11)$$

Integrál podľa θ a φ sa rovná 4π .

Výraz N udáva pravdepodobnosť, že za t sekúnd od počiatku pôsobenia žiareného poľa na atóm nastane Comptonov jav, pri ktorom fotón rozptýleného

žiarenia má frekvenciu ω_{r_2} . Pripustíme teraz pre rozptýlené žiarenie všetky frekvencie ω a zavedieme zmenu v označení: $\omega_{r_2} \rightarrow \omega$ pre rozptýlenú vlnu a $\omega_{r_1} \rightarrow \omega_1$ pre primárnu vlnu. Potom bude pravdepodobnosť Comptonovho javu, ktorý primárny fotón o frekvencii ω_1 prevádza do frekvencieho intervalu $\omega, \omega + d\omega$ úmerná počtu stojatých vln vo frekvencnom intervale $d\omega$ žiarenia v našom ohraničenom elektromagnetickom poli v objeme V . Tento počet je

$$\frac{V\omega^2}{2\pi^2 c^3} d\omega$$

a z neho do priestorového uhla $d\Omega$ pevného smeru pripadá

$$\frac{V\omega^2}{2\pi^2 c^3} d\omega \cdot \frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{V\omega^2}{8\pi^3 c^3} d\omega d\Omega.$$

Pre energiu vyžiarenú za 1 sekundu z atómu do pevného priestorového uhla $d\Omega$ a frekvencného intervalu $d\omega$ máme

$$J_\omega d\omega d\Omega = \frac{N}{t} \cdot \frac{V\omega^2}{8\pi^3 c^3} \hbar\omega d\omega d\Omega$$

$$J_\omega d\omega d\Omega = \frac{32}{27\pi} \cdot \frac{e^4 (Z\alpha)^5}{c^3 m\hbar z^2} \cdot \left(\frac{\omega}{\omega_{r_1}} \right)^2 g \cdot \cos^2 \Phi d\omega d\Omega, \quad (9,12)$$

kde $g = \frac{N_{r_1} \cdot \hbar\omega_1}{V}$ je hustota energie primárnej vlny. Faktor $\cos^2 \Phi$, kde Φ je rozptylový uhol, pochádza od súčinu $(\epsilon_{r_1} \cdot \epsilon_{r_2})^2$, ako plynie z úvahy. Myslíme si polarizovanú rozptýlenú vlnu zloženú zo zložky, ktorej elektrický vektor kmitá v rovine elektrického vektora primárnej vlny a vlnovej normály rozptýlenej vlny, a zo zložky kolmej. Druhá (kolmá) zložka dáva v súčine $(\epsilon_{r_1} \epsilon_{r_2})^2$ nulový príspevok.

Od výrazu $J_\omega d\omega d\Omega$ jednoducho završíme absorpčný koeficient absorpcie röntgenového žiarenia, spôsobenej Comptonovým efektom, ako aj intenzita rozptýleného žiarenia, t. j. intenzita Comptonovej spektrálnej čiary. S týmito otázkami hodia sa autori zaoberať v inej práci.

Nakoniec prirovnáme ešte úhlný tok energie $J_\omega d\omega d\Omega$ z M -hladiny s analógickými výrazmi pre K - a L -hladinu. Použili sme výsledky G. Wentzla [1] (§ 15) pre K -hladinu a jedného z autorov [2] (§ 7) pre L -hladinu. Výrazy $(J_\omega)_K$, $(J_\omega)_L$, $(J_\omega)_M$ sú okrem číselných faktorov totožné. Na základe týchto výsledkov naši sme pre pomer hodnôt J_ω v hladinách K , L , a M :

$$(J_\omega)_K : (J_\omega)_L : (J_\omega)_M = 32 : \frac{32}{8} : \frac{32}{27}.$$

LITERATÚRA

1. Wentzel G., Über den Rückstoß beim Comptoneffekt am Wasserstoffatom (Zeitschrift für Physik, 58, 1929).
2. Fischer J., Über die retardierten Matrixelemente in der Theorie der Streuung und Absorption von Röntgenstrahlen (Annalen der Physik, Bd. 11, 1931).
3. Handbuch der Physik XXIV/1 (1933), str. 740.
4. Blochineev D. I., Základy kvantové mechaniky (Nakl. ČSAV, Praha 1956).
- Došlo 14. III. 1956.