

A COMPTON-SÁV PROFILJÁNAK ELMÉLETI MEGHATÁROZÁSA

KÓNYA ALBERT

Előadta az 1950. november 28-án tartott osztályülésen.

Bevezetés

Ismeretes, hogy atomokon történő Röntgensugár-szóródáskor fellép a Rayleigh-szórás, mely a beeső λ hullámhosszal azonos hullámhosszú sugarakból áll, és a Compton-szórás. Ez utóbbinak hullámhosszára Compton¹ a

$$\lambda_c = \lambda_i + 2 \gamma \sin^2 \Theta/2,$$
$$\gamma = \frac{h}{mc} = 0,00243 \text{ \AA} \quad (1)$$

formulát vezette le, mely azonban csak akkor érvényes, ha a szóródás *szabad és nyugalomban levő* elektronokon történik. (A formulában λ_c a Compton-vonal hullámhosszát, h a Planck-féle állandót, m az elektron tömegét, c a fénysebességet vákuumban, Θ pedig az eltérítés szögét jelenti).

A kísérleti eredmények szerint azonban ez az inkohereus szórt sugárzás nem egyetlen éles vonalból áll, hanem keskeny sávot alkot, melyben a szóró atomra jellemző intenzitáseloszlás alakul ki. A maximális intenzitáshoz tartozó hullámhossz közel λ_c -hez esik és az intenzitáseloszlás erre a maximumra nézve közel szimmetrikus.² Ennek a jelenségnek nyilván az az oka, hogy a szórás nem szabad és nyugvó elektronokon, hanem az atomhoz kötött és mozgást végző elektronokon történik. Wentzel³, Schnaidt⁴, Bloch⁵ és Franz⁶ kvantum-mechanikai vizsgálataikkal kimutatták, hogy a maximális intenzitás helyének λ_c -től való kismértékű eltolódását, valamint az intenzitáseloszlásban tapasztalható csekély aszimmetriát relativisztikus effektus és az elektronok kötött volta okozzák. A sávon belüli intenzitáseloszlást, azaz a Compton-sáv »profilját« döntő módon azonban az elektronok impulzuseloszlása határozza meg.

Du Mond a fény korpuszkuláris felfogásából kiindulva olyan elméletet dolgozott ki⁷, amely módot ad a Compton-sáv profiljának közelítő számítására. Mivel a következőknek ez szolgál alapjául, röviden ismertetjük ennek az elméletnek az eredményeit.

Ez az elmélet lényegében a Compton-effektus jól ismert, elemi korpuszkuláris magyarázatának általánosítása arra az esetre, ha a szóródás nem nyugvó, hanem adott impulzuseloszlású elektronokon történik.

Ha a foton mozgó elektronnal ütközik, akkor a Compton-féle energia-vesztésen kívül még Doppler-effektus is fellép, ami ugyancsak megváltoztatja a szórt sugárzás hullámhosszát. Ennek a járulékos hullámhosszváltozásnak a

nagysága a szórást okozó elektron kezdeti impulzusának irányától és nagyságától függ.

Du Mond eredménye szerint, ha a szórás sok elektronon történik, melyek mindegyike p nagyságú kezdeti impulzussal bír, de az impulzusok iránya a tér irányaiban egyenletes eloszlást mutat, úgy ezek az elektronok λ_c körül

$$- 2 \frac{p}{mc} \lambda^* \leq l \leq 2 \frac{p}{mc} \lambda^*, \quad (2)$$

$$\lambda^* = \lambda_i \sin \Theta/2$$

intervallumban okoznak szórt sugárzást (l a hullámhossztérést jelenti λ_c -től mérve).

Tekintsünk most egy atomot, melyben az elektronok impulzuseloszlása $\Phi(p)$ (vagyis $\Phi(p)$ adja azon elektronok számát, melyek impulzusa p és $p + dp$ közötti érték).

Mint (2)-ből látható, azok az elektronok, melyeknek impulzusa $p = \frac{mcl}{2\lambda^*}$ és $p + dp$ között van, λ_c körül $2l$ hosszúságú intervallumban okoznak szórást. Jelöljük az így keletkező intenzitást dI -vel. Természetes feltevés, hogy a keletkező összintenzitás az őt okozó elektronok számával arányos:

$$4 \frac{p}{mc} \lambda^* dI = k' \Phi(p) dp,$$

amiből

$$I(q) = k \int_q^\infty \Phi(p) dp, \quad (3)$$

$$q = \frac{mcl}{2\lambda^*}$$

adja a Compton-sáv intenzitáseloszlását. Ennek ismeretében egyszerűen nyerjük az ú. n. felezési sáv szélességet is, vagyis azon hullámhosszeltolódás kétszeresét, melyre

$$\frac{I(I_0)}{I_0} = \frac{1}{2}.$$

Az elektronok impulzuseloszlásának meghatározása statisztikus tárgyalásmód alapján

Célunk egy egyszerű és kevés numerikus számolást igénylő módszer ismertetése, mellyel egy atom elektronjainak impulzuseloszlását jó közelítéssel meg lehet határozni. A számítások keresztülviteléhez szükséges, hogy az elektronok sűrűségeloszlása a koordinátatérben, ϱ , ismert legyen. A következőkben csak azzal az esettel foglalkozunk, amikor $\varrho = \varrho(r)$, ahol r a magtól mért távolságot jelenti.

A statisztikus tárgyalásnak megfelelően bontsuk fel az atom térfogatát dv elemi térfogatokra, melyekben a potenciál változásától már eltekinthetünk, de amelyekbe még elég sok elektron esik, hogy a statisztikus tárgyalás jogos legyen. Mivel az elektronok a Fermi-statisztikát követik, a mondott feltételek esetén a dv -be eső ϱdv számú elektront úgy tekinthetjük, mint amelyek az abszolút hőmérséklet nullapontján levő teljesen degenerált gázt alkotnak. Ebből pedig ismert módon következik, hogy a dv -ben levő elektronok impulzusai nulla és

$$p_m = (3 \pi^2)^{1/3} \varrho^{1/3} = 3,0037 \varrho^{1/3} \text{ at. egys.} \quad (4)$$

maximális érték között minden lehetséges értéket betöltenek, vagyis ezek az elektronok az impulzustér kezdőpontja körül a p_m sugarú gömb belsejét töltik ki.

$\varrho(r)$ a gyakorlatban előforduló esetekben mindig monoton csökkenő függvénye r -nek, — s így (4) szerint ugyanez érvényes p_m -re is. Tehát p_m -nél nagyobb impulzusú elektronok a koordinátatérben csak a mag körüli $r = r(p_m)$ sugarú gömbön belül lehetnek. Így azok az elektronok, melyek impulzusa p és $p + dp$ között van, a koordinátatérben $\frac{4\pi}{3} [r(p)]^3$ térfogatot, az impulzustérben pedig $4\pi p^2 dp$ térfogatot, töltenek ki. A fázistérben kitöltött térfogat ezért

$$4\pi p^2 dp \cdot \frac{4\pi}{3} [r(p)]^3 = n h^3, \quad (5)$$

ahol n a fázistér azon h^3 nagyságú elemi celláinak számát jelenti, melyeket a p és $p + dp$ közti impulzussal rendelkező elektronok betöltenek. Ezen elektronok száma azonban $\Phi(p) dp$. Mivel az elektronokra érvényes a Pauli-elv, így minden betöltött, h^3 nagyságú fázistércellába az abszolút hőmérséklet nullapontján 2 elektron esik, vagyis

$$2n = \Phi(p) dp. \quad (6)$$

(5) és (6) alapján pedig

$$\Phi(p) = \frac{32 \pi^2}{3 h^3} [r(p)]^3 p^2,$$

vagy atomi egységekben kifejezve

$$\Phi(p) = \frac{4}{3\pi} [r(p)]^3 p^2. \quad (7)$$

A levezetésből következik, hogy ha ϱ a normált sűrűségeloszlás, azaz

$$\int \varrho dv = N,$$

(N az atom elektronjainak száma), úgy $\Phi(p)$ is normált:

$$\int \Phi(p) dp = N.$$

(7) megadja tehát az elektronok impulzuseloszlását. Ennek segítségével a Compton-sáv profilja (v. ö. (3)-mal)

$$I(q) = k \int_q^{\infty} \frac{4}{3\pi} [r(p)]^3 p dp.$$

Duncanson és Coulson szerint a k arányossági tényező értékét úgy választjuk, hogy ú. n. normált profilt kapjunk, vagyis melyre

$$\int_{-\infty}^{+\infty} I(q) dq = 1.$$

Egyszerű számítás mutatja, hogy ez $k = \frac{1}{2N}$ -nel teljesül. Így végül is

$$I(q) = \frac{2}{3\pi N} \int_q^{\infty} [r(p)]^3 p dp. \quad (8)$$

Eredmények

A numerikus számításokat a Ne -atomra végeztük el, egyrészt mert erre pontos mérési adatok vannak⁸, másrészt, mert ugyanerre az atomra számos kvantummechanikai vizsgálatot⁹ is végeztek, s így eredményeinket minden irányban kontrollálni tudjuk.

A számításokat a Ne -atom több közelítő sűrűségeloszlásával is elvégeztük, így a Thomas—Fermi—Dirac-féle atommodell sűrűségével és a Gombás által a korrelációs kölcsönhatással korrigált Thomas—Fermi—Dirac-féle atommodell sűrűségével. Mint a mellékelt táblázatból látható, a korrigált atommodellek

	Szerző	$2l_0$ x-egys.
Thomas—Fermi-modell	Burkhardt	3,0
Thomas—Fermi—Dirac-modell	Kónya	16,9
Korrelációval bővített Thomas—Fermi—Dirac-modell	Kónya	17,0
Hartree—Dougall-féle sajátfüggvényekkel, hullámmech.	Burkhardt	28,0
Hartree—Bronwn sűrűségeloszlással, statiszt.	Kónya	22,9
Duncanson—Coulson sajátfüggvényekkel, hullámmech.	Duncanson—Coulson	34,9
Duncanson—Coulson sűrűségeloszlással, statiszt.	Kónya	30,6
Kísérleti eredmény	Kappeler	32,0

lényegesen jobb eredményt adnak. (A feltüntetett felezési sáv szélességek a $MoK\alpha$ -vonalára vonatkoznak, ha az eltérítés szöge, $\theta = 180^\circ$). Mindenesetre a korrigált modellek esetén kapott érték is csak mintegy 50%-a az irodalmi értéknek — ennél jobb eredmény azonban a statisztikus atommodelltől nem is

várható. A felezési sáv szélesség u. i. a rendszámától igen erősen függ, és a periódusos rendszerben periodikusan változik. Minden sorban az alkáli-atomokra lesz értéke a legkisebb, s a nemes gázok felé haladva egyre nő, a nemes gáznál maximumot ér el, majd a következő alkáliatomnál ismét kis értékre esik le. Mivel a statisztikus atomelmélet minden ilyen változó mennyiségnek csak középértékét képes visszaadni, így eredményünk kielégítő.

Hullámmechanikai közelítő módszerekkel meghatározott sűrűségeloszlásokkal is kiszámítottuk statisztikus módszerünk alapján a felezési sáv szélességet. Legpontosabban tekinthetők a *Duncanson* és *Coulson* által variációs módszerrel meghatározott sajátfüggvények. Az ebből kapott eredmény ($2 l_0 = 30,6 X$ -egys.) kielégítően megegyezik mind a kísérleti ($2 l_0 = 32,0 X$ -egys.), mind az exaktabb, de sokkal hosszadalmasabb hullámmechanikai számítások eredményével ($2 l_0 = 34,9 X$ -egys.).

Nehézipari Műszaki Egyetem

Fizikai Tanszéke, Miskolc.

IRODALOM

- ¹ *Compton A. H.*: Phys. Rev. (2) 21, (1923) 483.
- ² *Du Mond J. W.*: Rev. Mod. Phys. 5, (1933) 1. *Wollan E. O.*: Phys. ZS. 35 (1934), 353.
- ³ *Wentzel G.*: ZS. f. Phys. 43 (1927), 1; 43 (1927), 779; 58 (1929), 348.
- ⁴ *Schnaidt F.*: Ann. d. Phys. (5) 21 (1934), 89.
- ⁵ *Bloch F.*: Phys. Rev. (2) 46 (1934), 674.
- ⁶ *Franz W.*: ZS. f. Phys. 90 (1934), 623; 95 (1935), 652.
- ⁷ *Du Mond J. W.*: Rev. Mod. Phys. 5 (1933), 1.
- ⁸ *Kappeler H.*: Ann. d. Phys. (5) 27 (1936), 129.
- ⁹ *Kirckpatrick P., Ross P. A., Rittland H. O.*: Phys. Rev. (2) 1928 50 (1936), 1928; *Burkhardt G.*: Ann. d. Phys. (5) 26 (1935), 567; *Duncanson W. E., Coulson C. A.*: Proc. Phys. Soc. LVII. (1945), 190.