

Comptonovo raspšenje na vezanim sustavima

Matić, Mario

Master's thesis / Diplomski rad

2022

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Rijeka / Sveučilište u Rijeci**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:194:383202>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-11-08**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the University of Rijeka, Faculty of Physics - PHYRI Repository](#)



SVEUČILIŠTE U RIJECI
FAKULTET ZA FIZIKU

Mario Matić

COMPTONOVO RASPRŠENJE NA VEZANIM SUSTAVIMA

Diplomski rad

Rijeka, 2022.

SVEUČILIŠTE U RIJECI
FAKULTET ZA FIZIKU

DIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ FIZIKA
SMJER: ASTROFIZIKA I FIZIKA ELEMENTARNIH ČESTICA

Mario Matić

Diplomski rad

**COMPTONOVO RASPRŠENJE NA
VEZANIM SUSTAVIMA**

Mentor diplomskog rada: izv. prof. dr. sc. Zoran Kaliman

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

Datum polaganja: _____

Rijeka, 2022.

Sažetak

Comptonovo raspršenje je neelastično raspršenje fotona na elektronu. U ovom radu opisano je Comptonovo raspršenje na slobodnom elektronu, a detaljnije je obrađeno Comptonovo raspršenje na vezanim sustavima: raspršenje na atomskom elektronu i raspršenje na pozitroniju. Raspršenja su opisana koristeći A^2 aproksimaciju s ravnim valom (Bornova aproksimacija) i Coulombovim valom. U svim računima dobiveni su diferencijalni udarni presjeci. Rezultati su prikazani grafički, analizirani i uspoređeni s dostupnim mjerenjima i rezultatima.

Ključne riječi: Comptonovo raspršenje, A^2 aproksimacija, vezani elektron, diferencijalni udarni presjek, pozitronij, Bornova aproksimacija, Coulombov val.

Compton scattering from bound systems

Abstract

Compton scattering is the inelastic scattering of a photon from an electron. In this paper, Compton scattering from a free electron is described, and Compton scattering from bound systems is treated in more detail: scattering from an atomic electron and scattering from positronium. Scattering is described using the A^2 approximation with a plane wave (Born approximation) and Coulomb wave. In all calculations, differential cross sections were obtained. The results are presented graphically, analyzed and compared with available measurements and results.

Keywords: Compton scattering, A^2 approximation, bound electron, differential cross section, positronium, Born approximation, Coulomb wave.

Sadržaj

1	Uvod	1
2	O Comptonovom raspršenju	6
3	Comptonovo raspršenje na slobodnom elektronu	8
3.1	Raspršenje na gibajućem elektronu	9
3.2	Raspršenje na mirujućem elektronu	12
3.2.1	Klein-Nishinina jednačba	13
3.3	Funkcija gustoće vjerojatnosti $f(\theta)$	16
3.4	Energija i funkcija gustoće vjerojatnosti $f(E)$	18
3.5	Aproksimacija slobodnih elektrona (FEA)	21
3.5.1	Kvadrat matričnog elementa	23
3.5.2	Udarni presjek	27
3.5.3	Nisko i visoko-energetski limesi	29
4	Comptonovo raspršenje na atomskom elektronu	30
4.1	Waller-Hartree aproksimacija (WH)	31
4.2	Impulsna aproksimacija (IA)	33
4.2.1	Nerelativistička impulsna aproksimacija (NRIA)	34
4.2.2	Relativistička impulsna aproksimacija (RIA)	35
4.3	Aproksimacija matrice raspršenja (SM)	37
4.3.1	p - A aproksimacija	39
4.3.2	A^2 aproksimacija	40
4.4	Primjena A^2 aproksimacije s ravnim valom	42
4.4.1	Raspršenje na K -ljusci	42

4.4.2	Raspršenje na L -ljuskama	44
4.4.3	Raspršenje na M -ljuskama	48
4.4.4	Diferencijalni udarni presjek po energiji elektrona	51
4.5	Primjena A^2 aproksimacije s Coulombovim valom	54
4.5.1	Raspršenje na K -ljusci	54
4.5.2	Raspršenje na L i M ljuskama	57
5	Comptonovo raspršenje na pozitroniju	60
5.1	Diferencijalni udarni presjek po energiji fotona	62
5.1.1	Bornova aproksimacija	64
5.1.2	Coulombov val	67
5.2	Diferencijalni udarni presjek po energiji elektrona	69
5.3	Pobuđena stanja	72
5.3.1	$L1$	72
5.3.2	$M1$	73
5.4	Rezultati i diskusija	74
6	Zaključak	85
	Dodaci	86
A	Feynmanovi dijagrami u QED	86
B	Feynmanova pravila za QED	87
C	Casimirov trik	88

1 Uvod

Comptonovo raspršenje je neelastično raspršenje fotona na elektronu nazvano po A. H. Comptonu, koji je raspršenje opisao 1923. godine [1] te pokazao kako se energija fotona smanjuje uslijed raspršenja, što se ne može opisati u okviru klasične fizike. Prvi račun diferencijalnog udarnog presjeka za raspršenje na mirnom i slobodnom elektronu u okviru kvantne elektrodinamike izračunali su O. B. Klein i Y. N. Nishina 1929. godine [2]. Klein-Nishinina jednačina se u limesu niskih energija fotona svodi na elastično Thomsonovo raspršenje [3], dok za više energije daje točniji rezultat od klasičnih formula.

Ideju da se Comptonovo raspršenje proširi na vezane elektrone predstavlja J. W. M. Du Mond 1929. godine [4, 5]. On opisuje karakteristično širenje linije u grafu raspodjele energija raspršenog fotona, raspodijeljenih oko energije dobivene Klein-Nishininom formulom. To širenje povezuje s raspodjelom momenata elektrona [6]. Njegov pristup poslije je prepoznat kao nerelativistička impulsna aproksimacija (NRIA). P. Eisenberger i P. M. Platzman su 1970. godine ponovno izveli nerelativističku impulsnu aproksimaciju, ali koristeći pristup matrice raspršenja.

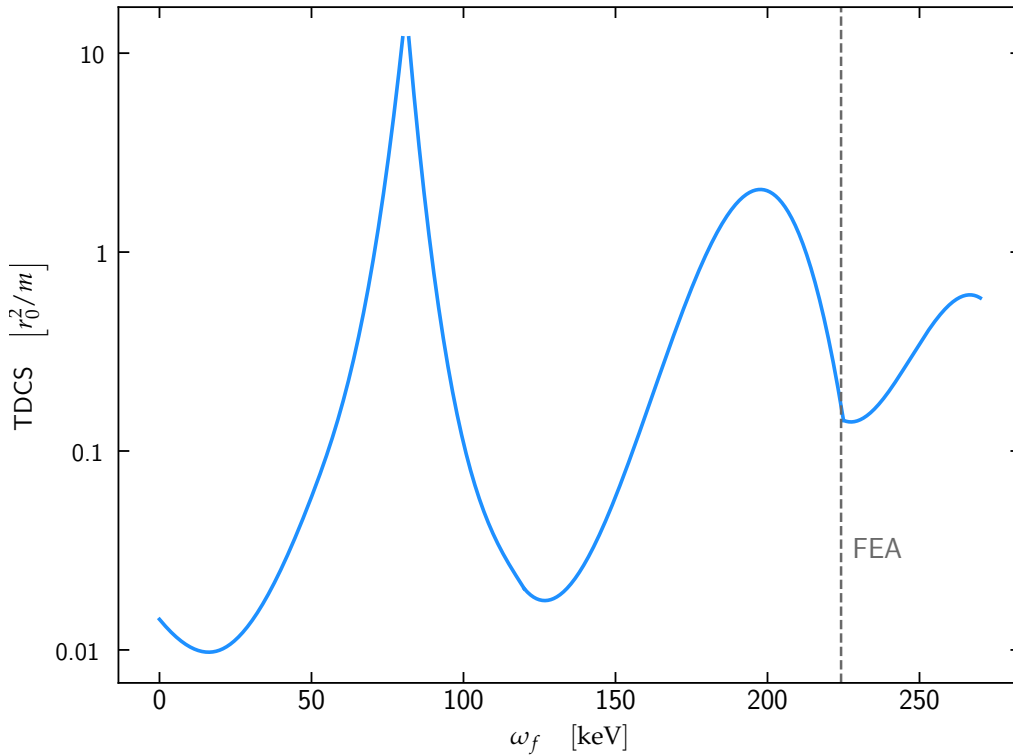
Relativistički doprinos (RIA) opisao je R. Ribberfors 1975. godine [7, 8]. Ova aproksimacija polazi od relativističkog izraza za raspršenje fotonskog snopa koji se sudara sa snopom elektrona. U oba pristupa diferencijalni se udarni presjek može podijeliti na dva dijela: faktor ovisan o kinematičkim i dinamičkim svojstvima atomskog Comptonovog raspršenja, te tzv. Comptonov profil koji ovisi o raspodjeli momenata elektrona vezanog u atomskim ili molekulskim sustavima. Comptonov profil može se izračunati teorijskim izvodima ili eksperimentalno. Manje općenite proračune u relativističkoj impulsnoj aproksimaciji dali su P. Eisenberger i W. A. Reed [9] te S. Manninen, T. Paakkari i K. Kajante [10].

I. Waller i D. R. Hartree su predložili da se presjek za vezane elektrone izračuna koristeći korektivni faktor kojim množimo diferencijalni udarni presjek dan Klein-Nishininom formulom [11]. Korektivni faktor se zove inkoherentna funkcija raspršenja („incoherent scattering function“) pa se njihova metoda još naziva ISF pristup. Kao i Comptonov profil, funkcija raspršenja može dati informacije o elektronskim svojstvima vezanog sustava i može se također odrediti eksperimentalno.

U proteklim desetljećima među novim pristupima ističe se metoda matrice raspršenja („scattering matrix approach“) u kojoj se matrica Comptonovog raspršenja može izračunati koristeći perturbativni razvoj hamiltonijana interakcije, koji opisuje interakciju fotona i

vezanog elektrona [12–14]. Aproksimacije koje proizlaze iz ovog pristupa temelje na nerelativističkom hamiltonijanu interakcije fotona i elektrona, uz uvođenje različitih aproksimacije valnih funkcija i propagatora zbog pojednostavljenja računa. Ovisno o tome koji član razvoja zadržavamo, razlikujemo A^2 aproksimaciju i p - A aproksimaciju. U prvom redu računa smetnje p - A član opisuje emisiju i apsorpciju fotona, dok A^2 član opisuje raspršenje, dok u drugom redu računa smetnje raspršenje opisuje p - A član. A^2 aproksimacija dobro opisuje spektar u području komptonskog vrha i Također uključuje učinke širenja i pomaka vrha prema manjim energijama. Aproksimacija temeljena na p - A članu dobro opisuje niskoenergijski dio spektra (infracrveno područje) te područje rezonancije.

P. Eisenberger i P. M. Platzman su djelomičnim zanemarivanjem potencijala u A^2 izračunali udarni presjek [15]. Također, F. Schnaidt, A. Gummel i M. Schumacher svoj rad zasnivaju na metodi matrice raspršenja i pritom zadržavaju samo A^2 član [16–18]. Doprinos drugog p - A člana opisuju M. Gavrilica et. al. [19–21]. Za energije upadnog elektrona koje su mnogo veće od energije vezanja sustava doprinos A^2 člana je mnogo veći od p - A člana. A^2 član postaje zanemativ pri malim izlaznim energijama fotona ili za male prijenose impulsa, čak i za velike energije upadnog fotona. Za mirni elektron u početnom doprinos p - A člana iščezava, a doprinos A^2 člana iščezava u dipolnoj aproksimaciji.



Slika 1.1: Ovisnost trostruko diferenciranog udarnog presjeka o energijama izlaznog fotona. Uočavamo spektar Comptonovog raspršenja: male energije predstavljaju infracrveni dio spektra, prvi maksimum je rezonantni dio, a drugi maksimum je komptonski vrh.

Potpuni relativistički pristup prvi je pokušao I. B. Whittingham [22,23], a kasnije su ga razvili P. M. Bergstrom, T. Surić, R. H. Pratt i K. Pisk 1990-ih godina [12,14,24–26]. U tim su radovima početna i završna stanja u atomskim izračunata unutar modela nezavisnih čestica (IPA). U tom modelu se jednoelektronska stanja rješavaju koristeći neperturbirani hamiltonijan, a potencijal za pojedini elektron je dan srednjim poljem potencijala atomske jezgre te interakcijama s drugim vezanim elektronima. Što se tiče matričnog elementa, on se u nerelativističkom računu svodi na element Kramers-Heisenberg-Wallerove (KHW) matrice [27–29]. Model nezavisnih čestica zanemaruje mnoge efekte elektrona kao što su korelacije elektron-elektron, ali unatoč tome uspješno se primjenjuje na atomskim procesima kao što su fotoefekt, zaključno zračenje i elastično raspršenje, a uobičajeno se koristi u drugim, aproksimativnijim tretmanima neelastičnog raspršenja. Jednostruka ionizacija gotovo se uvijek opisuje u IPA aproksimaciji. Trostruko diferencirani udarni presjek u ovom računu dali su Z. Kaliman, T. Surić, K. Pisk i R. H. Pratt 1998. godine [30]. Na grafu 1.1 možemo vidjeti ovisnost trostrukog diferencijalnog udarnog presjeka raspršenja o energijama raspršenog fotona, koji predstavlja spektar Comptonovog raspršenja fotona na vezanom elektronu iz L2 ljuske. Male energije predstavljaju infracrveni dio spektra. Na oko 80 keV uočavamo rezonantni dio, a maksimum oko 200 keV predstavlja komptonski vrh. Vertikalnom isprekidanom linijom prikazana je energija raspršenja na mirnom i slobodnom elektronu.

S. Houamer i I. P. Volobuev su opisali Comptonovo raspršenje visoko-energetskog fotona na vodikovom atomu i izračunat je diferencijalni udarni presjek po energiji elektrona. Njihovi su rezultati uspoređeni s eksperimentalnim podacima raspršenja na atomu helija napravljeni pomoću navedenog uređaja [31].

Pozitron je antičestica elektrona čije je postojanje predvidio Paul Dirac, a otkrio ga je Carl Anderson 1932. godine. Ima masu jednaku masi elektrona, ali suprotan (pozitivan) naboj. Fizičar Stjepan Mohorovičić teorijski je predvidio postojanje vezanog stanja elektrona i pozitrona 1934. godine [32]. Postojanje takvog sustava eksperimentalno je dokazao Martin Deutsch sredinom 20-og stoljeća [33] te je taj vezani sustav postao poznat pod nazivom pozitronij (Ps). Pozitronij ima masu dvostruko veću od mase elektrona (1.022 MeV) i zanemarivo malu energiju vezanja od samo nekoliko eV. Reducirana masa u pozitroniju iznosi točno polovicu mase elektrona pa je stoga energija svakoga stanja pozitronija približno upola manja nego energija odgovarajućeg stanja u vodikovom atomu. Tako je, primjerice, energija osnovnog stanja pozitronija jednaka -6.8 eV .

Pozitronij ima hiperfinu strukturu koja proizlazi iz relativnih orijentacija spinova elektrona i pozitrona te tako razlikujemo dva moguća spinska stanja: singlet i triplet, koja se

razlikuju po ukupnom spinu, vremenu raspada te produktu anihilacije. U singletnom stanju spinovi su postavljeni u suprotnim smjerovima te je ukupni spin jednak nuli (parapozitronij). Vrijeme poluraspada za ovo stanje iznosi $1.25 \cdot 10^{-10}$ s, a anihilacijom nastaju dva fotona. Naprotiv, tripletnom stanju spinovi su postavljeni u istom smjeru te je ukupni spin jednak jedan (ortopozitronij). Vrijeme poluraspada za ovo stanje iznosi $1.47 \cdot 10^{-7}$ s, a anihilacijom nastaju tri fotona.

Raspršenje fotona na pozitroniju također se može računati koristeći aproksimacije Comptonovog raspršenja na vezanom elektronu, prilagođene sustavu u kojem umjesto protona imamo pozitron.

Proteklih godina prijavljeni su učinci interferencije Youngovog tipa u fotoionizaciji molekule H_2 koji nastaju zbog raspršenja fotoelektrona iz dvaju centara [34]. Učinak interferencije može se uočiti i pri Comptonovom raspršenju na pozitroniju, gdje se konačno stanje procesa sastoji od raspršenog fotona te slobodnog elektrona i pozitrona. Iako je pozitronij sustav sličan vodiku, neelastično raspršenje fotona na pozitroniju događa se iz dva centra, za razliku od raspršenja na vodik (uzimajući masu protona kao beskonačnu), a raspršenje se opisuje s dvije amplitude. Ti učinci postaju zanemarivi pri dovoljno visokim energijama upada. Takve pojave pri standardnim izračunima Comptonovog raspršenja na atomima nema jer se elektroni obično opisuju kao neovisni u efektivnom potencijalu kojim dominira interakcija elektron-jezgra (IPA aproksimacija). Ova aproksimacija općenito je prilično dobra, osim pri niskim energijama.

Z. Kaliman, K. Pisk i R. H. Pratt su, koristeći A^2 član, izveli opći izraz za dvostruko diferencirani udarni presjek za Comptonovo raspršenje iz dvočestičnog vezanog sustava (ne nužno jednakih masa čestica), koji se raspada nakon raspršenja. Razmatranje je usmjereno na područje Comptonovog vrha, gdje se očekuje da će A^2 član biti dovoljan za računanje presjeka. [35]. Za energije iznad (10 keV) učinak interferencije je manje važan te se ukupni presjek pozitronija podudara se s dvostrukom vrijednošću Klein-Nishinine jednadžbe za te energije. Opće prihvaćeni kriterij za valjanost impulsne aproksimacije je da prijenos impulsa fotona mnogo veći od prosječnog impulsa vezanog elektrona. Međutim, pokazano je da je područje valjanosti IA koja se opaža u vodik nije opaženo u pozitroniju. [35].

U svom radu I. S. Stepantsov ističe se kako se raspršenje na pozitroniju može promatrati na sličan način kao i raspršenje na atomu vodika, ističući razlike u njihovom vremenu raspada i masi, te izvodi diferencijalni udarni presjek po energiji elektrona na pozitroniju [36], vođen sličnim računom za raspršenje na vezanom elektronu [37].

Organizacija rada:

U ovom radu predstaviti ćemo Comptonovo raspršenje fotona na gibajućem i mirujućem slobodnom elektronu, nekoliko aproksimacija za raspršenje fotona na vezanom elektronu te raspršenje fotona na pozitroniju u A^2 aproksimaciji. Rad će biti organiziran na idući način:

U drugom poglavlju bit će opisan kratki povijesni pregled Thomsonovog i Comptonovog raspršenja te definiran sustav mjernih jedinica korišten u ovom radu.

U trećem poglavlju bit će obrađena tema neelastičnog Comptonovog raspršenja na slobodnom mirujućem i gibajućem elektronu. Također će biti predstavljene jednadžbe za energiju raspršenog fotona o kutu raspršenja, grafički prikazani rezultati za diferencijalni udarni presjek te uspoređeni s elastičnim Thomsonovim raspršenjem fotona na slobodnom elektronu. Dodatno će biti izračunate gustoće vjerojatnosti kao funkcija kuta raspršenja i kao funkcija energije, slijedom, te prikazane grafički. Integracija će se provesti računski u programu `Python`. Na kraju poglavlja bit će opisano Comptonovo raspršenje na vezanom elektronu u aproksimaciji slobodnih elektrona te će biti prikazana Klein-Nishinina jednadžba, koju ćemo poslije koristiti kao referentnu vrijednost za prikazivanje i tumačenje ostalih aproksimacije.

U četvrtom poglavlju bit će opisane neke od aproksimacija raspršenja na vezanom elektronu, kao što su Waller-Hartree aproksimacija, impulsna aproksimacija i aproksimacija matrice raspršenja. Zatim će biti izvedeni diferencijalni udarni presjeci po energiji fotona u A^2 aproksimaciji s ravnim valom (Bornova aproksimacija) za elektron u osnovnom stanju te za pobuđena stanja (L i M ljuske), te će biti izračunati diferencijalni udarni presjek i potpuni udarni presjek po energiji elektrona i grafički prikazani u usporedbi s rezultatima iz [14]. Također će biti izvedeni diferencijalni udarni presjeci po energiji fotona u A^2 aproksimaciji s Coulombovim valom za elektron u osnovnom stanju. U istoj aproksimaciji će biti izračunati diferencijalni udarni presjeci za dva pobuđena stanja (L1, M1). Dobiveni rezultati za TDCS i DDCS bit će grafički uspoređeni za dvije navedene A^2 aproksimacije (ravni i Coulombov val).

Naposlijetku, u petom poglavlju bit će opisano raspršenje fotona na pozitroniju u osnovnom stanju te izvedeni diferencijalni udarni presjeci po energiji fotona i po energiji elektrona, slijedom. Dobiveni rezultati bit će prikazani grafički i uspoređeni s rezultatima iz [36]. Na kraju ovog poglavlja još će biti izračunati diferencijalni udarni presjeci za dva pobuđena stanja pozitronija te će biti grafički prikazani u usporedbi s pobuđenim stanjima vodikovog atoma.

2 O Comptonovom raspršenju

Ranih 1920. godina u znanstvenim se krugovima intenzivno raspravljalo o čestičnoj prirodi svjetlosti koju sugerira fotoelektrični efekt. Jedan od važnijih eksperimenata u fizici je Comptonovo raspršenje koje potvrđuje čestičnu prirodu elektromagnetskih valova. Ovaj klasični problem raspršenja svjetlosti na nabijenoj čestici proučavao je isprva J. J. Thomson [3]. Njegova klasična formula udarnog presjeka uzeta je s pretpostavkom da frekvencija raspršenih valova mora biti ista kao i upadna frekvencija. U niskoenergetskoj granici, električno polje upadnog vala ubrzava nabijenu česticu, te ona zauzvrat emitira zračenje iste frekvencije kao i upadni val. U prirodnom sustavu mjernih jedinica ($\hbar = c = \epsilon_0 = 1$) Thomsonov udarni presjek je dan s

$$\sigma_{\text{Thomson}} = \frac{8\pi}{3} \frac{\alpha^2}{m^2}. \quad (2.1)$$

gdje je $\alpha \approx 1/137$ konstanta fine strukture, a m masa elektrona. Važna značajka jest da je presjek neovisan o frekvenciji fotona. Uz definiciju klasičnog elektronskog polumjera

$$r_e \equiv \frac{e^2}{4\pi m} = \frac{\alpha}{m} \quad (2.2)$$

proizlazi da je udarni presjek proporcionalan kvadratu klasičnog elektronskog polumjera

$$\sigma_{\text{Thomson}} = \frac{8\pi}{3} r_e^2. \quad (2.3)$$

Ali 1923. godine Compton je eksperimentalno otkrio da raspršeni valovi koji su u interakciji s materijom smanjuju svoju energiju i uzrokuju pomak valne duljine upadnog zračenja. Promatrao je raspršenje rendgenskih zraka na elektronima u ugljičnoj meti i pronašao raspršene rendgenske zrake većih valnih duljina (odnosno, manjih energija) od onih koje upadaju na metu. Nadalje je pokazao da usvajanje Einsteinove ideje o svjetlosnim kvantima (fotonima), uz očuvanje energije i impulsa kvantitativno dovodi do niže frekvencije raspršenih valova. Takva pojava ne može se objasniti klasičnom teorijom Thomsonovog raspršenja i mora se objasniti kvantnom mehanikom. Raspršeni foton ima veću valnu duljinu λ (stoga i nižu energiju E i frekvenciju ν) prema Planckovom odnosu

$$E = h\nu = \frac{h}{\lambda}. \quad (2.4)$$

Comptonov eksperiment dao je jasne dokaze ponašanja sličnog česticama, kao što to sugerira i fotoelektrični učinak. Za svoje otkriće Compton je 1927. dobio Nobelovu nagradu.

Planckova konstanta h jedna je od najvažnijih konstanti u fizici koja predstavlja omjer energije kvanta elektromagnetskoga zračenja i frekvencije toga zračenja. Dimenzija konstante je prema $E = h \cdot \nu$ jednaka:

$$[h] = \frac{[E]}{[\nu]} = \frac{\text{M} \cdot \text{L}^2}{\text{T}} \quad (2.5)$$

iz čega zaključujemo da vrijedi

$$[h] = [r] \cdot [p] = [L], \quad (2.6)$$

gdje je L angularni moment. Ta veza omogućuje nam zaključiti da svakoj čestici mase m možemo pridružiti pripadajuću duljinu r na idući način:

$$r = \frac{h}{mc} \equiv \lambda_C \quad (2.7)$$

gdje je λ_C Comptonova valna, a c brzina svjetlosti u vakuumu. Comptonova valna duljina se definira kao valna duljina fotona koji ima energiju jednaku energiji mirovanja čestice. Vrijedi

$$mc^2 = E_\gamma = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \rightarrow \lambda = \frac{h}{mc} \equiv \lambda_C. \quad (2.8)$$

Ta veličina ima i eksperimentalne primjene u fizici visokih energija: Ako elektron ozračimo fotonom valne duljine jednake Comptonovoj valnoj duljini elektrona, foton će imati energiju jednaku energiji mirovanja elektrona. Comptonova valna duljina elektrona mase m_e jednaka je

$$\lambda_C(\text{elektron}) = \frac{h}{m_e c} \approx 2426 \text{ fm} \quad (2.9)$$

što je oko 22 puta manje od Bohrovog polumjera. Reducirana Comptonova valna duljina je

$$\lambda_C = \frac{\hbar}{mc}. \quad (2.10)$$

U prirodnom sustavu mjernih jedinica, Comptonova valna duljina prikaz je mase koja je pretvorena u energiju. Jednadžbe koje se odnose na pretvorbu mase u energiju, ili na valne duljine fotona u interakciji s masom, koriste nereduciranu Comptonovu valnu duljinu. Naprotiv, jednadžbe koje se odnose na inercijsku masu, poput Klein-Gordonove i Schrödingerove, koriste reduciranu Comptonovu valnu duljinu.

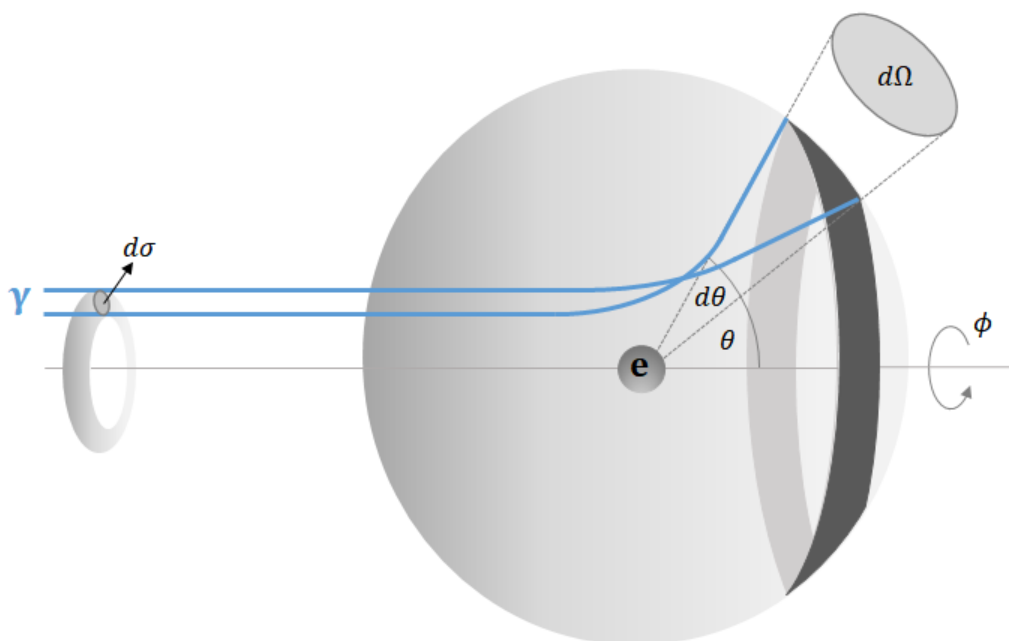
3 Comptonovo raspršenje na slobodnom elektronu

J. J. Thomson opisao je raspršenje fotona na slobodnom i mirujućem elektronu u graničnom slučaju kad je energija fotona mnogo manja od energije mirovanja elektrona

$$h\nu \ll m_e c^2. \quad (3.11)$$

Takvo raspršenje naziva se koherentno, elastično ili Thomsonovo raspršenje. A. H. Compton proširio je klasičnu Thomsonovu teoriju o raspršenju fotona na slučajeve kad je energija fotona približna ili veća od energije mirovanja elektrona. Raspršenje fotona takvih energija naziva se nekoherentno, neelastično ili Comptonovo raspršenje [1].

Energija mirovanja elektrona je oko 0.511 MeV pa Comptonovo raspršenje opažamo za rendgenske i gama zrake. Raspodjela energije za neki zadani kutom raspršenja θ naziva se Comptonov profil, a može nam dati informaciju o komponenti momenta elektrona projiciranu duž smjera raspršenja. Kada se elektron kreće, u Comptonovom profilu opaža se i Dopplerovo širenje. Promjena valne duljine, kao i promjena energije fotona može se dobiti primjenom zakona o očuvanja energije i impulsa na proces raspršenja [38].



Slika 3.1: Comptonovo raspršenje fotona na elektronu. Fotoni koji stižu iz infinitezimalnog područja površine $d\sigma$ raspršuju se u prostorni kut $d\Omega$ otklonjen za $\theta + d\theta$ od pravca upadnog fotona. Raspršenje posjeduje azimutalnu simetriju u odnosu na kut ϕ .

3.1 Raspršenje na gibajućem elektronu

Foton energije $\hbar\omega_i$ sudara se s elektronom pod kutom α te se raspršuje pod kutom θ . Pritom mu se energija smanjuje na $\hbar\omega_f$. Zbog jednostavnosti, raspršenje promatramo u nerelativističkom režimu te za kinetičku energiju elektrona koristimo klasični oblik. Impulsi upadnog i raspršenog fotona su \vec{k}_i i \vec{k}_f , a elektrona \vec{p}_1 i \vec{p}_2 . Skica raspršenja prikazana je na slici 3.2.

Zakon očuvanja energije glasi

$$k_i + \frac{p_1^2}{2m} = k_f + \frac{p_2^2}{2m}, \quad (3.12)$$

gdje je m masa elektrona. Zakon očuvanja impulsa glasi

$$\vec{k}_i + \vec{p}_1 = \vec{k}_f + \vec{p}_2. \quad (3.13)$$

Iz (3.13) slijedi

$$p_2^2 = (k_i - k_f)^2 + 2k_i k_f (1 - \cos\theta) + p_1^2 - 2\vec{p}_1 \cdot \vec{k}, \quad (3.14)$$

gdje je $\vec{k} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$ vektor raspršenja (prijenos impulsa). Skalarni umnožak iz (3.14) jednak je $p_{1(k)}k$ gdje je $p_{1(k)}$ projekcija impulsa elektrona na smjer vektora raspršenja, dok modul vektora raspršenja možemo prema slici 3.2b računati kao $k = \sqrt{k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos\theta}$. Prvi član na desnoj strani jednadžbe (3.14) zanemarivo malen u odnosu na module vektora k_i i k_f pa ga izostavljamo. Konačno dobivamo

$$p_2^2 = 2k_i k_f (1 - \cos\theta) + p_1^2 - 2p_{1(k)}k. \quad (3.15)$$

Iz (3.12) slijedi

$$p_2^2 = p_1^2 + 2m(k_i - k_f). \quad (3.16)$$

Izjednačavanjem (3.15) i (3.16) uz (2.7) te uzimajući u obzir da je $k = 2\pi/\lambda$ dobivamo

$$\Delta\lambda = \lambda_f - \lambda_i = \lambda_C(1 - \cos\theta) - \frac{p_{1(k)}\lambda^*}{m}, \quad (3.17)$$

gdje je $\lambda^* = \sqrt{\lambda_i^2 + \lambda_f^2 - 2\lambda_i\lambda_f \cos\theta}$. Promjena valne duljine fotona prilikom raspršenja na elektronu je funkcija kuta raspršenja fotona θ .

Zamjenom $\lambda = 2\pi/\omega$ u (3.17) dobivamo za energiju izlaznog fotona

$$\omega_f = \omega_i \left(1 + \frac{\omega_i}{m} (1 - \cos\theta) - \frac{p_{1(k)}k\omega_i}{m\omega^*} \right)^{-1}, \quad (3.18)$$

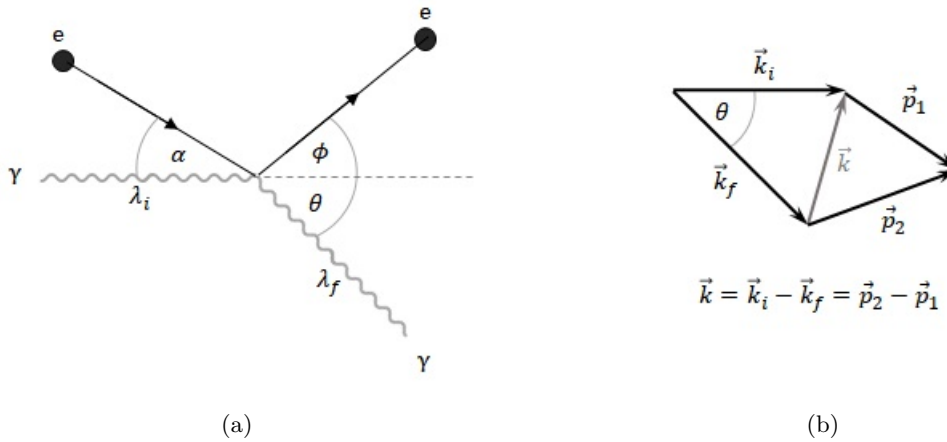
gdje je

$$\omega^* = \frac{\omega_i\omega_f}{\sqrt{\omega_i^2 + \omega_f^2 - 2\omega_i\omega_f \cos\theta}}. \quad (3.19)$$

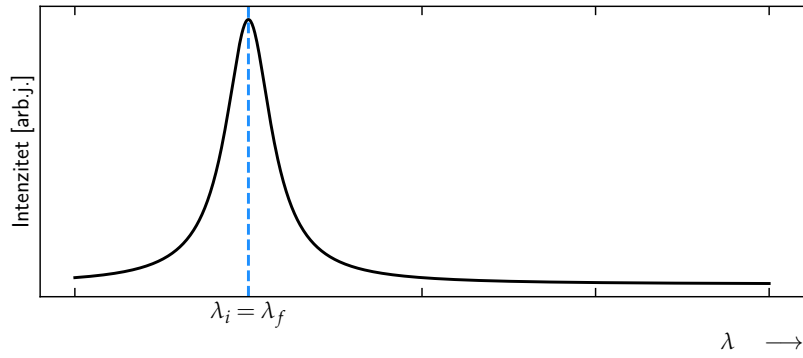
U limesu niskih energija $\hbar\omega \ll mc^2$ i malih brzina $p_{1(k)}k/m \ll c$ (3.18) prelazi u

$$\omega_f = \omega_i \left(1 - \frac{\omega_i}{m} (1 - \cos\theta) + \frac{p_{1(k)}k\omega_i}{m\omega^*} \right). \quad (3.20)$$

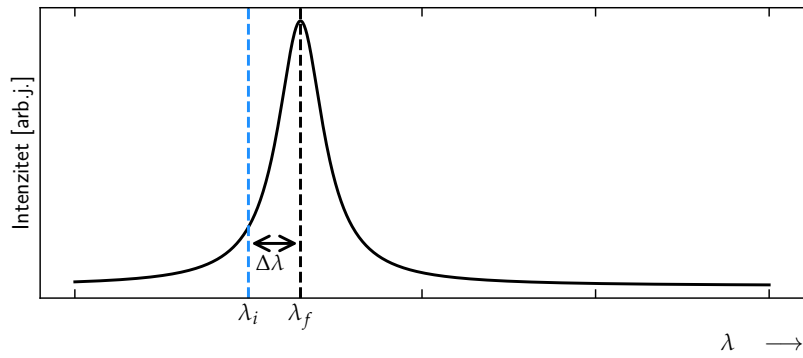
Za sve kutove raspršenja $\theta < 0^\circ$ dobivamo pomak prema većim valnim duljinama, kako je prikazano na slici 3.3. Linija na λ_i odgovara valnoj duljini upadnog snopa fotona. Comptonov vrh nalazi se na λ_f i odgovara valnoj duljini raspršenog fotona. Dvije valne duljine su razdvojene za $\Delta\lambda$, što izravno ovisi o kutu raspršenja θ raspršenog fotona. Povećanje valne duljine $\Delta\lambda$ uslijed smanjenja energije fotona naziva se Comptonov pomak i maksimalan je za kut $\theta = \pi$. Ako se elektron prilikom raspršenja kretao, linija koja odgovara valnoj duljini λ_f bit će proširena zbog Dopplerovog učinka, a proširenje je proporcionalno projekciji impulsa $p_{1(k)}k$ na smjer raspršenja. U jednadžbi (3.17) prvi član na desnoj strani opisuje pomak emisijske linije prema većim valnim duljinama uslijed smanjenja energije fotona prilikom raspršenja na elektronu, dok je posljednji član Dopplerovo proširenje linije uslijed kretanja elektrona.



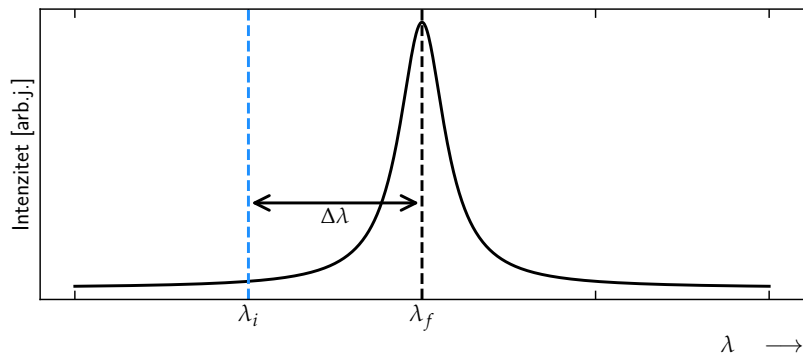
Slika 3.2: Comptonovo raspršenje na nerelativističkom elektronu. (a) Upadni foton valne duljine λ_i nakon raspršenja na elektronu ima veću valnu duljinu λ_f . (b) Valni vektori fotona \vec{k}_i i \vec{k}_f i elektrona \vec{p}_1 i \vec{p}_2 .



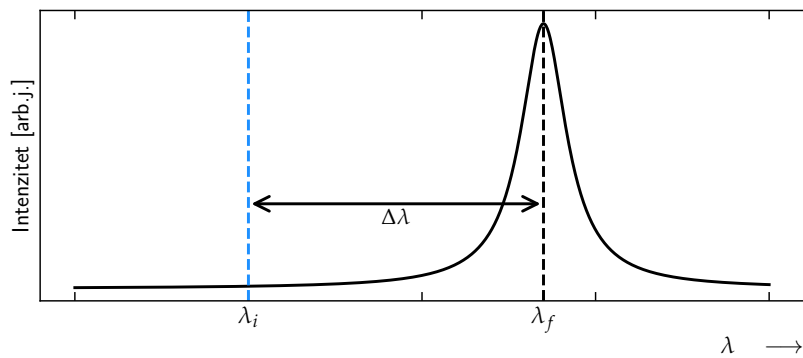
(a) $\theta = 0^\circ$



(b) $\theta = 45^\circ$



(c) $\theta = 90^\circ$



(d) $\theta = 135^\circ$

Slika 3.3: Grafovi ovisnosti intenziteta zračenja o valnoj duljini za proizvoljne kutove raspršenja θ . Povećanjem kuta raspršenja se valna duljina raspršenog fotona λ_f povećava za $\Delta\lambda$ prema većoj valnoj duljini u odnosu na valnu duljinu upadnog fotona λ_i prema jednačini (3.17). Linija je proširena zbog kretanja elektrona.

3.2 Raspršenje na mirujućem elektronu

Ako elektron početno miruje u odnosu na upadajući foton, račun se pojednostavljuje jer je valni vektor elektrona \vec{p}_1 jednak nuli. Prema slici 3.4 te koristeći relativistički oblik energije elektrona, zakoni očuvanja energije i impulsa su

$$k_i + m = k_f + \sqrt{(m)^2 + p_2^2}, \quad \vec{k}_i = \vec{k}_f + \vec{p}_2. \quad (3.21)$$

Kao u prethodnom slučaju, izlučivanjem p_2^2 iz obje jednačbe u (3.21) te izjednačavanjem, dobivamo

$$k_i - k_f = \frac{1}{m} k_i k_f (1 - \cos \theta). \quad (3.22)$$

Zatim zamjenom $k = 2\pi/\lambda$ iz (3.22) slijedi jednačba povećanja valne duljine fotona nakon raspršenja na mirujućem elektronu

$$\Delta\lambda = \lambda_f - \lambda_i = \lambda_C (1 - \cos \theta). \quad (3.23)$$

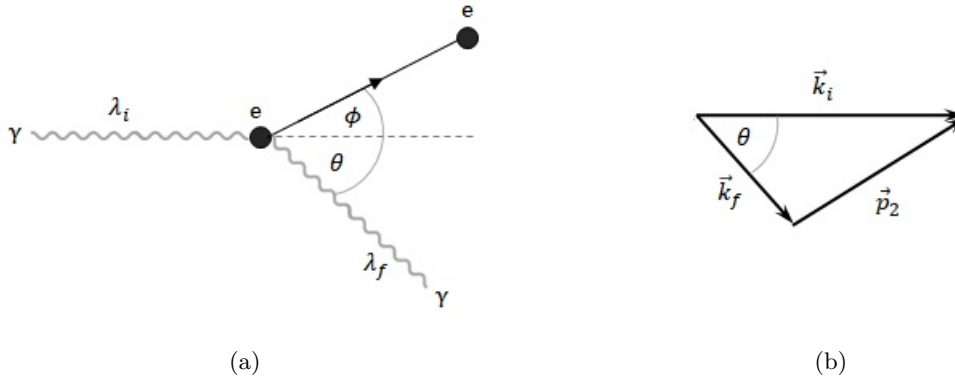
Koristeći $\lambda = 2\pi/\omega$ u (3.23) dobivamo za energiju izlaznog fotona

$$\omega_f = \omega_i \left(1 + \frac{\omega_i}{m} (1 - \cos \theta) \right)^{-1}. \quad (3.24)$$

U limesu niskih energija $\hbar\omega \ll mc^2$ (3.24) prelazi u

$$\omega_f = \omega_i \left(1 - \frac{\omega_i}{m} (1 - \cos \theta) \right) \quad (3.25)$$

i može se aproksimirati Thomsonovim elastičnim raspršenjem pri kojem je $\omega = \omega_i - \omega_f = 0$. Jasno se vidi da su jednačbe (3.23), (3.24) i (3.25) specijalni slučajevi općenitih jednačbi (3.17), (3.18) i (3.20) uz $p_{1(k)} = 0$.



Slika 3.4: Comptonovo raspršenje na mirujućem elektronu. (a) Upadni foton valne duljine λ_i nakon raspršenja na elektronu ima veću valnu duljinu λ_f . (b) Valni vektori fotona \vec{k}_i i \vec{k}_f i elektrona \vec{p}_2 .

3.2.1 Klein-Nishinina jednadžba

Diferencijalni udarni presjek po prostornom kutu raspršenog fotona, za raspršenje na mirujućem elektronu u ovisnosti o energijama fotona prije i poslije raspršenja dan je Klein-Nishininom [2] formulom

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{\omega_f}{\omega_i} \right)^2 \left[\frac{\omega_f}{\omega_i} + \frac{\omega_i}{\omega_f} - \sin^2 \theta \right], \quad (3.26)$$

Koristeći (3.25) i pokratu $\eta = \frac{\omega_i}{m}$ (omjer energije fotona i energije mirovanja elektrona) izražavamo diferencijalni presjek po prostornom kutu fotona kao funkciju kuta raspršenja θ

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \frac{1}{[1 + \eta(1 - \cos\theta)]^2} \left[1 + \cos^2 \theta + \frac{\eta^2(1 - \cos\theta)^2}{1 + \eta(1 - \cos\theta)} \right]. \quad (3.27)$$

Za elastični slučaj $\omega_f = \omega_i$ jednadžba (3.26) se svodi na Thomsonov diferencijalni udarni presjek

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Thomson}} = \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos^2 \theta). \quad (3.28)$$

Zbog pretpostavljene azimutalne simetrije korisno je vidjeti i diferencijalni udarni presjek po infinitezimalnom kutu raspršenja $d\theta$. Za totalni udarni presjek vrijedi

$$\sigma = \int d\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (3.29)$$

Koristeći $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ iz (3.29) slijedi

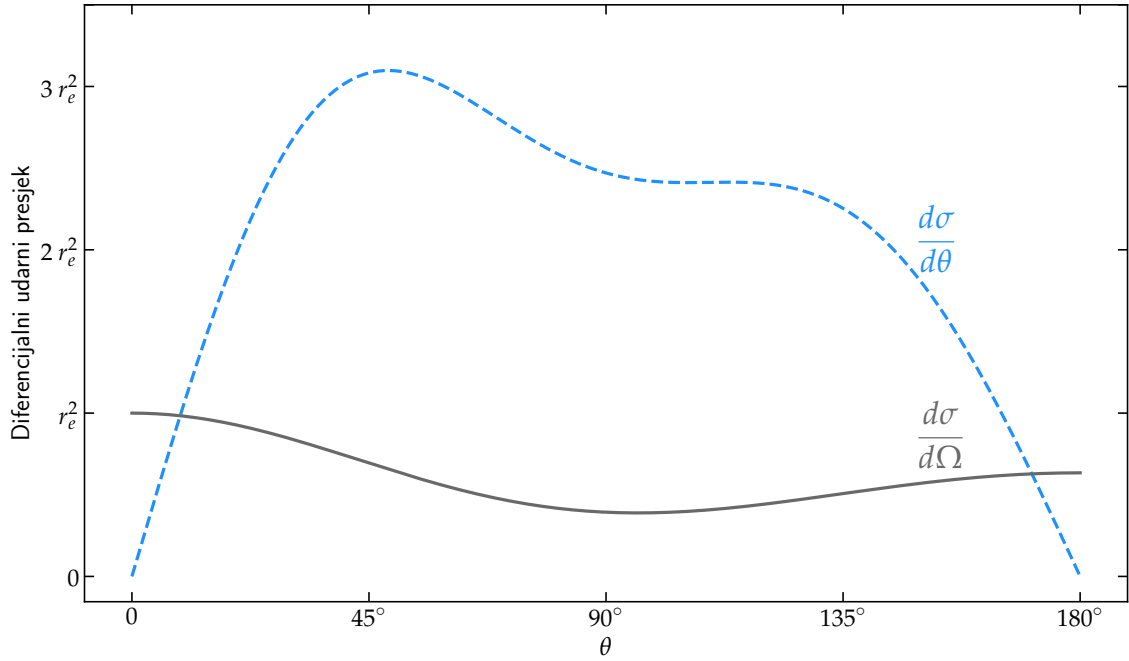
$$\sigma = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta d\phi = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta. \quad (3.30)$$

Usporedbom s $\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\theta} d\theta$ iz (3.30) zaključujemo da je

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = 2\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta. \quad (3.31)$$

Sad se iz (3.27) može dobiti

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = r_e^2 \pi \frac{\sin\theta}{[1 + \eta(1 - \cos\theta)]^2} \left[1 + \cos^2 \theta + \frac{\eta^2(1 - \cos\theta)^2}{1 + \eta(1 - \cos\theta)} \right]. \quad (3.32)$$



Slika 3.5: Diferencijalni udarni presjeci $d\sigma/d\Omega$ te $d\sigma/d\theta$ u ovisnosti o kutu raspršenja θ za foton energije 70 keV.

Presjek $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ opisuje vjerojatnost da će foton završiti u jednom određenom detektoru čiji je položaj opisan infinitezimalnim prostornim kutom $d\Omega$ pod kojim se vidi iz središta sfere (slika 3.1), a koji se nalazi negdje na sferi s koordinatama (r, θ, ϕ) . Najveća vjerojatnost je za detektor koji se nalazi ravno naprijed ($\theta = 0^\circ$) i detektor straga ($\theta = 180^\circ$, *backscattering*). Budući da je raspršenje azimutalno simetrično, presjek $\frac{d\sigma}{d\theta}$ opisuje vjerojatnost neovisnu o kutu ϕ . Tad za zadani kut θ najviše detektora ima bliže ekvatoru ($\theta = 90^\circ$), a najmanje (točno jedan detektor) na polovima ($\theta = 0^\circ, 180^\circ$). Zato je vjerojatnost raspršenja po kutu θ najmanja za $\theta = 0^\circ, 180^\circ$, a maksimalna za kutove prvog kvadranta (3.5).

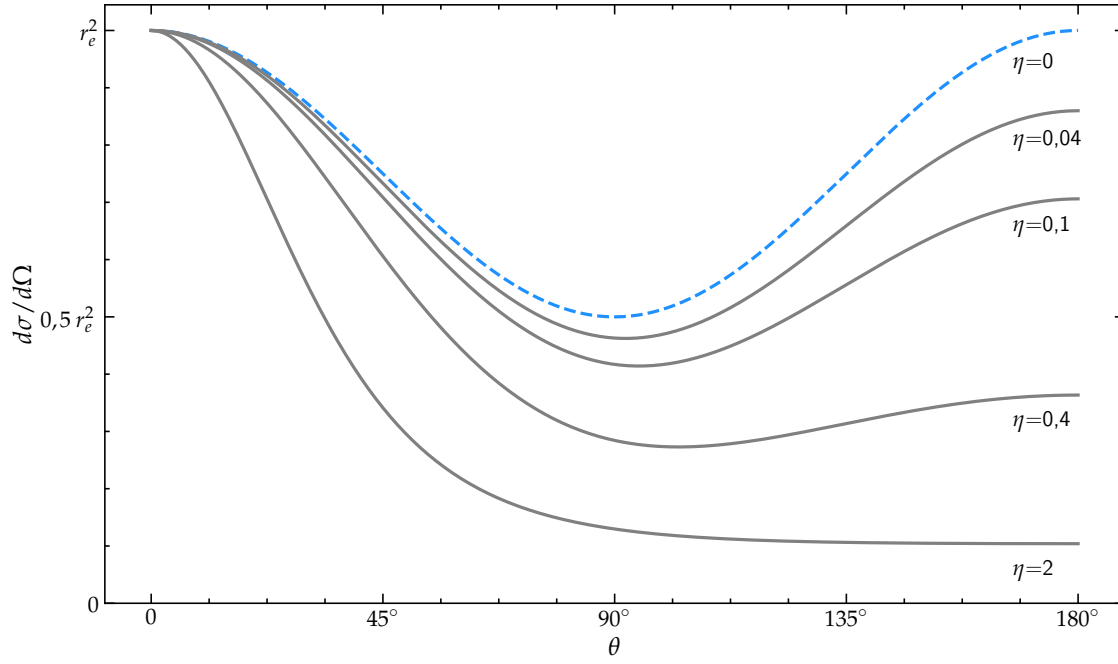
Integriranjem se dobije totalni udarni presjek

$$\sigma = 2\pi r_e^2 \left\{ \frac{1+\eta}{\eta^2} \left[\frac{2(1+\eta)}{1+2\eta} - \frac{1}{\eta} \ln(1+2\eta) \right] + \frac{1}{2\eta} \ln(1+2\eta) - \frac{1+3\eta}{(1+2\eta)^2} \right\}. \quad (3.33)$$

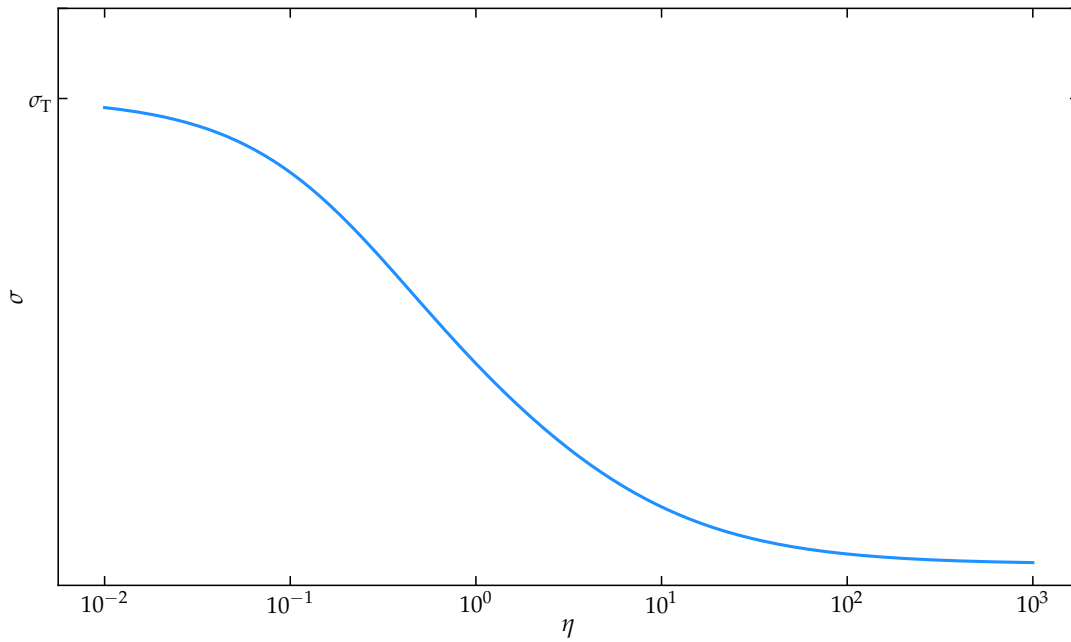
U limesu $\eta \rightarrow 0$ iz (3.27) dobiva se (3.28), a iz (3.33) dobiva se Thomsonov udarni presjek

$$\sigma_{\text{Thomson}} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \sigma = \frac{8\pi}{3} r_e^2 \approx 66.5 \text{ fm}^2. \quad (3.34)$$

Takvo asimptotsko ponašanje diferencijalnog udarnog presjeka te totalnog udarnog presjeka u ovisnosti o η prikazano je na slici 3.6.



(a)



(b)

Slika 3.6: Asimptotsko ponašanje diferencijalnog udarnog presjeka $d\sigma/d\Omega$ i totalnog udarnog presjeka σ za različite vrijednosti $\eta = (\omega_i)/(m)$. (a) Diferencijalni udarni presjek $d\sigma/d\Omega$ u limesu $\eta \rightarrow 0$ prelazi u Thomsonov diferencijalni udarni presjek, na grafu iscrtan isprekidanom linijom. (b) Totalni udarni presjek σ u limesu $\eta \rightarrow 0$ poprima vrijednost jednaku Thomsonovom udarnom presjeku σ_T , a u limesu $\eta \rightarrow \infty$ asimptotski se približava nuli. Pri vrijednosti od otprilike $\eta = 200$ što odgovara energiji fotona od oko 100 MeV Comptonovo zračenje prestaje biti dominantni mehanizam interakcije zračenja i materije. Za fotone energije veće od dvostruke energije mirovanja elektrona (1.022 MeV) može doći do stvaranja para elektron-pozitron i to će biti dominantna vrsta interakcije pri energijama iznad nekoliko MeV [39].

3.3 Funkcija gustoće vjerojatnosti $f(\theta)$

Diferencijalni udarni presjek $d\sigma/d\Omega$ nosi informaciju o udjelu ukupnog broja raspršenih čestica koje izlaze pod dijelom prostornog kuta $d\Omega$. Puni prostorni kut (sva moguća raspršenja) je $\int d\Omega = 4\pi$ i predstavlja oplošje sfere jediničnog polumjera. Eksperimentalno, informacije o raspršenju mogu se dobiti postavljanjem detektora na različite kutove (θ, ϕ) kojima je zadatak prikupljati raspršene čestice i mjeriti stopu raspršenja. Međutim, diferencijalni udarni presjek ne može dati informaciju o vjerojatnosti raspršenja za neki proizvoljno odabrani kut θ . Stoga se definira funkcija gustoće vjerojatnosti raspršenja kao funkcija kuta θ , a zbog pretpostavljene sferne simetrije neovisna o ϕ . Ako je ulazni snop uniforman, pretpostavljamo

$$f(\theta) \propto \frac{d\sigma}{d\theta}. \quad (3.35)$$

Iz uvjeta normalizacije $\int_0^\pi f(\theta) d\theta = 1$ proizlazi da je

$$f(\theta) = \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{d\theta}. \quad (3.36)$$

Dalje, funkciju gustoće vjerojatnosti želimo izraziti pomoću diferencijalnog udarnog presjeka $d\sigma/d\Omega$, jer taj izraz poznamo od ranije. Iz (3.36) i (3.31) proizlazi

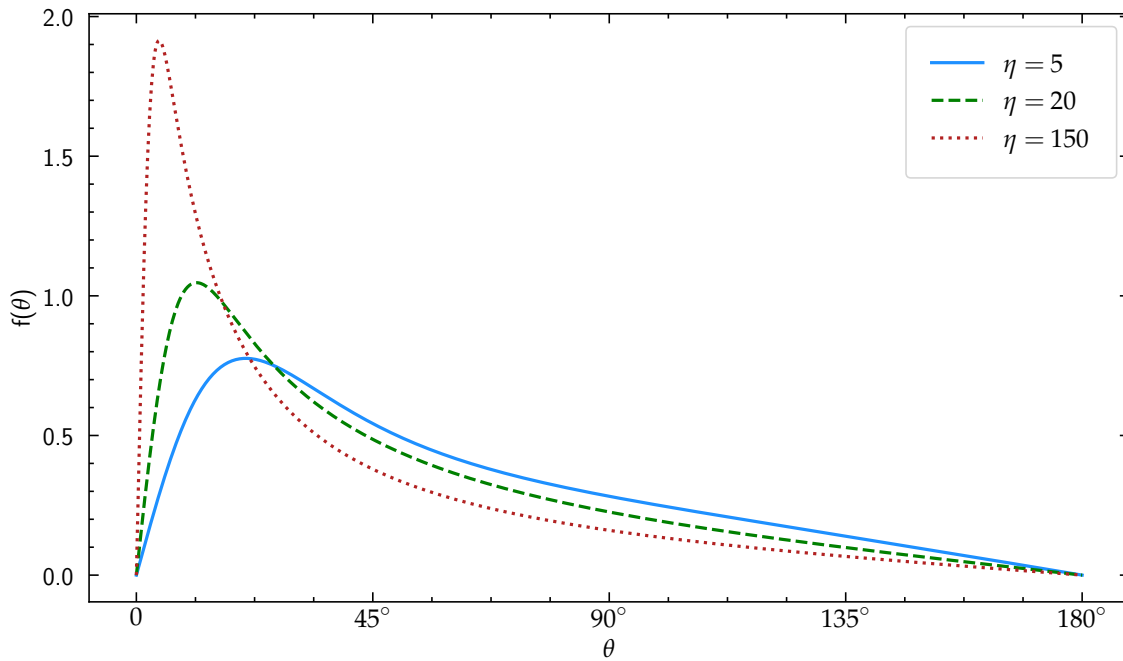
$$f(\theta) = 2\pi \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta. \quad (3.37)$$

Funkcija gustoće vjerojatnosti sad je izražena pomoću diferencijalnog udarnog presjeka. Koristeći (3.27) i (3.33) dobivamo

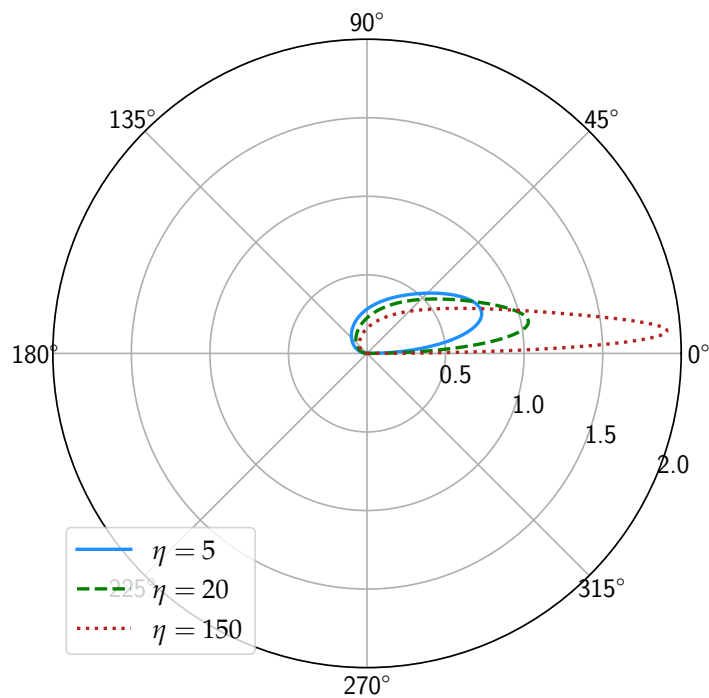
$$f(\theta) = - \frac{\eta^3 \left[\eta^2 \epsilon^2 - (\eta\epsilon - 1) (\epsilon^2 + 2\epsilon + 2) \right] (4\eta^2 + 4\eta + 1) \sin\theta}{(\eta\epsilon - 1)^3 \left[A - B \ln(2\eta + 1) \right]} \quad (3.38)$$

gdje je $\epsilon = \cos\theta - 1$, $A = 2\eta^4 + 18\eta^3 + 16\eta^2 + 4\eta$ i $B = -4\eta^4 + 4\eta^3 + 15\eta^2 + 10\eta + 2$.

Totalni udarni presjek kao i funkcija gustoće vjerojatnosti mogu se lakše i brže izračunati koristeći neki programski alat. U ovom radu za tu svrhu korišten je programski kod napravljen u jeziku Python te kod za konstruiranje grafa 3.7 napravljenog koristeći paket `matplotlib`. Integriranje i računanje limesa također je sprovedeno u tim programima. Integral funkcije gustoće vjerojatnosti po njenoj domeni, prema definiciji, mora davati 1, a to je i potvrđeno programskim integriranjem.



(a)



(b)

Slika 3.7: Graf ovisnosti funkcije gustoće vjerojatnosti $f(\theta)$ o kutu raspršenja θ za različite vrijednosti η . Za granični slučaj kad foton ima energiju jednaku energiji mirovanja elektrona ($\eta = 1$) najveća vjerojatnost raspršenja događa se za kut od približno $7\pi/36$ (ili oko 35°). (a) Povećavanjem energije upadnog fotona, najveća vjerojatnost raspršenja pomiče se prema manjim kutovima, a u limesu $\eta \rightarrow \infty$ ultravisokoenergetski foton se ne raspršuje. (b) U polarnom sustavu vjerojatnost raspršenja dana je radijalnom udaljenošću. Povećanjem energije fotona najveća vjerojatnost pomiče se prema manjim kutovima.

3.4 Energija i funkcija gustoće vjerojatnosti $f(E)$

Ulazni foton energije ω_i se u neelastičnom režimu raspršuje na elektronu energije $m \ll \omega_i$. Energija izlaznog fotona ω_f dana je jednadžbom:

$$\omega_f = \frac{\omega_i}{1 + \eta(1 - \cos\theta)}. \quad (3.39)$$

Dio energije ω_i prenosi se na elektron pa je kinetička energija elektrona nakon raspršenja E dana s:

$$E = \omega_i - \omega_f = \omega_i \frac{\eta(1 - \cos\theta)}{\eta(1 - \cos\theta) + 1}. \quad (3.40)$$

Kao i u prethodnom poglavlju, zgodno je promotriti funkciju gustoće vjerojatnosti, ovaj put izraženu kao funkciju energije. Uz pretpostavku da je ulazni snop uniforman, slijedi

$$f(E) \propto \frac{d\sigma}{dE}. \quad (3.41)$$

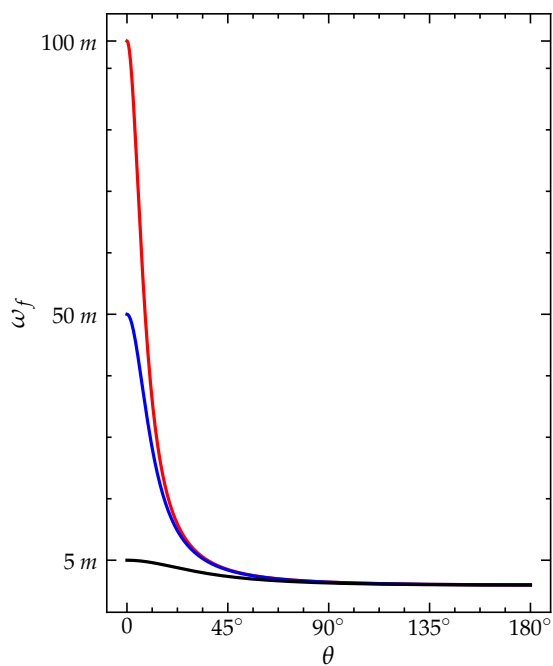
Iz uvjeta normalizacije $\int_0^\pi f(E) dE = 1$ proizlazi da je

$$f(E) = \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dE}. \quad (3.42)$$

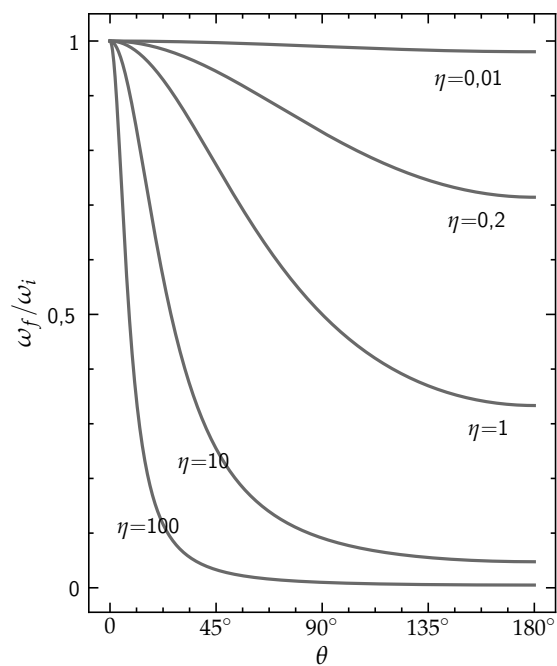
Pošto su jednadžbe (3.39) i (3.40) oblika $E(\theta)$ te pošto je poznat presjek $d\sigma/d\theta$ dan s (3.32), prethodnu jednadžbu zapisujemo u obliku

$$f(E) = \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{d\theta} \left(\frac{dE}{d\theta} \right)^{-1}. \quad (3.43)$$

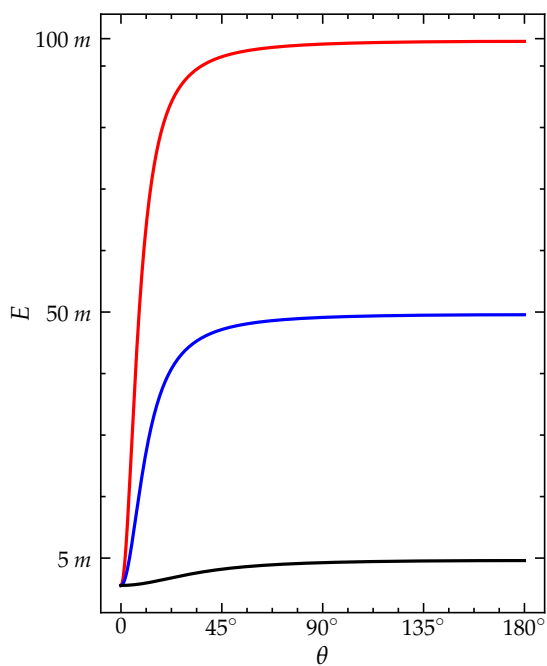
Energija izlaznog fotona te kinetička energija elektrona prikazane su grafički u ovisnosti o kutu raspršenja θ (slika 3.8). Foton koji kroz mjesto sudara prolazi gotovo neraspršen ($\theta \approx 0^\circ$) sačuvat će većinu svoje početne energije. Naprotiv, foton koji se odbije unatrag ($\theta \approx 180^\circ$) većinu svoje početne energije predat će elektronu, ali nikad svu energiju (slika 3.8a, 3.8c). U elastičnom režimu ($\eta \rightarrow 0$) upadni foton ne predaje elektronu energiju pa je energija izlaznog fotona gotovo nepromijenjena, a elektronova kinetička energija je jednaka nuli, gotovo neovisno o kutu raspršenja θ . Za veće vrijednosti η foton predaje dio energije elektronu, a taj udio predane energije je veći što je θ bliže 180° (slika 3.8b, 3.8d). Za male vrijednosti η foton će s velikom vjerojatnošću zadržati svu svoju početnu energiju, a elektron neće preuzeti njegovu energiju (slika 3.9a). Povećanjem energije ulaznog fotona raste vjerojatnost da elektron preuzme dio energije ulaznog fotona (slika 3.9b, 3.9c), a za slučaj visokoenergetskog fotona elektron će s visokom vjerojatnošću preuzeti gotovo svu energiju ulaznog fotona (slika 3.9d).



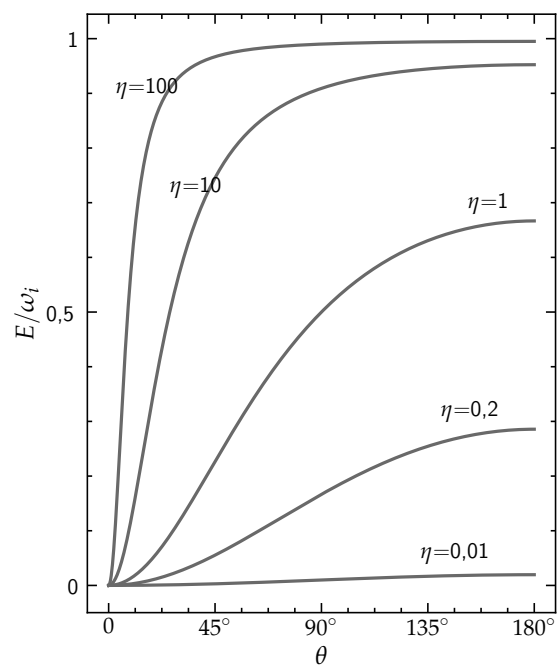
(a) **Foton:** Energija izlaznog fotona ω_f u ovisnosti o kutu raspršenja θ za tri različite vrijednosti η .



(b) **Foton:** Omjer energije izlaznog fotona i ulaznog fotona ω_f/ω_i u ovisnosti o kutu raspršenja θ za pet različitih vrijednosti η .

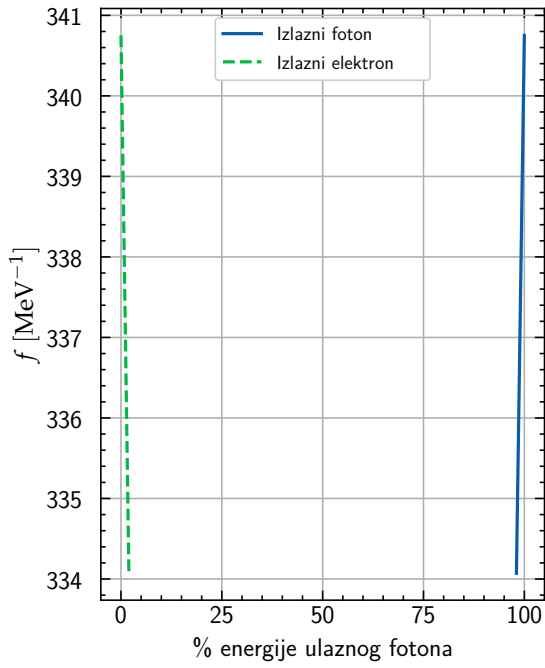


(c) **Elektron:** Energija elektrona E u ovisnosti o kutu raspršenja θ za tri različite vrijednosti η .

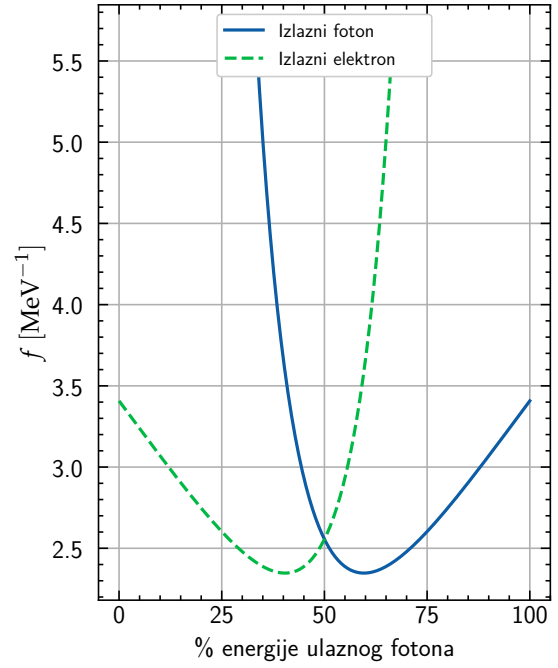


(d) **Elektron:** Omjer kinetičke energije elektrona i ulaznog fotona E/ω_i u ovisnosti o kutu raspršenja θ za pet različitih vrijednosti η .

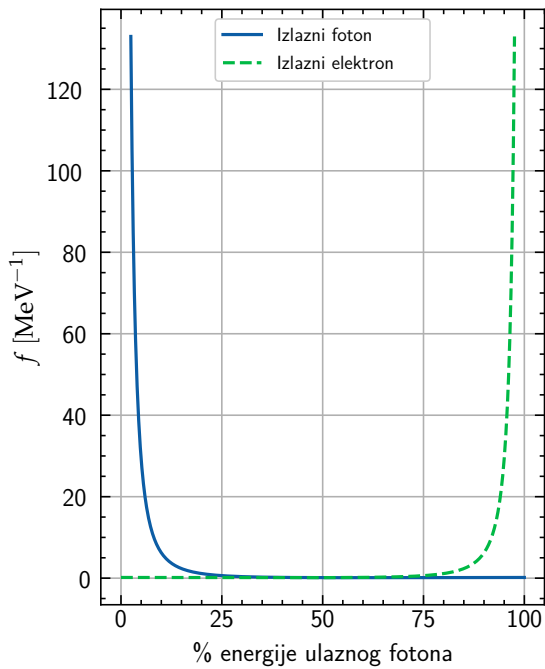
Slika 3.8: Grafovi ovisnosti energije izlaznog fotona i kinetičke energije elektrona u ovisnosti o kutu raspršenja.



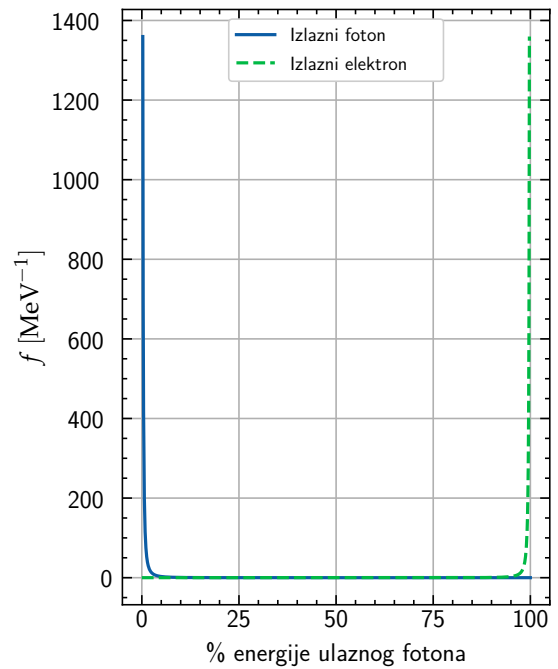
(a) $\eta = 0.01$



(b) $\eta = 1$



(c) $\eta = 20$



(d) $\eta = 200$

Slika 3.9: Grafovi ovisnosti gustoće vjerojatnosti energije izlaznog fotona i izlaznog elektrona u ovisnosti o postotku energije ulaznog fotona za različite vrijednosti η , gdje je $\eta = \hbar\omega_i/(mc^2)$.

3.5 Aproksimacija slobodnih elektrona (FEA)

U kvantnoj elektrodinamici (QED¹) se interakcija između fotona i elektrona izražava se kao perturbativni razvoj u red, gdje je svaki član višeg reda predstavljen Feynmanovim dijagramom te ima dodatni vrh. Feynmanovi dijagrami su slikovni prikaz amplituda M reakcija (raspršenja ili raspada), a koriste se za brže i preglednije računanje udarnog presjeka presjeka tih procesa. Članovi višeg reda nazivaju se radijacijskim korekcijama jer oni uključuju više virtualnih fotona koji posreduju u interakcijama između vrhova. Prema konvenciji, vrijeme na dijagramima teče s lijeva na desno, pravila za iščitavanje elemenata dijagrama opisana su u dodatku A. Od 1920-ih uloženi su veliki naponi da se razviju teorijske metode proračuna za Comptonov proces raspršenja. Najjednostavniji pristup je aproksimacija slobodnih elektrona (FEA²), koju su prvi razvili O. Klein i Y. Nishina 1929. godine. U FEA pristupu, elektroni u atomskim ili molekularnim sustavima tretiraju se kao slobodni elektroni. Vezanje atoma, korelacije elektrona, gibanje elektrona oko atomske jezgre i drugi učinci mnogih tijela izostavljeni su radi jednostavnosti. Atomsko vezanje može se zanemariti ako je energija upadnog fotona mnogo veća od ostalih energija uključenih u proces raspršenja. Uz pretpostavku da je elektron slobodan i da miruje, presjek izračunat u najnižem stupnju rezultira dobro poznatom Klein-Nishininom formulom za DCS³ po elektronu.

U FEA pristupu, konačna energija fotona ω_f nakon raspršenja je potpuno određena kutom raspršenja θ u Comptonovom procesu raspršenja. Ta ovisnost bit će predstavljena u nastavku ovog poglavlja u obliku već spomenute Klein-Nishinine jednadžbe. Aproksimacija slobodnog elektrona postala je standard za Comptonov učinak u mnogim udžbenicima, ali je u svojoj naravi previše jednostavna te daje vrlo malo informacija o elektronskim strukturama i svojstvima materijala mete. Također, kutna raspodjela diferencijalnog udarnog presjeka dana Klein-Nishininom jednadžbom neovisna je o raspodjeli impulsa elektrona u materijalu mete. Ubrzo nakon što su O. Klein i Y. Nishina formulirali FEA pristup pojavili su se i drugi pristupi koji razmatraju vezane strukture u atomima i molekulama te uključuju učinke kretanja elektrona oko atomskih jezgri u proračun Comptonovog raspršenja. Atomske efekti i gibanje elektrona daju neizbježne učinke na proces raspršenja. Stoga će takvi pristupi biti obrađeni u idućem poglavlju.

¹akronim od engl. *quantum electrodynamics*

²akronim od engl. *free electron approximation*

³akronim od engl. *differential cross section*

Na slici 3.10 prikazani su Feynmanovi dijagrami najnižeg reda za Comptonovo raspršenje. Svaki pojedinačni Feynmanov dijagram predstavlja zasebnu amplitudu, a točan DCS dobivamo uzimajući u obzir sve amplitude koje doprinose raspršenju.

- Na slici 3.10.a) prikazan je Feynmanov dijagram koji opisuje proces u kojem je elektron prvo apsorbirao foton momenta k i polarizacijskog vektora ϵ , a zatim emitirao foton momenta k' i polarizacijskog vektora ϵ^* . Amplituda raspršenja u ovom slučaju je \mathcal{M}_A ("absorption first").
- Na slici 3.10.b) prikazan je Feynmanov dijagram koji opisuje proces u kojem je elektron prvo emitirao foton momenta k' i polarizacijskog vektora ϵ^* , a zatim apsorbirao foton momenta k i polarizacijskog vektora ϵ . Amplituda raspršenja u ovom slučaju je \mathcal{M}_E ("emission first").

Ukupni matrični element jednak je

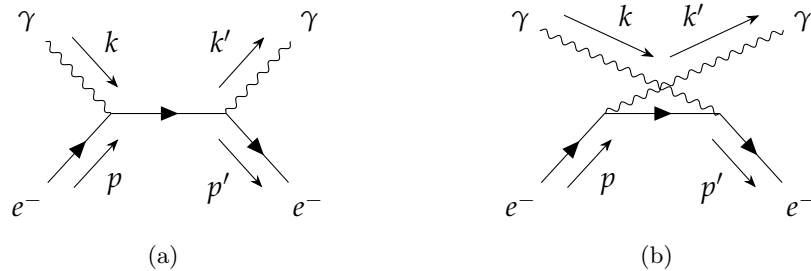
$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_A + \mathcal{M}_E. \quad (3.44)$$

Naznačit ćemo da su odgovarajući četveroimpulsi upadnog elektrona i fotona

$$p^\mu = (p^0, \mathbf{p}), \quad k^\mu = (k^0, \mathbf{k}), \quad (3.45)$$

kao i četveroimpulsi za izlazni elektron, odnosno foton

$$p'^\mu = (p'^0, \mathbf{p}'), \quad k'^\mu = (k'^0, \mathbf{k}'). \quad (3.46)$$



Slika 3.10: Feynmanovi dijagrami najnižeg reda koji doprinose Comptonovom raspršenju. Ulazni i izlazni moment elektrona su p_i i p_f , a fotona k_i i k_f . Između vrhova je elektronski propagator.

3.5.1 Kvadrat matričnog elementa

Koristeći Feynmanova pravila za QED⁴, možemo izračunati elemente amplituda koje odgovaraju dijagramima na slici 3.10.a) i 3.10.b) prilično jednostavno. Stoga možemo prije zapisati odgovarajuće elemente na idući način:

$$\mathcal{M}_A = \bar{u}(p') (ie\gamma^\mu) \epsilon_\mu^*(k') \frac{\not{p} + \not{k} + m}{(p+k)^2 - m^2} (ie\gamma^\nu) \epsilon_\nu(k) u(p), \quad (3.47)$$

$$\mathcal{M}_E = \bar{u}(p') (ie\gamma^\nu) \epsilon_\nu(k) \frac{\not{p} - \not{k}' + m}{(p-k')^2 - m^2} (ie\gamma^\mu) \epsilon_\mu^*(k') u(p). \quad (3.48)$$

Ukupni matrični element amplitude je prema (3.44) jednak

$$\mathcal{M} = e^2 \epsilon_\mu^*(k') \epsilon_\nu(k) \bar{u}(p') \left[\frac{\gamma^\mu (\not{p} + \not{k} + m) \gamma^\nu}{(p+k)^2 - m^2} + \frac{\gamma^\nu (\not{p} - \not{k}' + m) \gamma^\mu}{(p-k')^2 - m^2} \right] u(p). \quad (3.49)$$

Nazivnike u zagradi rješavamo koristeći algebru četverovektora,

$$(p+k)^2 - m^2 = 2p \cdot k, \quad (p-k')^2 - m^2 = -2p \cdot k'. \quad (3.50)$$

Brojnik prvog člana u zagradi (3.49) svodi se na

$$\begin{aligned} \gamma^\mu (\not{p} + \not{k} + m) \gamma^\nu &= \gamma^\mu \not{k} \gamma^\nu + \gamma^\mu (\not{p} + m) \gamma^\nu \\ &= \gamma^\mu \not{k} \gamma^\nu + \gamma^\mu (\gamma^\nu p_\nu + m) \gamma^\nu \\ &= \gamma^\mu \not{k} \gamma^\nu + \gamma^\mu (\gamma^\nu \gamma^\nu p_\nu + m\gamma^\nu) \\ &= \gamma^\mu \not{k} \gamma^\nu + \gamma^\mu (2g^{\nu\nu} p_\nu - \gamma^\nu \gamma^\nu p_\nu + m\gamma^\nu) \\ &= \gamma^\mu \not{k} \gamma^\nu + \gamma^\mu \left[2p^\nu - \underbrace{\gamma^\nu (\gamma^\nu p_\nu - m)}_{=0} \right] \\ &= \gamma^\mu \not{k} \gamma^\nu + 2\gamma^\mu p^\nu, \end{aligned} \quad (3.51)$$

gdje član u zagradi predzadnjeg retka prepoznamo kao Diracovu jednadžbu koja iščezava [40]. Analogno, brojnik drugog člana u zagradi amplitude (3.49) postaje

$$\gamma^\nu (\not{p} - \not{k}' + m) \gamma^\mu = -\gamma^\nu \not{k}' \gamma^\mu + 2\gamma^\nu p^\mu. \quad (3.52)$$

Uz (3.50) , (3.51) i (3.52) amplituda postaje

$$\mathcal{M} = e^2 \epsilon_\mu^*(k') \epsilon_\nu(k) \bar{u}(p') \left[\frac{\gamma^\mu \not{k} \gamma^\nu + 2\gamma^\mu p^\nu}{2p \cdot k} - \frac{-\gamma^\nu \not{k}' \gamma^\mu + 2\gamma^\nu p^\mu}{2p \cdot k'} \right] u(p). \quad (3.53)$$

⁴Dodatak B

U nekim su eksperimentima također navedeni spinovi upadnog i izlaznog elektrona te polarizacije fotona. U tom slučaju u izraz za amplitudu treba uvrstiti i odgovarajuće spinore i vektore polarizacije. Veličina koja je potrebna za računanje udarnog presjeka je $|\mathcal{M}|^2$. Međutim, ako su u eksperimentu orijentacije snopova čestica nasumični te samo brojimo čestice raspršene u određenom smjeru, onda je relevantna veličina prosječna vrijednost svih početnih konfiguracija spina sumirana preko svih konačnih konfiguracija spina, $\langle |\mathcal{M}|^2 \rangle$. Vrijedi

$$\langle |\mathcal{M}|^2 \rangle = \frac{1}{4} \sum_s |\mathcal{M}|^2. \quad (3.54)$$

Faktor $\frac{1}{4}$ je uključen jer želimo prosjek za početne spinove, a budući da postoje dvije čestice, od kojih je svaka s dva moguće spina, prosjek je četvrtina sume. Slijedi

$$\begin{aligned} \langle |\mathcal{M}|^2 \rangle = \frac{1}{4} e^4 \sum_s \left\{ \epsilon_\mu^*(k') \epsilon_\nu(k) \epsilon_\delta(k') \epsilon_\sigma^*(k) \cdot \right. \\ \bar{u}(p') \left[\frac{\gamma^\mu \not{k} \gamma^\nu + 2\gamma^\mu p^\nu}{2 p \cdot k} - \frac{-\gamma^\nu \not{k}' \gamma^\mu + 2\gamma^\nu p^\mu}{2 p \cdot k'} \right] u(p) \cdot \\ \left. \bar{u}(p) \left[\frac{\gamma^\sigma \not{k} \gamma^\delta + 2\gamma^\delta p^\sigma}{2 p \cdot k} - \frac{-\gamma^\delta \not{k}' \gamma^\sigma + 2\gamma^\sigma p^\delta}{2 p \cdot k'} \right] u(p') \right\}. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Dalje primjenjujemo tzv. Casimirov trik⁵ koji gornju jednadžbu svodi na izračunavanje traga produkata γ matrica.

$$\begin{aligned} \langle |\mathcal{M}|^2 \rangle = \frac{1}{4} e^4 g_{\mu\delta} g_{\nu\sigma} \cdot \text{Tr} \left\{ (\not{p}' + m) \cdot \left[\frac{\gamma^\mu \not{k} \gamma^\nu + 2\gamma^\mu p^\nu}{2 p \cdot k} + \frac{\gamma^\nu \not{k}' \gamma^\mu - 2\gamma^\nu p^\mu}{2 p \cdot k'} \right] \cdot \right. \\ \left. (\not{p} + m) \cdot \left[\frac{\gamma^\sigma \not{k} \gamma^\delta + 2\gamma^\delta p^\sigma}{2 p \cdot k} + \frac{\gamma^\delta \not{k}' \gamma^\sigma - 2\gamma^\sigma p^\delta}{2 p \cdot k'} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Unutar traga imamo produkt četiriju članova kojeg sređivanjem možemo razdijeliti na četiri jednostavnija traga,

$$\langle |\mathcal{M}|^2 \rangle = \frac{e^4}{4} \cdot \left[\frac{\text{A}}{(2 p \cdot k)^2} + \frac{\text{B}}{(2 p \cdot k)(2 p \cdot k')} + \frac{\text{C}}{(2 p \cdot k)(2 p \cdot k')} + \frac{\text{D}}{(2 p \cdot k')^2} \right], \quad (3.57)$$

gdje je

⁵Dodatak C

$$\begin{aligned}
A &= \text{Tr} [(\not{p}' + m)(\gamma^\mu \not{k} \gamma^\nu + 2\gamma^\mu p^\nu)(\not{p} + m)(\gamma_\nu \not{k} \gamma_\mu + 2\gamma_\mu p_\nu)], \\
B &= \text{Tr} [(\not{p}' + m)(\gamma^\mu \not{k} \gamma^\nu + 2\gamma^\mu p^\nu)(\not{p} + m)(\gamma_\mu \not{k}' \gamma_\nu - 2\gamma_\nu p_\mu)], \\
C &= \text{Tr} [(\not{p}' + m)(\gamma^\nu \not{k}' \gamma^\mu - 2\gamma^\nu p^\mu)(\not{p} + m)(\gamma_\nu \not{k} \gamma_\mu + 2\gamma_\mu p_\nu)], \\
D &= \text{Tr} [(\not{p}' + m)(\gamma^\nu \not{k}' \gamma^\mu - 2\gamma^\nu p^\mu)(\not{p} + m)(\gamma_\mu \not{k}' \gamma_\nu - 2\gamma_\nu p_\mu)].
\end{aligned} \tag{3.58}$$

Lako se može pokazati da vrijedi $A\{k' \rightarrow -k, \mu \leftrightarrow \nu\} = D$ te $B\{k' \rightarrow -k, \mu \leftrightarrow \nu\} = C$. Sredi-
vanjem γ matrica i računanjem tragova, dobivamo

$$\begin{aligned}
A &= 16 \left[2m^4 + 2m^2 p \cdot k + 2(p \cdot k)(p \cdot k') \right], \\
B &= 8 \left[4m^4 + 2m^2 p \cdot k - 2m^2 c^2 p \cdot k' \right] = C, \\
D &= 16 \left[2m^4 - 2m^2 p \cdot k' + 2(p \cdot k)(p \cdot k') \right].
\end{aligned} \tag{3.59}$$

Amplituda (3.57) sad postaje

$$\begin{aligned}
\langle |\mathcal{M}|^2 \rangle &= \frac{e^4}{4} 16 \left[\frac{2m^4}{(2p \cdot k)^2} + \frac{2m^2 p \cdot k}{(2p \cdot k)^2} + \frac{2(p \cdot k)(p \cdot k')}{(2p \cdot k)^2} - \right. \\
&\quad \left. \frac{4m^4}{(2p \cdot k)(2p \cdot k')} - \frac{2m^2 p \cdot k}{(2p \cdot k)(2p \cdot k')} + \frac{2m^2 p \cdot k'}{(2p \cdot k)(2p \cdot k')} + \right. \\
&\quad \left. \frac{2m^4}{(2p \cdot k')^2} - \frac{2m^2 p \cdot k'}{(2p \cdot k')^2} + \frac{2(p \cdot k)(p \cdot k')}{(2p \cdot k')^2} \right].
\end{aligned} \tag{3.60}$$

Uz sređivanje, dobivamo konačno

$$\langle |\mathcal{M}|^2 \rangle = 2e^4 \left[\frac{p \cdot k'}{p \cdot k} + \frac{p \cdot k}{p \cdot k'} + 2m^2 \left(\frac{1}{p \cdot k} - \frac{1}{p \cdot k'} \right) + m^4 \left(\frac{1}{p \cdot k} - \frac{1}{p \cdot k'} \right)^2 \right]. \tag{3.61}$$

U laboratorijskom sustavu ćemo promotriti slučaj kad foton pogodi mirujućii elektron ($\vec{p} = 0$).
Shema raspršenja u $x - z$ ravnini prikazana je na slici 3.11. Četvrto-momenti upadnog/iz-
laznog fotona i elektrona su:

$$\begin{aligned}
p &= (m, 0), \\
k &= (\omega_i, \omega_i \hat{z}), \\
p' &= (E', \vec{p}'), \\
k' &= (\omega_f, \omega_f \sin \theta, 0, \omega_f \cos \theta).
\end{aligned} \tag{3.62}$$

Za umnožak četveroimpulsa elektrona i fotona vrijedi

$$p \cdot k = m\omega_i, \quad (3.63)$$

i analogno

$$p \cdot k' = m\omega_f, \quad (3.64)$$

gdje su ω_i i ω_f energije upadnog, odnosno izlaznog fotona.

Uvrštavamo dobivene umnoške u jednadžbu (3.61) i dobivamo

$$\langle |\mathcal{M}|^2 \rangle = 2e^4 \left[\frac{\omega_f}{\omega_i} + \frac{\omega_i}{\omega_f} + 2m \left(\frac{1}{\omega_i} - \frac{1}{\omega_f} \right) + m^2 \left(\frac{1}{\omega_i} - \frac{1}{\omega_f} \right)^2 \right]. \quad (3.65)$$

Primjenjujemo zakon očuvanja momenta na laboratorijski sustav na slici 3.11

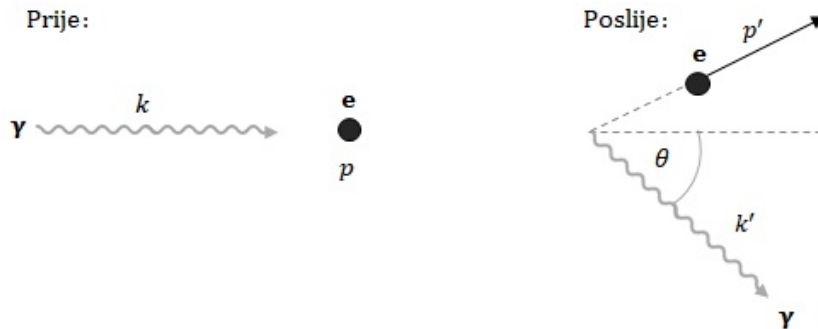
$$\begin{aligned} (p')^2 &= (p + k - k')^2 = p^2 + 2p(k - k') - 2kk' \\ &\rightarrow m(\omega_i - \omega_f) = \omega_i\omega_f(1 - \cos\theta). \end{aligned} \quad (3.66)$$

Rekonstruiramo isti rezultat dobiven u jednadžbi (3.24)

$$\frac{1}{\omega_f} - \frac{1}{\omega_i} = \frac{1}{m}(1 - \cos\theta). \quad (3.67)$$

Nakon uvrštavanja u (3.65) dobivamo

$$\begin{aligned} \langle |\mathcal{M}|^2 \rangle &= 2e^4 \left[\frac{\omega_f}{\omega_i} + \frac{\omega_i}{\omega_f} - 2(1 - \cos\theta) + (1 - \cos\theta)^2 \right] \\ &= 2e^4 \left[\frac{\omega_f}{\omega_i} + \frac{\omega_i}{\omega_f} - \sin^2\theta \right]. \end{aligned} \quad (3.68)$$



Slika 3.11: Comptonovo raspršenje u laboratorijskom sustavu mirujućeg elektrona.

3.5.2 Udarni presjek

Opća formula za diferencijalni udarni presjek dana je s [41]

$$d\sigma = \frac{|\mathcal{M}|^2}{2E_A 2E_B v_{\text{rel}}} d\Pi_n, \quad (3.69)$$

gdje su s A i B indeksirane dvije ulazne čestice (E_A i E_B su njihove energije, a $v_{\text{rel}} = |v_A - v_B|$ njihova relativna brzina), a n je broj čestica u konačnom stanju. Integral faznog prostora nad konačnim stanjima ima oblik

$$\int d\Pi_n = \left(\prod_f \iiint \frac{d^3 p_f}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_f} \right) (2\pi)^4 \delta^{(4)}(p_i - \sum p_f), \quad (3.70)$$

gdje je p_i ukupni ulazni četveroimpuls. Za računanje udarnog presjeka potrebno je promotriti kinematiku raspršenja u određenom sustavu. Najčešće se koristi laboratorijski sustav u kojem je elektron početno u mirovanju (slika 3.11). Četveroimpulsi su dani s (3.62). U tom sustavu je integral faznog prostora za $n = 2$ konačne čestice jednak

$$\int d\Pi_2 = \iiint \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\omega_{k'}} \iiint \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E'} (2\pi)^4 \delta^{(4)}(p' + k' - p - k). \quad (3.71)$$

Koristimo

$$d^3 k' = |\vec{k}'|^2 d|\vec{k}'| d\Omega, \quad (3.72)$$

a koristeći svojstvo integrala Diracove δ -funkcije, integral po $d^3 p'$ iščezava uz $\delta^{(3)}$. Slijedi

$$\int d\Pi_2 = \int \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{d\Omega}{4E'} \omega_{k'} d\omega_{k'} \delta\left(\frac{\omega_{k'}}{c} + \sqrt{m^2 + \omega_i^2 + \omega_{k'}^2 - 2\omega_i \omega_{k'} \cos\theta} - \omega_i - m\right). \quad (3.73)$$

Koristimo svojstvo integrala δ -funkcije

$$\int f(t) \delta[h(t)] dt = \sum_i \frac{f(t_i)}{|h'(t_i)|}, \quad (3.74)$$

gdje su t_i one vrijednosti t za koje je $h(t) = 0$, a $|h'(t_i)| \neq 0$. Argument δ funkcije prepoznamo kao $h(\omega_{k'})$, a kao rješenje jednadžbe $h(\omega_{k'}) = 0$ dobivamo (3.24).

Slijedi

$$\begin{aligned}\int d\Pi_2 &= \int \frac{\omega_f}{(2\pi)^2} \frac{d\Omega}{4E'} \left| \left(1 + \frac{\omega_f - \omega_i \cos\theta}{E'} \right) \right|^{-1}. \\ &= \int \frac{\omega_f}{(2\pi)^2} \frac{d\Omega}{4} |(E' + \omega_f - \omega_i \cos\theta)|^{-1}.\end{aligned}\quad (3.75)$$

Iz zakona očuvanja energije znamo da vrijedi $E' + \omega_f = m + \omega_i$.

$$\int d\Pi_2 = \int \frac{\omega_f}{(2\pi)^2} \frac{d\Omega}{4} \left[m \left(1 + \frac{\omega_i}{m} (1 - \cos\theta) \right) \right]^{-1}, \quad (3.76)$$

gdje posljednji član prepoznamo iz (3.24), jer je u FEA pristupu, energija fotona konačnog stanja f nakon procesa raspršenja u potpunosti je određena kutom raspršenja θ u Comptonovom procesu raspršenja,

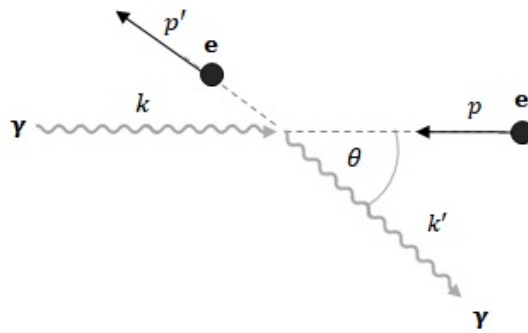
$$\int d\Pi_2 = \int \frac{1}{16\pi^2} \frac{\omega_f^2}{m\omega_i} d\Omega. \quad (3.77)$$

Sad možemo (3.68) i (3.77) i $v_{\text{rel}} = 1$ uvrstiti natrag u (3.69) i dobiti

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4}{32\pi^2 m^2} \left(\frac{\omega_f}{\omega_i} \right)^2 \left[\frac{\omega_f}{\omega_i} + \frac{\omega_i}{\omega_f} - \sin^2\theta \right]. \quad (3.78)$$

Uz definiciju konstante fine strukture i klasičnog elektronskog polumjera (2.2) rekonstruiramo već poznatu Klein-Nishininu jednadžbu (3.26) izvedenu u prethodnom poglavlju, a koja predstavlja diferencijalni udarni presjek za Comptonovo raspršenje u aproksimaciji slobodnih elektrona

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{FEA}} = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{\omega_f}{\omega_i} \right)^2 \left[\frac{\omega_f}{\omega_i} + \frac{\omega_i}{\omega_f} - \sin^2\theta \right]. \quad (3.79)$$



Slika 3.12: Comptonovo raspršenje u sustavu centra mase.

3.5.3 Nisko i visoko-energetski limesi

U limesu niskih energija kad je energija upadnog fotona jako mala ($\omega_i \rightarrow 0$), Klein-Nishinina jednadžba poprima oblik $w_f/\omega_i \rightarrow 1$ pa se diferencijalni udarni presjek svodi na Thomsonovu formulu (3.28).

Naprotiv, za visoko-energetski limes Comptonovog diferencijalnog udarnog presjeka korisno je promotriti kinematiku raspršenja u sustavu centra mase (CM). Četveroimpulsi su dani s

$$\begin{aligned} p &= (E, 0, 0, -\omega_c), \\ k &= (\omega_c, 0, 0, \omega_c), \\ p' &= (E', -\omega_c \sin \theta_c, 0, -\omega_c \cos \theta_c), \\ k' &= (\omega_c, \omega_c \sin \theta_c, 0, \omega_c \cos \theta_c), \end{aligned} \quad (3.80)$$

gdje su ω_c i θ_c energija fotona, odnosno kut raspršenja u sustavu centra mase. Vrijedi

$$\begin{aligned} p \cdot k &= \omega_c (E + \omega_c), \\ p \cdot k' &= \omega_c (E + \omega_c \cos \theta_c). \end{aligned} \quad (3.81)$$

Promotrit ćemo posebno kut raspršenja $\theta \approx \pi$. Za takve kuteve u jednadžbi (3.61) prevladava samo prvi član, dok su drugi reda $\mathcal{O}(1)$ ili manji [41]. Uz (3.81) dobivamo

$$\langle |\mathcal{M}|^2 \rangle \approx 2 e^4 \frac{p \cdot k}{p \cdot k'} = 2 e^4 \frac{E + \omega_c}{E + \omega_c \cos \theta_c}. \quad (3.82)$$

Diferencijalni udarni presjek u sustavu centra mase je dan s [41]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\vec{p}_A|}{2E_A 2E_B v_{\text{rel}} (2\pi)^2 4E_c} \langle |\mathcal{M}|^2 \rangle. \quad (3.83)$$

Uz (3.82), $v_{\text{rel}} = 2$, $p_A = \omega_c$, $E_A = E$, $E_B = \omega_c$ i $E_c = (E + \omega_c)$ za kutove $\theta \approx \pi$ diferencijalni udarni presjek jednak je

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{4E(E + \omega_c \cos \theta_c)}. \quad (3.84)$$

U visokoenergetskoj granici $E \gg m$ nazivnik iščezava.

4 Comptonovo raspršenje na atomskom elektronu

Comptonovom raspršenju se konvencionalno pristupa korištenjem Klein-Nishina formule u okviru aproksimacije slobodnog elektrona (FEA ⁶). Klein-Nishina formula savršeno opisuje proces u visoko-energetskoj regiji, gdje su elektroni asimptotski slobodni. Međutim, u nisko-energetskoj regiji, gdje su prisutni učinci atomskog vezivanja, FEA postaje neprikladan model i Klein-Nishina formula ne uspijeva objasniti eksperimentalne rezultate [12].

Početno stanje se sastoji od upadnog fotona γ_i i vezanog elektrona, a konačno stanje od raspršenog fotona γ_f , izlaznog elektrona i ioniziranog atoma. Comptonovo raspršenje na atomu izražava se kao slijedi

$$\gamma_i + A \longrightarrow \gamma_f + e^- + A^+. \quad (4.1)$$

Tad moramo uzimati u obzir i učinke koje atom ima na elektron, pa se takva situacija mora opisati u okviru kvantne elektrodinamike i prikladnih aproksimacija, o kojima će biti govora u idućem poglavlju.

Diferencijalni udarni presjek za raspršenje na vezanom elektronu može se računati s povećanjem stupnja osjetljivosti, pa tako razlikujemo dvostruko diferencirane udarne presjeke (DDCS ⁷) i trostruko diferencirane udarne presjeke (TDCS ⁸). Trostruko diferencirani udarni presjek računa se u ovisnosti o diferencijalnim elementima prostornog kuta koji definiraju smjer raspršenog fotona $d\Omega$ i elektrona $d\Omega'$ te o diferencijalnom elementu energije raspršenog fotona $d\omega_f$

$$TDCS = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_f d\omega_f d\Omega'}. \quad (4.2)$$

Integriranjem (4.2) po prostornom kutu $d\Omega'$ koji definira smjer raspršenog elektrona dobivamo dvostruko diferencirani udarni presjek,

$$DDCS = \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_f}. \quad (4.3)$$

Ako ne mjerimo *recoil* iona, procesu raspršenja na vezanom elektronu vrijedi samo zakon očuvanja energije. Zbog masivne jezgre u odnosu na masu elektrona, ne vrijedi zakon očuvanja impulsa, čime se gubi veza između smjera raspršenog fotona i izlaznog elektrona.

⁶akronim od engl. *free electron approximation*

⁷akronim od engl. *doubly differential cross section*

⁸akronim od engl. *triple differential cross section*

4.1 Waller-Hartree aproksimacija (WH)

Najjednostavniji model za raspršenje fotona na vezanom elektronu dan je s Waller-Hartree (WH) aproksimacijom [11]. Efekti vezanja se uklape u udarni presjek definiran Klein-Nishinim formulom (3.79) tako da ga množimo s inkohherentnom funkcijom raspršenja $S(k, Z)$ definiramo kao

$$S(k, Z) = \sum_{\epsilon > 0} \left| \left\langle \epsilon \left| \sum_{j=1}^Z e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} \right| 0 \right\rangle \right|^2, \quad (4.4)$$

gdje je \vec{r}_j položaj j -tog elektrona, Z je broj elektrona (tj. atomski broj), $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ je vektor prijenosa impulsa tijekom sudara, a \vec{k}_i i \vec{k}_f su impulsi ulaznog i raspršenog fotona, slijedom. Iznos vektora \vec{k} je

$$k = \sqrt{\omega_i^2 + \omega_f^2 - 2\omega_i\omega_f \cos\theta}. \quad (4.5)$$

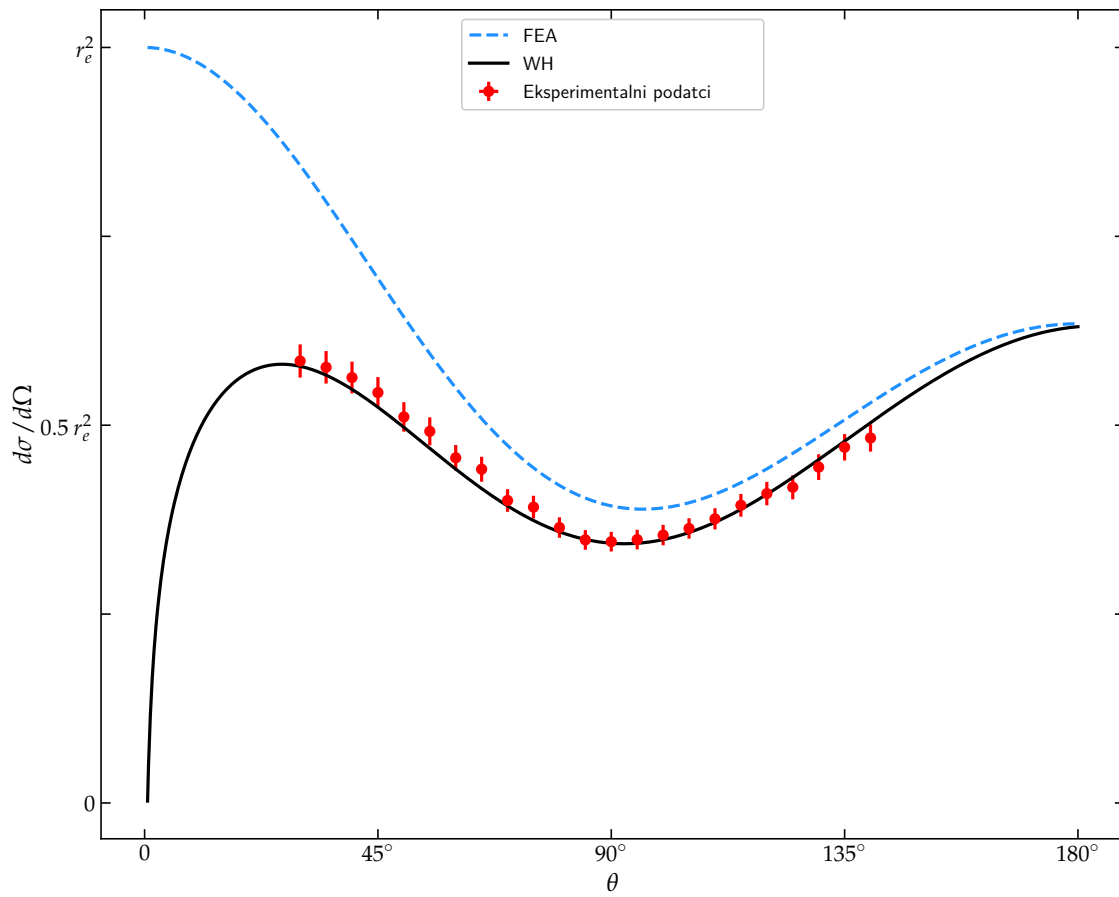
Osnovno stanje atoma predstavlja $|0\rangle$, a pobuđeno ili ionizirano stanje je $\langle \epsilon |$. Diferencijalni udarni presjek u režimu Waller-Hartree aproksimacije postaje

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{WH}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{FEA}} S(k, Z). \quad (4.6)$$

Funkcija raspršenja S se može izračunati pomoću polu-empirijskih formula ili se može interpolirati iz tablica⁹. Rubne vrijednosti funkcije raspršenja su $S(0, Z) = 0$ i $S(\infty, Z) = Z$. Nekoherentna funkcija raspršenja monotono raste od nule pri malim prijenosima momenta, do Z pri velikim prijenosima momenta, kad se aproksimacije WH i FEA slažu.

Usporedba FEA i WH aproksimacije prikazana je na slici 4.1 na primjeru atoma bakra ($Z = 29$) i upadnog fotona energije $\omega_i = 70 \text{ keV}$. FEA aproksimacija predstavljena je Klein-Nishininom jednadžbom, a za teorijsku krivulju u WH aproksimaciji korištena je funkcija $S(\theta)$ interpolirana na temelju tabličnih vrijednosti za atom bakra [42]. U FEA aproksimaciji najveći diferencijalni udarni presjek očekujemo za frontalno raspršenje ($\theta = 0^\circ$), dok u WH aproksimaciji diferencijalni udarni presjek iščezava kako kut raspršenja teži prema nuli. Eksperimentalni rezultati za raspršenje fotona na atomu bakra [43] pokazuju odlično slaganje s WH aproksimacijom.

⁹<https://www-nds.iaea.org/epdl97/> Ova biblioteka uključuje podatke o interakciji fotona za sve elemente s atomskim brojem između $Z=1$ (vodik) i $Z=100$ (fermij). U biblioteci se može pronaći i podatak o nekoherentnoj funkciji raspršenja.



Slika 4.1: Usporedba diferencijalnog udarnog presjeka $d\sigma/d\Omega$ u teorijskoj FEA aproksimaciji i WH aproksimaciji [42] te eksperimentalni podatci [43] za raspršenje fotona energije 70 keV na vezanom elektronu atoma bakra ($Z=29$).

4.2 Impulsna aproksimacija (IA)

U režimu impulsne aproksimacije uzimaju se u obzir efekti vezanja elektrona u atomu i gibanja elektrona u atomu koja prethode sudaru s fotonom. Zbog kretanja oko jezgre vezani elektroni imaju gustoću raspodjele momenta $\rho(\vec{p})$. Hipoteza impulsne aproksimacije je da elektrone vezane u atomu možemo tretirati kao slobodne elektrone s istom raspodjelom gustoće momenta. Sudar upadnog fotona i vezanog elektrona događa se jako brzo pa se utjecaj drugih elektrona u ovoj aproksimaciji zanemaruje. Aproksimacija je valjana u slučajevima kad je prijenos impulsa fotona mnogo veći od prosječnog momenta vezanog elektrona. [44].

Dvostruki udarni presjek (DDCS) u IA aproksimaciji dan je s

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_f} \right)_{\text{IA}} = \iiint d^3p \rho(\vec{p}) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega d\omega_f} \right)_{\text{FEA}} \times \delta(E + \omega_i - E' - \omega_f), \quad (4.7)$$

gdje je su ω_i , ω_f i Ω energija ulaznog fotona te energija i prostorni kut raspršenog fotona, slijedom, dok su E i E' su energije elektrona prije i nakon raspršenja. Pritom DDCS u FEA aproksimaciji dobivamo deriviranjem jednadžbe (3.79) po izlaznim energijama fotona ω_f [45]

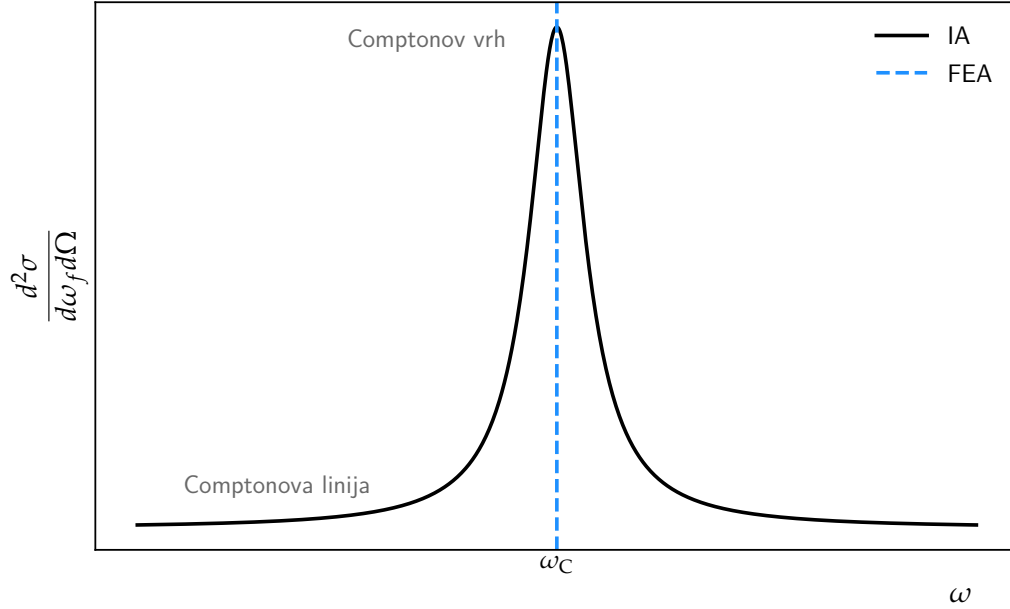
$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_f} \right)_{\text{FEA}} = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{\omega_f}{\omega_i} \right)^2 \left[\frac{\omega_f}{\omega_i} + \frac{\omega_i}{\omega_f} + 4(\vec{\epsilon}_i \cdot \vec{\epsilon}_f)^2 - 2 \right] \times \delta(\omega_f - \omega_C), \quad (4.8)$$

gdje su $\vec{\epsilon}_i$ i $\vec{\epsilon}_f$ polarizacijski vektori upadnog i raspršenog fotona, a ω_C je energija izlaznog fotona dana jednadžbom (3.24).

U rezultatima FEA, zbog Diracove delta funkcije $\delta(\omega_f - \omega_C)$ u jednadžbi (4.8), spektar DDCS-a je vertikalna linija koja se nalazi na takozvanoj Comptonovoj energiji ω_C . Ta linija, koja se još naziva Comptonova linija, prikazana je na slici 4.2. Jednadžba (4.7) može se promatrati kao osnovno polazište IA pristupa, a različite inačice IA tretmana postižu se primjenom različitih numeričkih shema potrebnih za izračunavanje jednadžbe (4.7).

Prethodno spomenuti učinci vezanja atoma i kretanje elektrona prije sudara čine rezultate IA značajno drugačijima od rezultata FEA aproksimacije. U pretpostavkama FEA postoji veza između konačne energije fotona $\omega_f = \omega_C$ i kuta raspršenja θ , dok u IA pristupu, zbog gibanja elektrona oko atomske jezgre, energija raspršenog fotona ω_f ne može se u potpunosti odrediti njegovim kutom raspršenja θ kao u FEA aproksimaciji. Stoga u IA aproksimaciji za određeni kut raspršenja θ , energija raspršenog fotona ima distribuciju s maksimumom pri Comptonovoj energiji ω_C , koja je dana jednadžbom (3.24), tvoreći takozvani Comptonov vrh u spektru dvostrukog diferencijalnog presjeka.

Na slici 4.2 može se vidjeti shematska usporedba dvostrukog diferencijalnog udarnog presjeka u FEA i IA pristupima. Comptonov vrh u IA pristupu može se tumačiti kao Dopplerov učinak širenja Comptonove linije centrirane oko Comptonve energije ω_C nastao zbog gibanja vezanih elektrona oko atomskih jezgri [46, 47].



Slika 4.2: Usporedba dvostrukog diferencijalnog udarnog presjeka za zadani kut raspršenja θ u FEA aproksimaciji (vertikalna isprekidana linija na energiji jednakoј ω_C) te IA aproksimaciji, gdje se uočava Dopplerovo širenje oko ω_C .

4.2.1 Nerelativistička impulsna aproksimacija (NRIA)

Nerelativistička impulsna aproksimacija (NRIA) oslanja se na dinamička i kinematička svojstva Comptonovog raspršenja u nerelativističkom režimu [4–6]. U NRIA, DDSCS Comptonovog raspršenja dan je s

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_f} \right)_{\text{NRIA}} = \frac{r_e^2}{2} \frac{m}{q} \frac{\omega_f}{\omega_i} (1 + \cos^2 \theta) J(p_z), \quad (4.9)$$

gdje je m masa elektrona, a q je magnituda vektora prijenosa momenta, dana s (4.5). Ako se meta sastoji od elektrona s raspodjelom gustoće momenta $\rho(\vec{p})$, DDSCS će biti proporcionalan projekciji $J(p_z)$ u koordinatnom sustavu u kojem vektor raspršenja definira z-os. Faktor $J(p_z)$ potječe iz mnogočestičnih učinaka u atomskog ili molekulskom sustavu, a još se naziva Comptonov profil [48]. Definira se kao

$$J(p_z) = \iint \rho(\vec{p}) dp_x dp_y \quad (4.10)$$

gdje su p_x , p_y i p_z Kartezijeve komponente momenta \vec{p} . Comptonov profil posebno opisuje elektronska svojstva u atomskim i molekulskim sustavima i proučavan je detaljnije u domeni fizike čvrstog stanja.

Konkretno, z-komponenta momenta dana je s

$$p_z = \frac{q}{2} - \frac{m(\omega_i - \omega_f)}{q}. \quad (4.11)$$

Ako je raspodjela momenata sferno simetrična, što je često slučaj u atomskim sustavima, jednačba (4.10) se svodi na

$$J(p_z) = 2\pi \int_{|p_z|}^{\infty} p\rho(p)dp. \quad (4.12)$$

Uvođenjem faktora $Y_{\text{NRIA}} = r_e^2 m \omega_f (1 + \cos^2 \theta) / (2q\omega_i)$ jednačba (4.9) svodi se na

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_f} \right)_{\text{NRIA}} = Y_{\text{NRIA}} \cdot J(p_z). \quad (4.13)$$

Jednačbu možemo tumačiti na idući način: faktor Y_{NRIA} opisuje dinamička i kinematička svojstva raspršenja u nerelativističkoj granici, a faktor $J(p_z)$ (*Comptonov profil*) opisuje mnogočestične efekte u atomskom sustavu.

U 1970-ima, P. Eisenberger i P. M. Platzman ponovno su izveli NRIA formulaciju na temelju točnijeg pristupa matrice raspršenja (SM), o kojoj će biti govora poslije. Pokazano je da se NRIA može promatrati kao aproksimacija vodećeg reda SM pristupa [15].

4.2.2 Relativistička impulsna aproksimacija (RIA)

U relativističkoj aproksimaciji [7, 8] DDCS dan je prema (4.7) s

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_f} \right)_{\text{RIA}} = \frac{r_e^2 m^2 \omega_f}{2 \omega_i} \iiint d^3p \rho(\vec{p}) \frac{X(K_i, K_f)}{E E'} \times \delta(E + \omega_i - E' - \omega_f), \quad (4.14)$$

gdje su funkcije K_i i K_f definirane kao

$$\begin{aligned} K_i &= E \cdot \omega_i - \vec{p} \cdot \vec{k}_i, \\ K_f &= E \cdot \omega_f - \vec{p} \cdot \vec{k}_f \\ &= K_i - \omega_i \omega_f (1 - \cos \theta), \end{aligned} \quad (4.15)$$

a jezgrena funkcija $X(K_i, K_f)$ je dana s

$$X(K_i, K_f) = \frac{K_i}{K_f} + \frac{K_f}{K_i} + 2m^2 \left(\frac{1}{K_i} - \frac{1}{K_f} \right) + m^4 \left(\frac{1}{K_i} - \frac{1}{K_f} \right)^2. \quad (4.16)$$

Integracija u jednadžbi (4.14) je po svim komponentama momenta \vec{p} (p_x , p_y , p_z), ali ako uvedemo takav koordinatni sustav u kojem će smjer prijenosa momenta \vec{k} usmjeren uzduž osi z onda jednadžbe (4.16) možemo aproksimirati s

$$\begin{aligned} K_i(p_z) &= \omega_i E(p_z) + \frac{\omega_i(\omega_i - \omega_f \cos \theta) p_z}{k}, \\ K_f(p_z) &= K_i(p_z) - \omega_i \omega_f (1 - \cos \theta), \\ X(p_z) &= \frac{K_i(p_z)}{K_f(p_z)} + \frac{K_f(p_z)}{K_i(p_z)} \\ &\quad + 2m^2 \left(\frac{1}{K_i(p_z)} - \frac{1}{K_f(p_z)} \right) \\ &\quad + m^4 \left(\frac{1}{K_i(p_z)} - \frac{1}{K_f(p_z)} \right)^2, \end{aligned} \quad (4.17)$$

gdje je $E(p_z) = \sqrt{m^2 + p_z^2}$, a z -komponenta impulsa je

$$p_z = \frac{\omega_i \omega_f (1 - \cos \theta) - E(p_z)(\omega_i - \omega_f)}{k}. \quad (4.18)$$

U granici $p_z \rightarrow 0$ dobiva se Klein-Nishinina vrijdnost (3.26)

$$X(p_z \rightarrow 0) = \frac{\omega_i}{\omega_f} + \frac{\omega_f}{\omega_i} - \sin^2 \theta. \quad (4.19)$$

Sad se DDCS impulsne aproksimacije u relativističkom režimu svodi na

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_f} \right)_{\text{RIA}} = \frac{r_e^2}{2} \frac{m^2}{k E(p_z)} \frac{\omega_f}{\omega_i} X(p_z) J(p_z). \quad (4.20)$$

Uvođenjem faktora $Y_{\text{RIA}} = r_e^2 m^2 \omega_f X(p_z) / (2k E(p_z) \omega_i)$ jednadžba (4.20) svodi se na

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_f} \right)_{\text{RIA}} = Y_{\text{RIA}} \cdot J(p_z). \quad (4.21)$$

Usporedbom s (4.13) vidimo da se DDCS ponovno može razdijeliti na dva dijela: faktor Y_{RIA} opisuje dinamička i kinematička svojstva raspršenja u relativističkoj granici, a faktor $J(p_z)$ je Comptonov profil.

4.3 Aproksimacija matrice raspršenja (SM)

Matrica raspršenja (SM ¹⁰ matrica) predstavlja niz matematičkih veličina koje povezuju početno i konačno stanje fizičkog sustava koji prolazi kroz proces raspršenja i predviđaju vjerojatnosti svih mogućih ishoda. Pojedinačni elementi u S-matrici poznati su kao amplitude raspršenja \mathcal{M} potrebne za računanje udarnog presjeka. U SM pristupu također su obuhvaćeni efekti vezanja elektrona u atomu kao i mnogočestični učinci, ali mnogo detaljnije nego u ranije spomenutim pristupima (FEA i IA) [13]. Zbog te prednosti SM pristup može služiti kao svojevrsna provjera valjanosti FEA i IA aproksimacija te određivanje granica njihove validnosti [49,50]. SM aproksimacijom mogu se obuhvatiti sva područja spektra: Comptonska linija i vrh, rezonantno Raman-Comptonovo raspršenje i infracrvene divergencije na niskim energijama raspršenog fotona. Međutim, neke aproksimacije su ipak uzete u obzir, kao što su zanemarivanje pobuđenja jezgre i nelinearni učinci ovisni o gustoći fotona [51].

U SM pristupu se DDCS Comptonovog raspršenja može odrediti kao

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_f} \right)_{\text{SM}} \propto |\mathcal{M}_{fi}|^2, \quad (4.22)$$

gdje je $\mathcal{M}_{fi} \propto \langle \Psi_f | \mathcal{H}_I | \Psi_i \rangle$, a \mathcal{H}_I je hamiltonijan interakcije u atomskim ili molekulskim sustavima koji opisuje elektromagnetsku interakciju između vezanih elektrona i fotonskih polja. Dvije osnovne podjele temeljene na hamiltonijanu interakcije su nerelativistička i relativistička teorija.

Ako s \mathbf{A} označimo vektorski potencijal upadnih fotona, a s \vec{p}_i moment i -tog elektrona ($i \in [1, N]$), u nerelativističkom slučaju hamiltonijan interakcije dan je s

$$\mathcal{H}_I^{\text{NR}} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 - \frac{e}{m} \vec{p}_i \cdot \mathbf{A} \right]. \quad (4.23)$$

Prvi član u gornjoj jednadžbi nazivamo A^2 članom [16–18], a drugi p - A članom [19–21]. Više govora o njima bit će u idućim poglavljima. Zadržavanje samo prvog člana je tzv. A^2 aproksimacija koja dobro opisuje Comptonski spektar u području Comptonskog vrha, uključujući efekte širenja zbog gibanja elektrona i pomaka vrha. A^2 član opisuje raspršenje fotona u prvom redu smetnje. Zadržavanje samo drugog člana je p - A aproksimacija koja dobro opisuje niskoenergijski dio spektra (ispod 20 energija veze E_B) i područje rezonancije. p - A član opisuje emisiju i apsorpciju fotona u prvom redu smetnje, a raspršenje fotona u drugom. [51].

¹⁰akronim od engl. *scattering matrix*

Konačno stanje kod raspršenja fotona na vezanom elektronu sastoji se od elektrona energije E' , raspršenog fotona energije ω_f i iona. Zbog velike mase, ion preuzima zanemarivo malu količinu energije, pa se energija $(\omega_i - E_B)$ raspodjeljuje između elektrona i raspršenog fotona. Za energiju fotona vrijedi

$$0 < \omega_f < \omega_i - E_B. \quad (4.24)$$

Pritom vrijedi da je širina raspodjele energije dana nejednadžbom mnogo uža pri raspršenju fotona na vanjskim ljuskama nego na unutarnjim elektronima.

U SM aproksimaciji se TDCS (4.3) može zapisati kao

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\Omega d\omega_f d\Omega'} \right)_{\text{SM}} = r_e^2 \frac{\omega_f}{\omega_i} |\mathcal{M}_{fi}|^2. \quad (4.25)$$

Postoji mnogo tehnika za izračunavanje elemenata matrice raspršenja \mathcal{M}_{fi} u jednadžbi (4.25), koji su opširni za domenu ovog rada. Ali, konkretno u nerelativističkoj teoriji se element matrice raspršenja svodi se na Kramers-Heisenberg-Wallerov (KHW) matrični element [27–29, 51] koji je definiran kao

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{fi} &= \left(\vec{\epsilon}_f^* \cdot \vec{\epsilon}_i \right) \langle f | e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{r}} | i \rangle \\ &- \frac{1}{m} \sum_n \frac{\langle f | e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} \left(\vec{\epsilon}_f^* \cdot \vec{p} \right) | n \rangle \langle n | e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \left(\vec{\epsilon}_i \cdot \vec{p} \right) | i \rangle}{E_n - (E_B + \omega_i + i\varepsilon)} \\ &- \frac{1}{m} \sum_n \frac{\langle f | e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \left(\vec{\epsilon}_i \cdot \vec{p} \right) | n \rangle \langle n | e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} \left(\vec{\epsilon}_f^* \cdot \vec{p} \right) | i \rangle}{E_n - (E_B + \omega_f)}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

U gornjoj jednadžbi E_B je energija vezanja elektrona prije raspršenja, $\vec{\epsilon}_i$ i $\vec{\epsilon}_f$ su polarizacijski vektori fotona prije i poslije raspršenja, a ω_i i ω_f su energije elektrona prije i poslije raspršenja. Vektori $|f\rangle$ i $|i\rangle$ predstavljaju slijedom rješenja Schrödingerove jednadžbe za konačno i početno stanje elektronskih valnih funkcija u FEA modelu, a $|n\rangle$ su međustanja preko kojih se sumira. Infinitesimalna veličina ε eliminira singularitet koji se pojavljuje prilikom integriranja po kontinuumu [51]. Prvi član odgovara A^2 članu u hamiltonijanu interakcije, a iduća dva člana odgovaraju p - A članu izračunatom u drugom redu računa smetnje. Pritom prva sumacija u (4.26) opisuje proces u kojem je elektron prvo apsorbirao, a zatim emitirao foton (slika 3.10.a)), a druga sumacija predstavlja proces u kojem se prvo dogodila emisija (slika 3.10.b)) [51].

4.3.1 p - A aproksimacija

Ova aproksimacija temelji se na drugom i trećem članu jednadžbe (4.26) koji potječu iz drugog člana hamiltonijana (4.23). Dobro opisuje proces raspršenja pri niskim energijama upadnog fotona kad se ravni val $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ može zamijeniti jedinicom, pa zbog ortogonalnosti stanja $|f\rangle$ i $|i\rangle$ prvi član u (4.26) iščezava. Zbog sumacije preko međustanja računanje p - A član je mnogo složenije od A^2 aproksimacije, a korištenjem Greenove funkcije može svesti na matrični element koji sadrži integrale u impulsnom prostoru [19]. Međutim, ti integrali se svode na Gaussove hipergeometrijske funkcije i ne mogu se izračunati analitički.

U slučaju kad raspršeni foton ima nisku energiju ($\omega_f \rightarrow 0$) izraz se može svesti na analitičke funkcije. Iz (4.25) i (4.26) slijedi

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{p.A} = \frac{r_e^2}{m} \cdot \frac{16 p^4 p'^4}{\pi \omega_i \omega_f (p'^2 + p^2)^3} \cdot \frac{\exp\left(4 \frac{p}{p'} \arctg \frac{p}{p'}\right)}{1 - \exp\left(-2\pi \frac{p}{p'}\right)}. \quad (4.27)$$

Moment izlaznog elektrona je p' te vrijedi zakon očuvanja $p' + p^2 = 2m(\omega_i - \omega_f)$, gdje moment vezanog elektrona možemo dobiti iz energije vezanja

$$E_B = -\frac{p^2}{2m}. \quad (4.28)$$

Jednadžba (4.27) pokazuje kako TDCS u p - A aproksimaciji dovodi do divergencije na malim energijama jer udarni presjek raste sa smanjenjem ω_f . Integriranjem po kutu izlaznog elektrona [19, 20] dobivamo DDCS oblika

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_f d\Omega} \right)_{p.A} = \frac{r_e^2}{2 \cdot E_B} (C_1 + C_2 \cos\theta), \quad (4.29)$$

gdje su veličine C_1 i C_2 tabelirane u [20] za razne energije ulaznog i raspršenog fotona. Integriranjem po diferencijalnom prostornom kutu raspršenog fotona $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ dobivamo

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\omega_f} \right)_{p.A} &= \int_0^\pi \left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_f d\Omega} \right)_{p.A} d\Omega \\ &= 2\pi \frac{r_e^2}{E_B} \left(C_1 + \frac{1}{3} C_2 \right). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Metoda dipolne p - A aproksimacije primjenjiva je za raspršenje na elektronu iz K -ljuske samo ako vrijedi da je omjer $Z/140 \ll 1$ i ako je energija upadnog fotona manja od $|E_B|$. Za $\omega_1 \gg |E_B|$ doprinos p - A člana je malen u odnosu na A^2 član, a za mirni elektron iščezava.

4.3.2 A^2 aproksimacija

A^2 aproksimacija temelji se na prvom članu jednadžbe (4.26), tzv. *seagull* članu,

$$\mathcal{M}_{fi} = \left(\vec{\epsilon}_f^* \cdot \vec{\epsilon}_i \right) \left\langle f \left| e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{r}} \right| i \right\rangle \quad (4.31)$$

koji potječe iz prvog člana nerelativističkog hamiltonijana (4.23). Valjana je na višim energijama ($\omega_1 \gg |E_B|$) kad možemo zanemariti p - A član, pa je A^2 aproksimacija dobra za opisivanje dijela spektra oko Comptonskog vrha. Comptonski vrh će biti vidljiv za sve kutove raspršenja [14] ako energija upadnog fotona zadovoljava uvjet

$$\omega_i > \sqrt{\frac{7}{3(1 - \cos\theta)}} \frac{E_B}{Z\alpha}. \quad (4.32)$$

Na nižim energijama ovaj član iščezava. Nerelativistički uvjeti zahtijevaju da energija upadnog fotona bude niska u odnosu na energiju mirovanja elektrona ($\omega_1 \ll m$), a početna energija elektrona E te energija raspršenog elektrona E' ne smiju biti mnogo veće u odnosu na energiju mirovanja elektrona ($|E - m| \ll m$, $|E' - m| \ll m$). Za slučaj $Z \rightarrow 0$ ova aproksimacija se svodi na nerelativističku Klein-Nishininu jednadžbu za raspršenje na slobodnom elektronu. Feynmanov dijagram koji odgovara A^2 članu prikazan je na slici 4.3.

Efekti vezanja zbog energije vezanja E_B manifestiraju se kao Dopplerovo širenje linije te pomak vrha od one energije na kojoj se vrh nalazi pri raspršenju na mirnom i slobodnom elektronu u FEA aproksimaciji. Također, gornja granica za energiju raspršenog fotona dana je s

$$\omega_{\max} = \omega_i - E_B. \quad (4.33)$$

Za izračunavanje TDCS i DDCS u A^2 formalizmu koristit ćemo Fermijevo zlatno pravilo, koje opisuje vjerojatnost preslaska iz početnog $|i\rangle$ u konačno stanje $|f\rangle$ opisano gustoćom konačnih stanja $\rho(E_f)$,

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = 2\pi \left| \mathcal{M}_{fi} \right|^2 \rho(E_f). \quad (4.34)$$

Diferencijalni udarni presjek je definiran kao omjer upadnog toka J_{inc} i izlaznog toka raspršenih čestica, $d\sigma/d\Omega = (1/J_{\text{inc}}) / (dN/d\Omega)$, pa je vjerojatnost prijelaza povezana je s diferencijalnim udarnim presjekom na idući način

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = d\sigma J_{\text{inc}}. \quad (4.35)$$

Koristeći prvi član iz (4.26) te $\rho(E_f) = \sum_f d^3k / (2\pi)^3 \delta(E_{\text{uk}})$ i prelazak $\sum_f \rightarrow d^3p / (2\pi)^3$, za stopu prijelaza dobivamo

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = 2\pi \left(\frac{e^2}{2m} \right)^2 \left| \left(\vec{\epsilon}_f^* \cdot \vec{\epsilon}_i \right) \langle f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} | i \rangle \right|^2 \delta(\omega_i - \omega_f - E_B - E') \frac{d^3k_f}{(2\pi)^3} \frac{d^3p'}{(2\pi)^3}, \quad (4.36)$$

gdje je $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$. Uz takav odabir jedinica da je $J_{\text{inc}} = 1$, korištenjem (4.35) dobivamo

$$d\sigma = \frac{1}{(2\pi)^5} \left(\frac{e^2}{2m} \right)^2 \left| \left(\vec{\epsilon}_f^* \cdot \vec{\epsilon}_i \right) \langle f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} | i \rangle \right|^2 \omega_f^2 d\omega_f p'^2 dp' d\Omega d\Omega' \delta(\omega_i - \omega_f - E_B - E'). \quad (4.37)$$

Uz pretpostavku da je foton nepolariziran te koristeći oznake $|\Psi_i\rangle$ i $|\Psi_f\rangle$ slijedom početno i konačno stanje elektrona, za TDCS dobivamo [18]

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{A^2} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T \frac{p'E'}{(2\pi)^3} \frac{\omega_f}{\omega_i} \left| \langle \Psi_f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} | \Psi_i \rangle \right|^2. \quad (4.38)$$

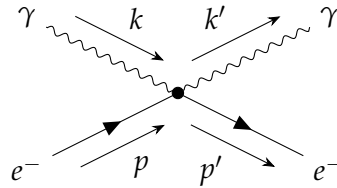
gdje je $(d\sigma/d\Omega)_T$ Thomsonov diferencijalni udarni presjek dan jednadžbom (3.28). Detaljnija jednadžba diferencijalnog udarnog presjeka zahtijeva računanje matričnog elementa. Početno (vezano) stanje elektrona u određenoj ljusci se u sfernom Coulombovom potencijalu

$$U(r) = -\frac{Z\alpha}{r}, \quad (4.39)$$

svodi na rješenje vremenski ovisne valne funkcije, oblika

$$\Psi_i = \Psi_{n,l,m}(\vec{r}) = \Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \phi), \quad (4.40)$$

gdje su $R_{n,l}$ radijalne valne funkcije, Y_l^m sferni harmonici, a n , l i m su glavni kvantni broj, orbitalni kvantni broj i magnetski kvantni broj, slijedom.



Slika 4.3: Feynmanov dijagram koji odgovara A^2 u hamiltonijanu interakcije (4.23).

4.4 Primjena A^2 aproksimacije s ravnim valom

4.4.1 Raspršenje na K -ljusci

Najniža ljuska je ona opisana glavnim kvantnim brojem $n = 1$, a naziva se još i K -ljuska. Za tu ljusku orbitalni brojevi mogu poprimiti samo vrijednosti $l = m = 0$. To osnovno stanje $1s$ opisano je funkcijom

$$\Psi_{1,0,0}(\vec{r}) = R_{1,0}(r) Y_0^0(\theta, \phi), \quad (4.1)$$

gdje su

$$R_{1,0}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}, \quad Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}}, \quad (4.2)$$

a $a_0 = 52.92 \text{ pm}$ je Bohrov polumjer. Uvodeći oznake $\zeta = Z/a_0$ i $N = \sqrt{\zeta^3/\pi}$, jednadžba (4.1) se uz vrijednosti (4.2) svodi na

$$\Psi_i = \Psi_{1,0,0}(\vec{r}) = N e^{-\zeta r}. \quad (4.3)$$

Relativni impuls elektrona (m_e) u odnosu na atom ($M = m_e + m_p$) jednak je $\vec{p}' = \frac{m_p}{M} \vec{p}_e + \frac{m_e}{M} \vec{p}_p$, ali zbog $m_e \ll m_p$ vrijedi $\vec{p}' \approx \vec{p}_e$. Za konačno stanje koristimo Bornovu aproksimaciju ravnog vala $\Psi_f = e^{-i\vec{p}' \cdot \vec{r}}$. Uvrstimo li (4.3) u matični element dan u (4.38), dobivamo

$$\langle \Psi_f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} | \Psi_i \rangle = \int e^{-i\vec{p}' \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} N e^{-\zeta r} d^3r = N \int e^{i(\vec{k} - \vec{p}') \cdot \vec{r}} e^{-\zeta r} d^3r. \quad (4.4)$$

Definiramo $\vec{q} = \vec{k} - \vec{p}'$ i odabiremo koordinatni sustav sa z -osi u smjeru vektora \vec{q} pa vrijedi $\vec{q} \cdot \vec{r} = qr \cos \vartheta$. Integriramo (4.4) u sfernim koordinatama,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} | \Psi_i \rangle &= N \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{iqr \cos \vartheta} e^{-\zeta r} r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\phi \\ &= 2\pi N \int_0^\pi \int_0^\infty e^{iqr \cos \vartheta} e^{-\zeta r} r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Koristimo substituciju $\cos \vartheta = t$ pa za granice integracije po kutu ϑ dobivamo $\vartheta_1 = 0 \rightarrow t_1 = 1$ i $\vartheta_2 = \pi \rightarrow t_2 = -1$. Također je $dt = -\sin \vartheta d\vartheta$.

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} | \Psi_i \rangle &= 2\pi N \int_1^{-1} \int_0^\infty (-r^2 e^{iqr t} e^{-\zeta r}) dr dt \\ &= 2\pi N \int_{-1}^1 \int_0^\infty r^2 e^{iqr t} e^{-\zeta r} dr dt \\ &= 2\pi N \int_0^\infty r^2 e^{-\zeta r} \left(\frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr} \right) dr \\ &= \frac{2\pi N}{iq} \int_0^\infty r e^{-\zeta r} (e^{iqr} - e^{-iqr}) dr. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Posljednji integral u (4.6) svodi se na razliku dvaju tabličnih integrala koji daju

$$\langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle = \frac{2\pi N}{iq} \left(\frac{1}{(\zeta + iq)^2} - \frac{1}{(\zeta - iq)^2} \right). \quad (4.7)$$

Sređivanjem članova u zagradi, za matricni element dobivamo

$$\langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle = \frac{8\pi N \zeta}{(q^2 + \zeta^2)^2}. \quad (4.8)$$

Nakon uvrštavanja u (4.38) i sređivanja, uz korištenje $N = \sqrt{\zeta^3/\pi}$ i $\vec{q} = \vec{k} - \vec{p}'$ dobivamo

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Born}}^{\text{K}} = \frac{8 p' E' \zeta^5}{\pi^2} \frac{\omega_f}{\omega_i} \frac{1}{\left[(\vec{k} - \vec{p}')^2 + \zeta^2 \right]^4} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{T}}', \quad (4.9)$$

gdje je $E' \approx m_e$ ukupna energija izlaznog elektrona. Integriranjem po prostornom kutu izlaznog elektrona $d\Omega' = \sin\vartheta d\vartheta d\phi$ i uvođenjem veličine $f^2 = k^2 - p'^2 + \zeta^2$ dobivamo dvostruki diferencijalni udarni presjek za 1s elektron u A^2 aproksimaciji.

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_f d\Omega} \right)_{\text{Born}}^{\text{K}} &= \int \left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Born}}^{\text{K}} d\Omega' \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{8}{\pi^2} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{T}} \frac{\omega_f}{\omega_i} \frac{p' E' \zeta^5 \sin\vartheta}{(f^2 - 2kp' \cos\vartheta)^4} d\vartheta d\phi \\ &= \frac{16}{\pi} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{T}} p' E' \zeta^5 \frac{\omega_f}{\omega_i} \int_0^\pi \frac{\sin\vartheta}{(f^2 - 2kp' \cos\vartheta)^4} d\vartheta d\phi. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Uz korištenje supstitucije $\cos\vartheta = t$ integral po kutu ϑ se svodi na

$$\int_{-1}^1 \frac{dt}{(f^2 - 2kp't)^4} = \frac{2}{3} \frac{4k^2 p'^2 + 3f^4}{(4k^2 p'^2 - f^4)^3}. \quad (4.11)$$

Uvrštavanjem u (4.10) i podsjećanjem da je $f^2 = k^2 - p'^2 + \zeta^2$ dobivamo DDCCS za raspršenje na 1s elektronu,

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_f d\Omega} \right)_{\text{Born}}^{\text{K}} = \frac{32 p' E' \zeta^5}{3\pi} \frac{\omega_f}{\omega_i} \frac{4k^2 p'^2 + 3(k^2 - p'^2 + \zeta^2)^2}{\left((k^2 - p'^2 + \zeta^2)^2 - 4k^2 p'^2 \right)^3} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{T}}. \quad (4.12)$$

4.4.2 Raspršenje na L -ljuskama

$L1$ -ljuska

Za 2s elektron u $L1$ ljusci vrijede kvantni brojevi $n = 2$, $l = 0$ i $m = 0$. Prema (4.40) stanje je opisano funkcijom

$$\Psi_{2,0,0}(\vec{r}) = R_{2,0}(r) Y_0^0(\theta, \phi), \quad (4.13)$$

gdje su

$$R_{2,0}(r) = 2 \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}, \quad Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\pi}}. \quad (4.14)$$

Uvrštavanjem u (4.22) početno stanje opisano je s

$$\Psi_i = \Psi_{2,0,0}(\vec{r}) = \frac{1}{4\sqrt{2}} N (2 - \zeta r) e^{-\frac{\zeta}{2}r}. \quad (4.15)$$

To stanje uvrštavamo u matricni element iz (4.38) i integriramo

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \int e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(\frac{1}{4\sqrt{2}} N (2 - \zeta r) e^{-\frac{\zeta}{2}r} \right) d^3r \\ &= \frac{1}{4\sqrt{2}} N \int e^{i(\vec{k}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} (2 - \zeta r) e^{-\frac{\zeta}{2}r} d^3r. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Definiramo vektor $\vec{q} = \vec{k} - \vec{p}'$ kao u prethodnom poglavlju i integriramo (4.16) u sfernim koordinatama,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \frac{1}{4\sqrt{2}} N \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{iqr \cos \vartheta} (2 - \zeta r) e^{-\frac{\zeta}{2}r} r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\phi \\ &= \frac{N\pi}{2\sqrt{2}} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{iqr \cos \vartheta} (2 - \zeta r) e^{-\frac{\zeta}{2}r} r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Za integraciju po kutu ϑ koristimo supstituciju $\cos \vartheta = t$ s granicama $t \in [1, -1]$. Također vrijedi $dt = -\sin \vartheta d\vartheta$, a negativnog predznaka se rješavamo obrtanjem granica integracije po varijabli t .

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \frac{N\pi}{2\sqrt{2}} \int_1^{-1} \int_0^\infty -e^{iqrt} (2 - \zeta r) e^{-\frac{\zeta}{2}r} r^2 dr dt \\ &= \frac{N\pi}{2\sqrt{2}} \int_{-1}^1 \int_0^\infty e^{iqrt} (2 - \zeta r) e^{-\frac{\zeta}{2}r} r^2 dr dt \\ &= \frac{N\pi}{2\sqrt{2}iq} \int_0^\infty (e^{iqr} - e^{-iqr}) (2 - \zeta r) e^{-\frac{\zeta}{2}r} r dr \\ &= \frac{N\pi}{2\sqrt{2}iq} \left[\frac{64i\zeta q}{(\zeta^2 + 4q^2)^2} - 16\zeta \left(\frac{1}{(\zeta - 2iq)^3} - \frac{1}{(\zeta + 2iq)^3} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Na desnoj strani u posljednjoj zagradi prepoznajemo u nazivnicima kub zbroja i kub razlike. Svođenjem na zajednički nazivnik dobivamo

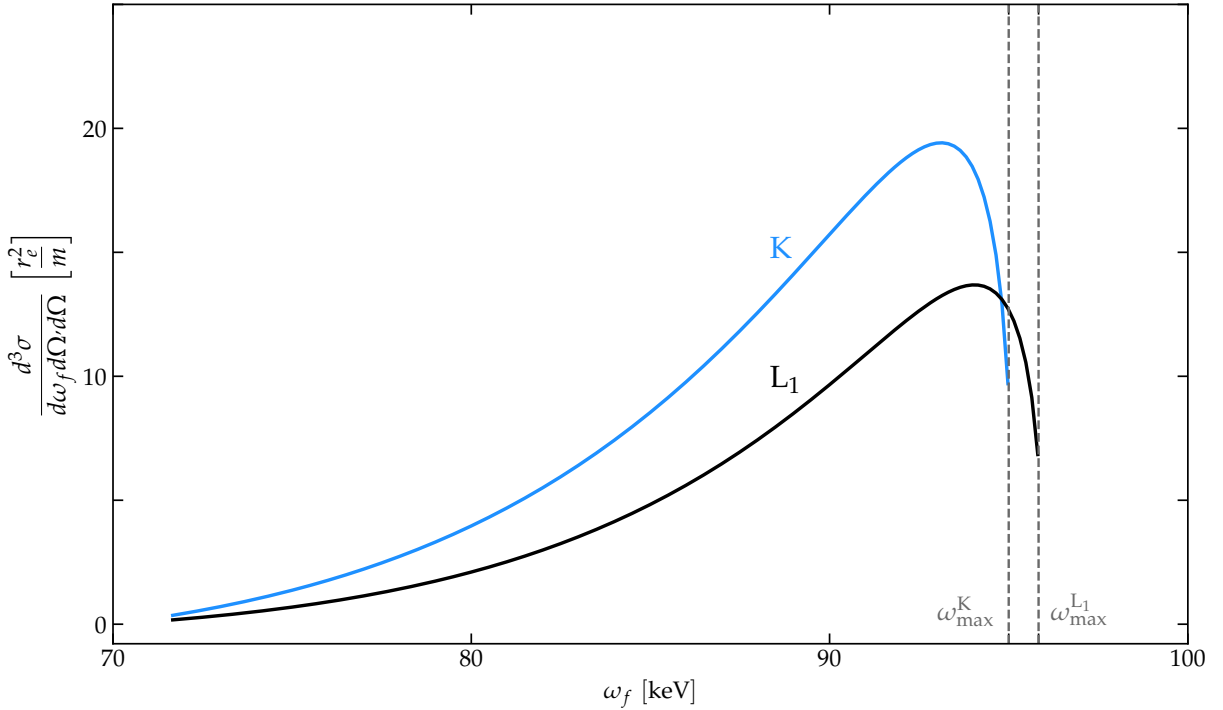
$$\begin{aligned}\langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \frac{N\pi}{2\sqrt{2}iq} \left(\frac{128i\zeta q (4q^2 - \zeta^2)}{(4q^2 + \zeta^2)^3} \right) \\ &= 32\sqrt{2}\pi N\zeta \frac{4q^2 - \zeta^2}{(4q^2 + \zeta^2)^3}.\end{aligned}\quad (4.19)$$

Sad se matrični element može kvadrirati i uvrstiti u (4.38) te se dobiva konačna jednadžba za TDCS koji opisuje raspršenje na L_1 elektronu.

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Born}}^{L_1} = \frac{256 p' E' \zeta^5}{\pi^2} \frac{\omega_f}{\omega_i} \frac{[4(\vec{k} - \vec{p}')^2 - \zeta^2]^2}{[4(\vec{k} - \vec{p}')^2 + \zeta^2]^6} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T. \quad (4.20)$$

Omjer TDCS za L_1 -ljusku (4.20) i za K -ljusku (4.9) jednak je

$$\frac{TDCS_{L_1}}{TDCS_K} = 32 \frac{[4(\vec{k} - \vec{p}')^2 + \zeta^2]^6}{[4(\vec{k} - \vec{p}')^2 - \zeta^2]^2 [(k - p')^2 + \zeta^2]^4}. \quad (4.21)$$



Slika 4.1: Trostruko diferencirani udarni presjek za raspršenje fotona energije $\omega_i = 100\text{keV}$ na atomu silicija ($Z = 14$). Za elektron u K -ljusci atoma silicija energija vezanja je oko 1844eV , dok je za L_1 -ljusku energija vezanja oko 154eV . $\theta = 50^\circ, \theta = 40^\circ$. FEA aproksimacija daje energiju izlaznog fotona od oko $\omega_f \approx 93\text{keV}$.

L2-ljuska

Za 2p elektron u L2 ljusci vrijede kvantni brojevi $n = 2$, $l = 1$ i $m = 0$. Prema (4.40) stanje je opisano funkcijom

$$\Psi_{2,1,0}(\vec{r}) = R_{2,1}(r) Y_1^0(\theta, \phi), \quad (4.22)$$

gdje su

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}, \quad Y_1^0(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta. \quad (4.23)$$

Uvrštavanjem u (4.13) početno stanje opisano je s

$$\Psi_i = \Psi_{2,1,0}(\vec{r}) = \frac{1}{4\sqrt{2}} N \zeta r e^{-\frac{\zeta}{2}r} \cos \theta. \quad (4.24)$$

To stanje uvrštavamo u matični element iz (4.38) i integriramo

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \int e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(\frac{1}{4\sqrt{2}} N \zeta r e^{-\frac{\zeta}{2}r} \cos \theta \right) d^3r \\ &= \frac{1}{4\sqrt{2}} N \zeta \int e^{i(\vec{k}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} e^{-\frac{\zeta}{2}r} \cos \theta r d^3r. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Integriranje nastavljamo u sfernim koordinatama uz odabir vektora $\vec{q} = \vec{k} - \vec{p}'$,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \frac{1}{4\sqrt{2}} N \zeta \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{iqr \cos \theta} e^{-\frac{\zeta}{2}r} r^3 \sin \theta \cos \theta dr d\theta d\phi \\ &= \frac{N\pi\zeta}{2\sqrt{2}} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{iqr \cos \theta} e^{-\frac{\zeta}{2}r} r^3 \sin \theta \cos \theta dr d\theta. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Za integraciju po kutu θ koristimo supstituciju $\cos \theta = t$, kao i u prethodnom poglavlju, i dobivamo

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \frac{N\pi\zeta}{2\sqrt{2}} \int_{-1}^1 \int_0^\infty -e^{iqrt} e^{-\frac{\zeta}{2}r} r^3 t dt dr \\ &= \frac{N\pi\zeta}{2\sqrt{2}} \int_{-1}^1 \int_0^\infty e^{iqrt} e^{-\frac{\zeta}{2}r} r^3 t dt dr \\ &= \frac{N\pi\zeta}{2\sqrt{2}q^2} \int_0^\infty 2ir e^{-\frac{\zeta}{2}r} [\sin(qr) - qr \cos(qr)] dr \\ &= 64\sqrt{2}\pi N \zeta^2 \frac{iq}{(\zeta^2 + 4q^2)^3}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Kvadriranjem i uvrštavanjem u (4.38) dobiva se TDCS za raspršenje na L2 elektronu,

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Born}}^{\text{L2}} = \frac{1024 p' E' \zeta^7}{\pi^2} \frac{\omega_f}{\omega_i} \frac{(\vec{k} - \vec{p}')^2}{[4(\vec{k} - \vec{p}')^2 + \zeta^2]^6} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{T}}. \quad (4.28)$$

L3-ljuska

Razmatramo $2p$ elektron u L3 ljusci opisan kvantnim brojevima $n = 2$, $l = 1$ i $m = \pm 1$. Početno stanje opisano je funkcijom

$$\Psi_{2,1,\pm 1}(\vec{r}) = R_{2,1}(r) Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi), \quad (4.29)$$

gdje su

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}, \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} e^{\pm i\phi} \sin \theta. \quad (4.30)$$

Uvrštavanjem u (4.13) početno stanje opisano je s

$$\Psi_i = \Psi_{2,1,\pm 1}(\vec{r}) = \pm \frac{1}{8} N \zeta r e^{-\frac{\zeta}{2}r} e^{\pm i\phi} \sin \theta. \quad (4.31)$$

Uvrštavamo u matrični element iz (4.38) i dobivamo

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \pm \int e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(\frac{1}{8} N \zeta r e^{-\frac{\zeta}{2}r} e^{\pm i\phi} \sin \theta \right) d^3r \\ &= \pm \frac{1}{8} N \zeta \int e^{i(\vec{k}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} e^{-\frac{\zeta}{2}r} e^{\pm i\phi} \sin \theta r d^3r. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Prelaskom na sferne koordinate, uz $\vec{q} = \vec{k} - \vec{p}'$, dobivamo

$$\langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle = \pm \frac{1}{8} N \zeta \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{iqr \cos \vartheta} e^{-\frac{\zeta}{2}r} e^{\pm i\phi} r^3 \sin^2 \vartheta dr d\vartheta d\phi. \quad (4.33)$$

Integracijom po polarnom kutu ϕ dobivamo

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm i\phi} = 0, \quad (4.34)$$

pa čitav matrični element (4.33) iščezava. Uvrštavanjem u (4.38) zaključujemo da je

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Born}}^{\text{L3}} = 0. \quad (4.35)$$

4.4.3 Raspršenje na M -ljuskama

M ljuska je definirana glavnim kvantnim brojem $n = 3$, a može smjestiti 18 elektrona. Razmotrit ćemo iduće podljuske:

$$M1: n = 3, l = 0, m = 0;$$

$$M2: n = 3, l = 1, m = 0;$$

$$M3: n = 3, l = 1, m = \pm 1;$$

$$M4: n = 3, l = 2, m = 0;$$

$$M5: n = 3, l = 2, m = \pm 1;$$

$$M5: n = 3, l = 2, m = \pm 2.$$

$M1$ -ljuska

Radijalna funkcija i sferni harmonik zadani su s

$$R_{3,0}(r) = 2 \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2(Zr)^2}{27a_0^2} \right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}}, \quad Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}}. \quad (4.36)$$

Za matrični element iz (4.38) dobivamo

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \int e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(\frac{\sqrt{3}}{9} N \left(1 - \frac{2}{3}\xi r + \frac{2}{27}\xi^2 r^2 \right) e^{-\frac{\xi r}{3}} \right) d^3r \\ &= \frac{\sqrt{3}}{9} N \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \left(1 - \frac{2}{3}\xi r + \frac{2}{27}\xi^2 r^2 \right) e^{-\frac{\xi r}{3}} e^{iqr \cos\theta} r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Nakon integriranja po sfernim koordinatama i sređivanja, slijedi

$$\langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle = 72\sqrt{3}\pi N \xi \frac{[\xi^2 - 27(\vec{k} - \vec{p}')^2] [\xi^2 - 3(\vec{k} - \vec{p}')^2]}{[\xi^2 + 9(\vec{k} - \vec{p}')^2]^4}. \quad (4.38)$$

Nakon kvadriranja i uvrštavanja u (4.38) dobiva se TDCS za raspršenje na $M1$ elektronu,

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Born}}^{M1} = \frac{1944 p' E' \xi^5}{\pi^2} \frac{\omega_f}{\omega_i} \frac{[\xi^2 - 27(\vec{k} - \vec{p}')^2]^2 [\xi^2 - 3(\vec{k} - \vec{p}')^2]^2}{[\xi^2 + 9(\vec{k} - \vec{p}')^2]^8} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T. \quad (4.39)$$

M2-ljuska

Radijalna funkcija i sferni harmonik zadani su s

$$R_{3,1}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{3} \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) \left(1 - \frac{Zr}{6a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}}, \quad Y_1^0(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta. \quad (4.40)$$

Matrični element iz (4.38) jednak je

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \int e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(\frac{2\sqrt{2}}{9} N \zeta r \left(1 - \frac{\zeta r}{6}\right) e^{-\frac{\zeta r}{3}} \cos \vartheta \right) d^3r \\ &= \frac{2\sqrt{2}}{9} N \zeta \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \left(1 - \frac{\zeta r}{6}\right) e^{-\frac{\zeta r}{3}} e^{iqr \cos \vartheta} r^3 \cos \vartheta \sin \vartheta dr d\vartheta d\phi. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Integriramo po sfernim koordinatama. Nakon sređivanja dobivamo

$$\langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle = -2592\sqrt{2}i\pi N \zeta^2 \frac{|\vec{k} - \vec{p}'| \left[\zeta^2 - 9(\vec{k} - \vec{p}')^2 \right]}{\left[\zeta^2 + 9(\vec{k} - \vec{p}')^2 \right]^4}. \quad (4.42)$$

Matrični element zatim kvadriramo i uvrštavamo u (4.38). TDCS je

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Born}}^{\text{M2}} = \frac{1296^2 p' E' \zeta^7}{\pi^2} \frac{\omega_f}{\omega_i} \frac{(\vec{k} - \vec{p}')^2 \left[\zeta^2 - 9(\vec{k} - \vec{p}')^2 \right]^2}{\left[\zeta^2 + 9(\vec{k} - \vec{p}')^2 \right]^8} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{T}}. \quad (4.43)$$

M3-ljuska

Radijalna funkcija i sferni harmonik zadani su s

$$R_{3,1}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{3} \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) \left(1 - \frac{Zr}{6a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}}, \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} e^{\pm i\phi} \sin \theta. \quad (4.44)$$

Za matrični element iz (4.38) dobivamo

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \pm \int e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(\frac{2}{9} N \zeta r \left(1 - \frac{\zeta r}{6}\right) e^{-\frac{\zeta r}{3}} e^{\pm i\phi} \sin \vartheta \right) d^3r \\ &= \pm \frac{2}{9} N \zeta \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \left(1 - \frac{\zeta r}{6}\right) e^{-\frac{\zeta r}{3}} e^{iqr \cos \vartheta} e^{\pm i\phi} r^3 \sin^2 \vartheta dr d\vartheta d\phi. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Nakon integriranja po polarnom kutu vidimo da je $\int_0^{2\pi} e^{\pm i\phi} = 0$ pa matrični element iščezava.

TDCS za raspršenje na M3 elektronu je

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Born}}^{\text{M3}} = 0. \quad (4.46)$$

M4-ljuska

Radijalna funkcija i sferni harmonik zadani su s

$$R_{3,2}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}, \quad Y_2^0(\theta, \phi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3\cos^2\theta - 1). \quad (4.47)$$

Matrični element iz (4.38) jednak je

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \int e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(\frac{\sqrt{6}}{486} N(\xi r)^2 (3\cos^2\theta - 1) e^{-\frac{\xi r}{3}} \right) d^3r \\ &= \frac{\sqrt{6}}{486} N \xi^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{-\frac{\xi r}{3}} e^{iqr \cos\theta} r^4 (3\cos^2\theta - 1) \sin\theta dr d\theta d\phi. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Nakon integriranja po sfernim koordinatama, dobivamo

$$\langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle = -\frac{\pi^2}{243 |\vec{k} - \vec{p}'|} N \xi^2. \quad (4.49)$$

Matrični element kvadriramo i uvrstimo u (4.38). Dobivamo TDCS za raspršenje na M4 elektronu,

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Born}}^{\text{M4}} = \frac{p' E' \xi^7}{2\sqrt{2} (243)^2} \frac{\omega_f}{\omega_i} \frac{1}{(\vec{k} - \vec{p}')^2} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T. \quad (4.50)$$

M5 i M6 ljuska

Radijalna funkcija i sferni harmonik za M5 elektron zadani su s

$$R_{3,2}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}, \quad Y_2^{\pm 1}(\theta, \phi) = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} e^{\pm i\phi} \sin\theta \cos\theta, \quad (4.51)$$

a za M6 elektron s

$$R_{3,2}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}, \quad Y_2^{\pm 2}(\theta, \phi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} e^{\pm 2i\phi} \sin^2\theta. \quad (4.52)$$

Primijetimo da u oba sferna harmonika (4.51) i (4.51) postoji ovisnost o polarnom kutu ϕ , pa će matrični elementi zbog $\int_0^{2\pi} e^{\pm i\phi} = 0$, odnosno $\int_0^{2\pi} e^{\pm 2i\phi} = 0$ biti jednaki nuli. Zbog toga zaključujemo da je

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Born}}^{\text{M5}} = 0, \quad \left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Born}}^{\text{M6}} = 0. \quad (4.53)$$

4.4.4 Diferencijalni udarni presjek po energiji elektrona

U ovom poglavlju izvest ćemo diferencijalni udarni presjek fotona na atomu vodika (procija) u aproksimaciji ravnog vala, diferenciran po energiji izlaznog elektrona. Prvo opišimo kinematiku procesa u kojoj koristimo iduće oznake:

ω_i - energija ulaznog fotona,

ω_f - energija raspršenog fotona,

E_B - energija vezanja atoma vodika,

E_1 - energija raspršenog elektrona,

E_2 - energija iona (protona),

\vec{k}_i - impuls ulaznog fotona,

\vec{k}_f - impuls raspršenog fotona,

\vec{p}_1 - impuls elektrona,

\vec{p}_2 - impuls iona (protona).

Također, vrijede zakon očuvanja energije i zakon očuvanja impulsa,

$$\omega_i + E_B = \omega_f + \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} \approx \omega_f + \frac{p_1^2}{2m}, \quad \vec{k}_i = \vec{k}_f + \vec{p}_1 + \vec{p}_2. \quad (4.54)$$

Označimo li masu elektrona s m_e i masu protona s $m_p \gg m_e$, vrijedi da je relativni impuls jednak

$$\vec{p}' = \frac{m_p}{m_e + m_p} \vec{p}_1 - \frac{m_e}{m_e + m_p} \vec{p}_2 \approx \vec{p}_1. \quad (4.55)$$

Vjerojatnost prijelaza dana je s

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = 2\pi \frac{e^4}{4\omega_i \omega_f} \sum_{\epsilon_i, \epsilon_f} (\epsilon_i \cdot \epsilon_f)^2 |\mathcal{M}|^2 \frac{d^3 k_f}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p_2}{(2\pi)^3} \delta\left(\omega_i + E_B - \omega_f - \frac{p_1^2}{2m}\right) \delta^3\left(\vec{k}_i - \vec{k}_f - \vec{p}_1 - \vec{p}_2\right), \quad (4.56)$$

gdje je matrični element dan s (4.8).

Diferencijalni udarni presjek jednak je

$$d^3\sigma = \frac{(2\pi)^3}{\omega_i\omega_f} m^2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T |\mathcal{M}|^2 \frac{d^3k_f}{(2\pi)^3} \frac{d^3p_1}{(2\pi)^3} \frac{d^3p_2}{(2\pi)^3} \delta \left(\omega_i + E_B - \omega_f - \frac{p_1^2}{2m} \right) \delta^3 \left(\vec{k}_i - \vec{k}_f - \vec{p}_1 - \vec{p}_2 \right). \quad (4.57)$$

Prvo integriramo po impulsu protona

$$d^3\sigma = \frac{m^2}{\omega_i\omega_f} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T |\mathcal{M}|^2 \delta \left(\omega_i + E_B - \omega_f - \frac{p_1^2}{2m} \right) \frac{d^3k_f}{(2\pi)^3} \frac{d^3p_1}{(2\pi)^3}. \quad (4.58)$$

Zatim koristimo činjenicu da je $d^3p_1 = m p_1 dE_1 d\Omega_e$ i $d^3k_f = \omega_f^2 d\omega_f d\Omega_f$ i integriramo po energijama izlaznog fotona. Konačni trostruko diferencirani udarni presjek je

$$\begin{aligned} \frac{d^3\sigma}{dE_1 d\Omega_e d\Omega_f} &= \frac{m^2}{(2\pi)^6} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T |\mathcal{M}|^2 p_1 \left(1 - \frac{p_1^2}{2m\omega_i} + \frac{E_B}{\omega_i} \right) \\ &= \left(\frac{m}{\pi^3} \right)^2 \frac{\xi^5}{(q^2 + \xi^2)^4} \left(1 - \frac{p_1^2}{2m\omega_i} + \frac{E_B}{\omega_i} \right) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T. \end{aligned} \quad (4.59)$$

Pritom je kut između vektora \vec{k}_i i \vec{k}_f označen s θ (kut raspršenog fotona), kut između vektora \vec{k}_i i \vec{p}_1 s φ_e (kut raspršenog elektrona), a kut između \vec{k} i \vec{p}_1 s χ . Pritom vrijedi da je

$$\cos\chi = \frac{\cos\varphi_e(1 - t\cos\theta) - t\sin\varphi_e\sin\theta\cos\Phi}{\sqrt{1 - 2t\cos\theta + t^2}}, \quad (4.60)$$

gdje je $t = \omega_f/\omega_i = 1 - (E_1 + E_B)/\omega_i$. Kut između ravnina u kojima leže vektori (\vec{k}_i, \vec{k}_f) i (\vec{k}_i, \vec{p}_1) je Φ . Sada integriranjem po prostornom kutu raspršenog fotona i elektrona možemo dobiti diferencijalni udarni presjek

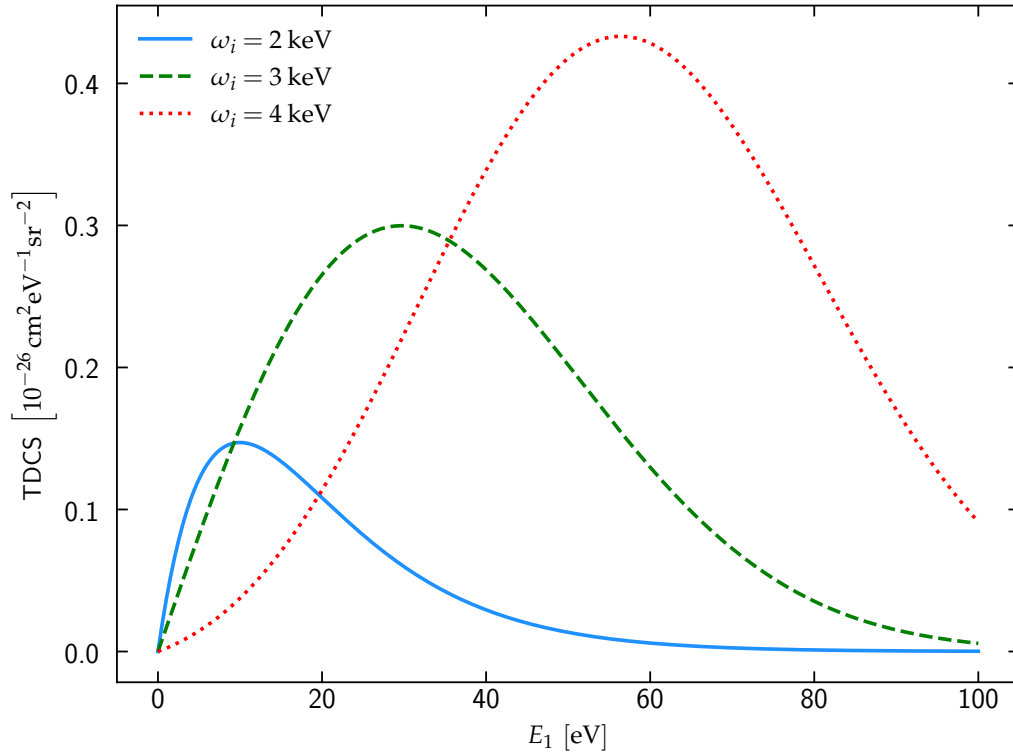
$$\frac{d\sigma}{dE_1} = 2\pi \int_0^{2\pi} d\Phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^\pi \sin\varphi_e d\varphi_e \left(\frac{d^3\sigma}{dE_1 d\Omega_e d\Omega_f} \right). \quad (4.61)$$

Daljnjim integriranjem po energijama izlaznog elektrona dobivamo potpuni udarni presjek

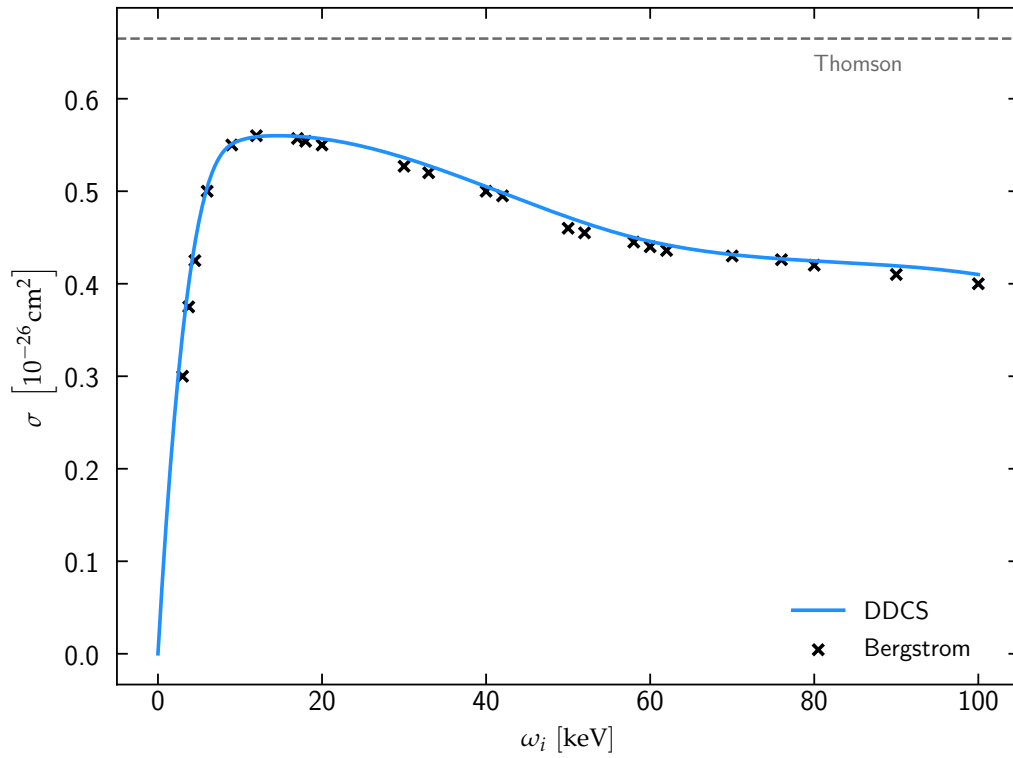
$$\sigma = \int_0^{E_{\text{maks}}} \frac{d\sigma}{dE_1}, \quad (4.62)$$

gdje je maksimalna energija raspršenog elektrona dana s $E_{\text{maks}} = \omega_i - |E_B|$.

Na slici (4.2) prikazan je trostruko diferencirani udarni presjek za tri različite energije fotona, te vidimo kako presjek raste s povećanjem energije upadnog fotona, a maksimum se pomiče prema većim energijama elektrona. Na slici (4.3) prikazan je potpuni udarni presjek u ovisnosti o energiji fotona te uspoređen s rezultatima preuzetima iz [14].



Slika 4.2: Ovisnost trostruko diferenciranog udarnog presjeka o energijama raspršenog elektrona za tri vrijednosti upadne energije fotona ($\omega_i = 2 \text{ keV}$, $\omega_i = 3 \text{ keV}$ i $\omega_i = 4 \text{ keV}$). Odabrani kutevi raspršenja su $\theta = 180^\circ$ i $\varphi_e = 180^\circ$, a $\Phi = 0^\circ$.



Slika 4.3: Ovisnost potpunog udarnog presjeka o energijama upadnog fotona. Punom linijom je rezultat dobiven jednadžbom (4.62), a križićima su označeni rezultati preuzeti iz [14]. Isprekidanom linijom prikazan je Thomsonov udarni presjek $\sigma_T = 0.665 \text{ barn}$.

4.5 Primjena A^2 aproksimacije s Coulombovim valom

Za konačno stanje elektrona $|\Psi_f\rangle$ možemo umjesto ravnog vala koristiti Coulombovu valnu funkciju oblika

$$\Psi(\vec{r}) = e^{\pi\zeta/2} \Gamma(1 + i\zeta) {}_1F_1(-i\zeta, 1, -i(\vec{p}' \cdot \vec{r} + p'r)) e^{i\vec{p}'\vec{r}}, \quad (4.1)$$

gdje je $\zeta = \xi/p'$, a korištene su gama funkcija Γ i konfluentna hipergeometrijska funkcija ${}_1F_1$. Gaussova funkcija će iščeznuti prilikom kvadriranja amplitude raspršenja koristeći svojstvo

$$\left| e^{\pi\zeta/2} \Gamma(1 + i\zeta) \right|^2 = \frac{2\pi\zeta}{1 - e^{-2\pi\zeta}}, \quad (4.2)$$

a konfluentna hipergeometrijska funkcija će se riješiti prilikom integriranja.

4.5.1 Raspršenje na K -ljusci

Za početno stanje elektrona $|\Psi_i\rangle$ koristimo (4.3), a za konačno stanje $|\Psi_f\rangle$ koristimo (4.1) te ih uvrštavamo u TDCS dan s (4.38). Matrični element je jednak

$$\langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle = X e^{\frac{\pi\zeta}{2}} \Gamma(1 + i\zeta) \underbrace{\int e^{i(\vec{k}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} e^{-\zeta r} {}_1F_1(-i\zeta, 1, -i(\vec{p}' \cdot \vec{r} + p'r)) d^3r}_I. \quad (4.3)$$

Integral I jednak je

$$I = 2\pi \left(\frac{A}{B} \right)^{i\zeta} \frac{1}{A^2} \left[\zeta(1 - i\zeta) + \zeta(p + i\zeta) \frac{A}{B} \right], \quad (4.4)$$

$$A \equiv \frac{1}{2} [(\vec{k} - \vec{p}')^2 + \zeta^2], \quad B \equiv \frac{k^2 - p'^2 + \zeta^2}{2} - i\zeta p'.$$

Kvadriranjem matričnog elementa (4.3) koristeći (4.2) i (4.4) dobivamo

$$\left| \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle \right|^2 = \frac{\zeta^3 \zeta}{1 - e^{-2\pi\zeta}} \frac{8\pi^2}{A^4} \left| \left(\frac{A}{B} \right)^{i\zeta} \right|^2 \left[\zeta(1 - i\zeta) + \zeta(p + i\zeta) \frac{A}{B} \right]^2. \quad (4.5)$$

Uvrštavanjem u (4.38) slijedi da je TDCS jednak

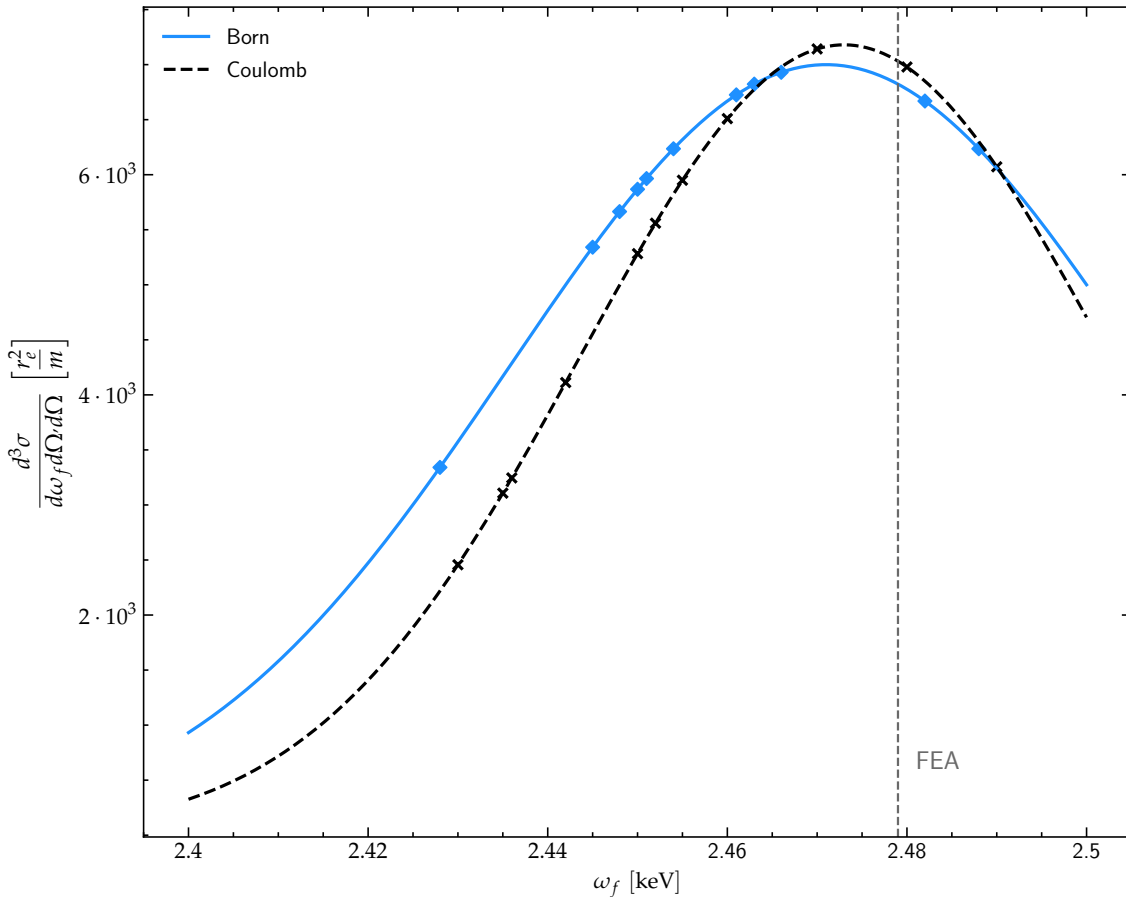
$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Coulomb}}^K = \frac{16\zeta^6 E'}{\pi} \frac{\omega_f}{\omega_i} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T \frac{e^{-2\pi\frac{\zeta}{p'} \arctan\left(\frac{2p'\zeta}{k^2 - p'^2 + \zeta^2}\right)}}{1 - e^{-2\pi\frac{\zeta}{p'}}} \cdot \frac{4k^2}{\left[(\vec{k} - \vec{p}')^2 + \zeta^2 \right]^4 \left[(\vec{k} + \vec{p}')^2 + \zeta^2 \right]}. \quad (4.6)$$

Integriramo (4.6) po prostornom kutu izlaznog elektrona $d\Omega'$

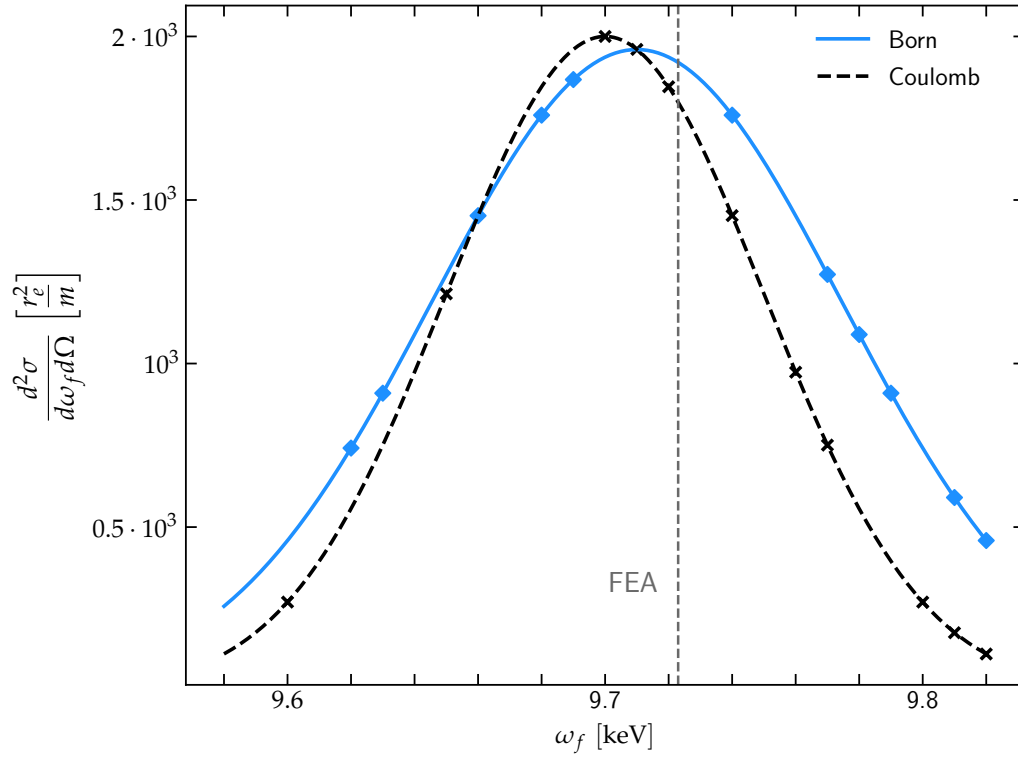
$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_f d\Omega} \right)_{\text{Coulomb}}^{\text{K}} &= \int \left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Coulomb}}^{\text{K}} d\Omega' \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega d\Omega'} \right)_{\text{Coulomb}}^{\text{K}} \sin\vartheta d\vartheta d\phi. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Nakon integriranja dobivamo DDCS za K elektron u aproksimaciji s Coulombovim valom

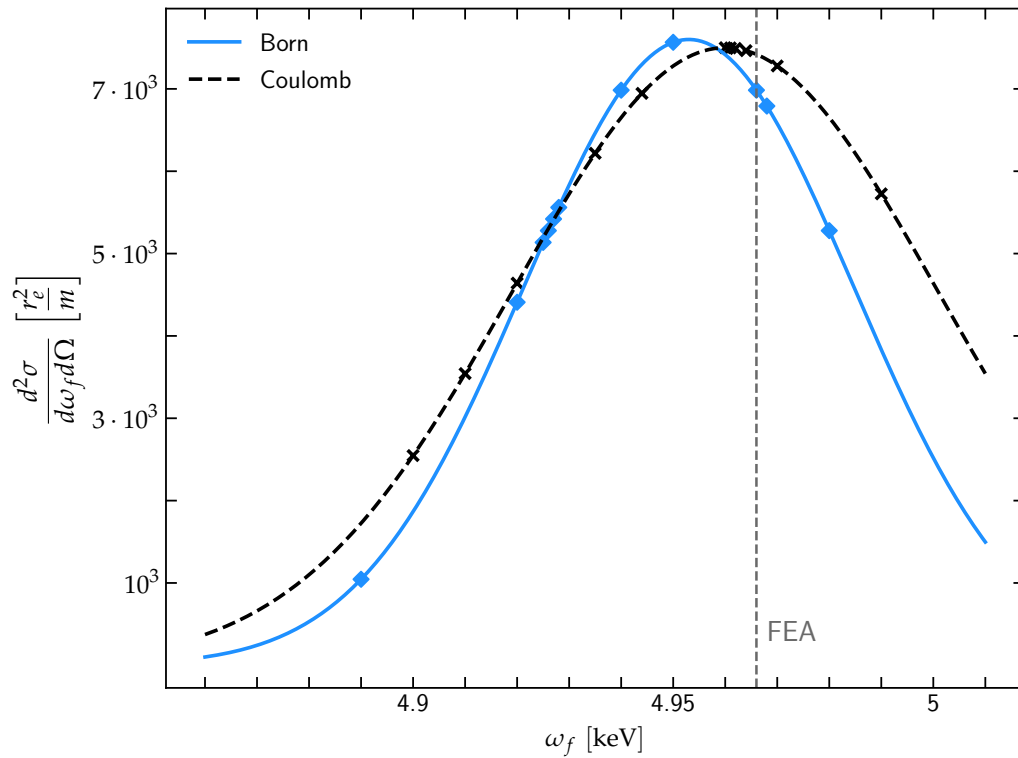
$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_f d\Omega} \right)_{\text{Coulomb}}^{\text{K}} &= \frac{256 \zeta^6 E' \omega_f}{3 \omega_i} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{T}} \frac{e^{-2\pi \frac{\zeta}{p'} \arctan\left(\frac{2p'\zeta}{k^2 - p'^2 + \zeta^2}\right)}}{1 - e^{-2\pi \frac{\zeta}{p'}}} \\ &\cdot \frac{k^2 \left[3k^6 + (\zeta^2 + p'^2)^3 + k^4 (7\zeta^2 + 27p'^2) + k^2 (\zeta^2 + p'^2) (5\zeta^2 + 33p'^2) \right]}{\left[k^4 + 2k^2 (\zeta^2 - p'^2) + (\zeta^2 + p'^2)^2 \right]^4}. \end{aligned} \quad (4.8)$$



Slika 4.1: Usporedba TDCS za raspršenje fotona na K elektronu atoma vodika u Bornovoj aproksimaciji ravnog vala i u aproksimaciji Coulombovog vala. Vertikalnom isprekidanom linijom prikazana je energija raspršenog fotona u slučaju slobodnog elektrona. Energija upadnog fotona je $\omega_i = 2.5 \text{ keV}$, kut raspršenja fotona je $\theta = 130^\circ$, a kut raspršenja elektrona je $\vartheta = 50^\circ$. Azimutalni kut je $\phi = 180^\circ$.



(a) $\omega_i = 10 \text{ keV}$, $\theta = 130^\circ$, $\vartheta = 50^\circ$.



(b) $\omega_i = 5 \text{ keV}$, $\theta = 130^\circ$, $\vartheta = 50^\circ$.

Slika 4.2: Usporedba DDCS u Bornovoj aproksimaciji i aproksimaciji s Coulombovim valom za raspršenje fotona energije (a) 10 keV i (b) 5 keV na K elektronu vodikovog atoma. Vertikalnom isprekidanom linijom prikazana je energija raspršenog fotona u slučaju slobodnog elektrona. Kut raspršenja fotona u oba slučaja je $\theta = 130^\circ$, a kut raspršenja elektrona je $\vartheta = 50^\circ$. Azimutalni kut je $\phi = 180^\circ$.

4.5.2 Raspršenje na L i M ljuskama

$L1$ -ljuska

Za $L1$ elektron koristimo početno stanje $|\Psi_i\rangle$ dano s (4.15), a za konačno stanje $|\Psi_f\rangle$ koristimo (4.1). Uvrštavanjem u matrični element dan u (4.38) dobivamo

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= C_1 \left\{ A_1^{-3+i\zeta} B_1^{-2-i\zeta} \left[A_1^2 \zeta \left(2B_1 (i\zeta + p') - (\zeta - i) \zeta \left(p' + \frac{i\zeta}{2} \right)^2 \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + A_1 B_1 (1 - i\zeta) \left(2B_1 \zeta - \zeta \zeta^2 \left(p' + \frac{i\zeta}{2} \right) \right) + \frac{B_1^2 \zeta^3}{4} (\zeta^2 + 3i\zeta - 2) \right] \right\} \quad (4.9) \\ C_1 &\equiv \frac{X \pi e^{\frac{\pi\zeta}{2}} \Gamma(1 + i\zeta)}{2\sqrt{2}}, \quad A_1 \equiv \frac{(\vec{k} - \vec{p}')^2 + \frac{\zeta^2}{4}}{2}, \quad B_1 \equiv \frac{k^2 - p'^2 + \frac{\zeta^2}{4} - i\zeta p'}{2}. \end{aligned}$$

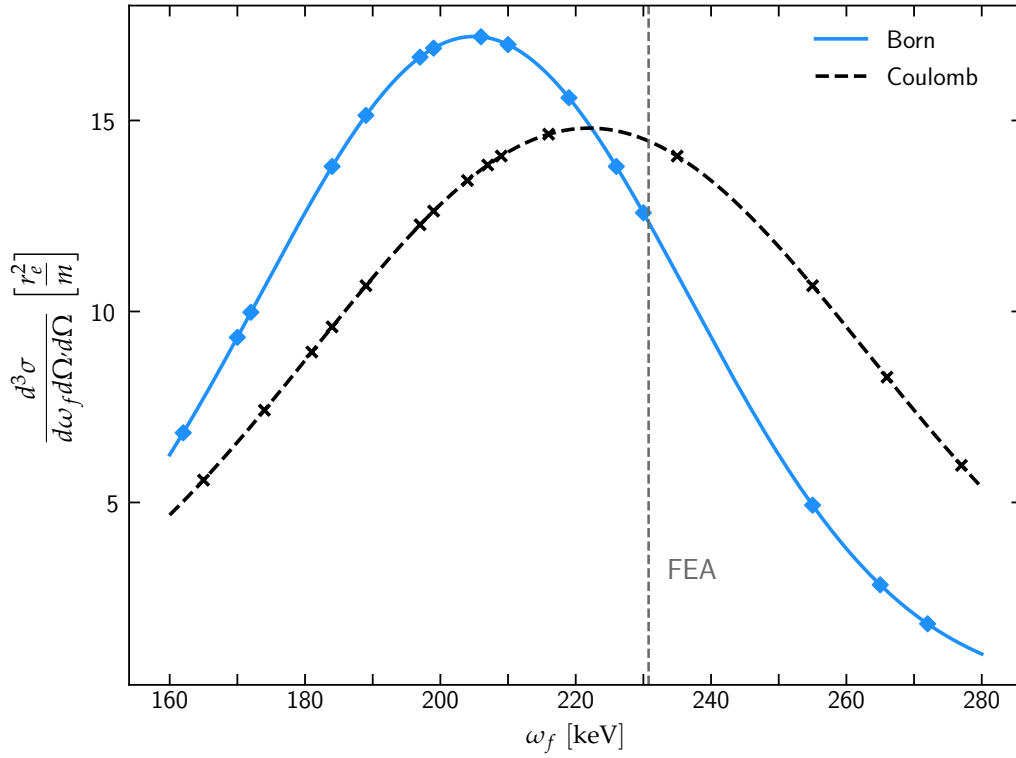
Kvadriranjem amplitude (4.9) i uvrštavanjem u (4.38) dobiva se TDCS za raspršenje fotona na $L1$ elektronu. Integriranjem po kutu raspršenja elektrona može se dobiti DDCS, a daljnjim integriranjem po energijama raspršenog fotona može se dobiti i kutu raspršenja fotona može se dobiti udarni presjek.

$M1$ -ljuska

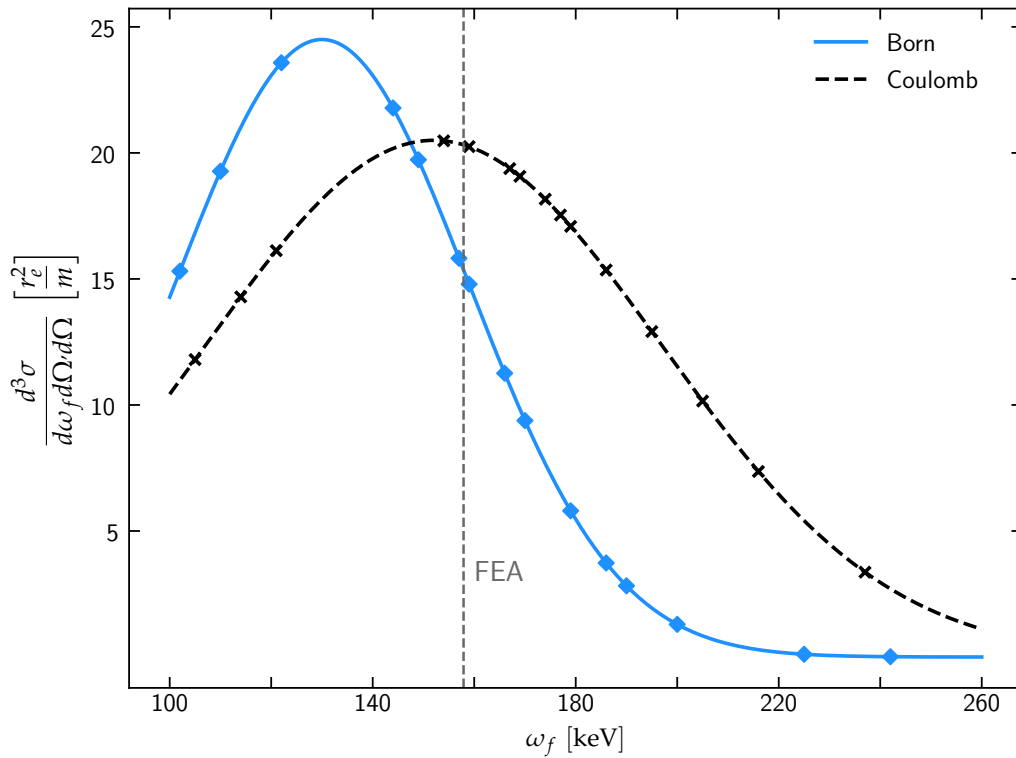
Za $M1$ elektron koristimo početno stanje $|\Psi_i\rangle$ dano s (4.36), a za konačno stanje $|\Psi_f\rangle$ koristimo (4.1). Uvrštavanjem u matrični element dan u (4.38) dobivamo

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= C_2 \left\{ A_2^3 \zeta \left[-6B_2 \zeta (\zeta - i) \left(p' + \frac{i\zeta}{3} \right) (3p' + 2i\zeta) + 27B_2^2 (i\zeta + p') \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 2\zeta^2 (\zeta^2 - 3i\zeta - 2) \left(p' + \frac{i\zeta}{3} \right)^3 \right] \right. \\ &\quad \left. - 2A_2 B_2^2 \zeta^2 (\zeta^2 + 3i\zeta - 2) \left[-2B_2 \zeta + \frac{\zeta \zeta}{3} \left(p' + \frac{i\zeta}{3} \right) \right] \right. \\ &\quad \left. + 3A_1^2 B_1 \left[9B_2^2 \zeta - 2B_2 \zeta \zeta \left(3p' \zeta + \frac{4i\zeta^2}{3} \right) + 2\zeta (\zeta - i) \frac{\zeta^2}{3} \left(p' + \frac{i\zeta}{3} \right)^2 \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{2B_2^3 \zeta^5}{27} (i\zeta^3 - 6\zeta^2 - 11i\zeta + 6) \right\} \\ C_2 &\equiv \frac{2X \pi e^{\frac{\pi\zeta}{2}} \Gamma(1 + i\zeta)}{81\sqrt{3}}, \quad A_2 \equiv \frac{(\vec{k} - \vec{p}')^2 + \frac{\zeta^2}{4}}{9}, \quad B_2 \equiv \frac{k^2 - p'^2 + \frac{\zeta^2}{9} - i\zeta p'}{2}. \quad (4.10) \end{aligned}$$

Kvadriranjem amplitude (4.10) i uvrštavanjem u (4.38) dobiva se TDCS za raspršenje fotona na $M1$ elektronu. Također, integriranjem po kutu raspršenja elektrona može se dobiti DDCS.

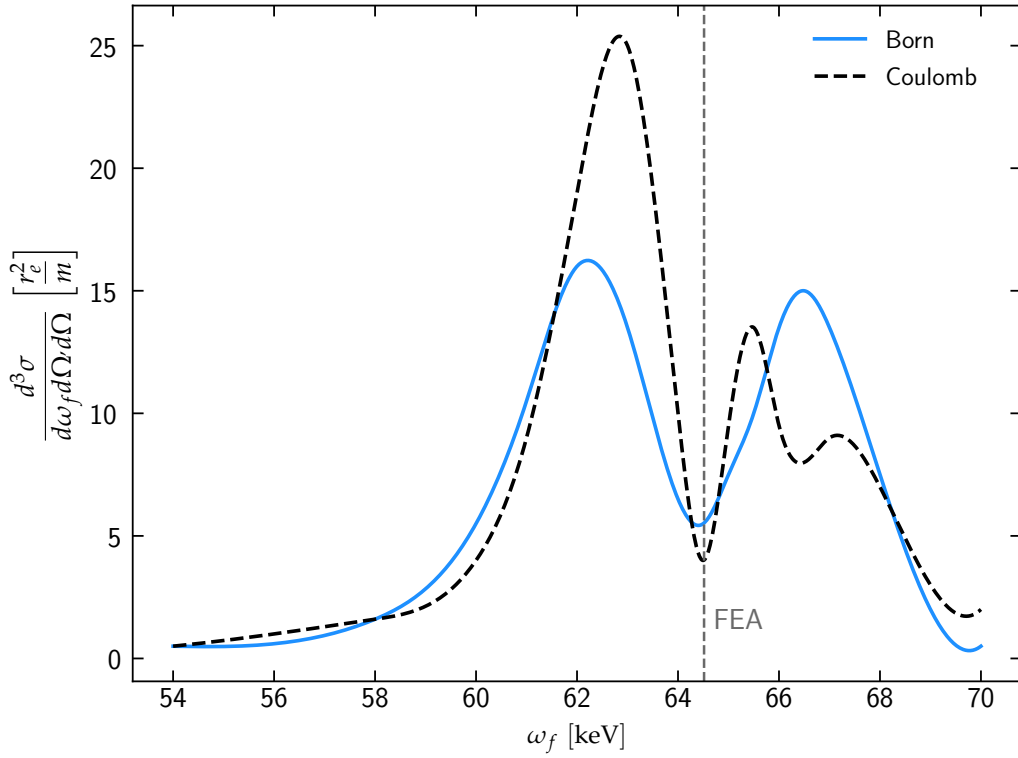


(a) $\omega_i = 300 \text{ keV}$, $\theta = 50^\circ$, $\vartheta = 40^\circ$.

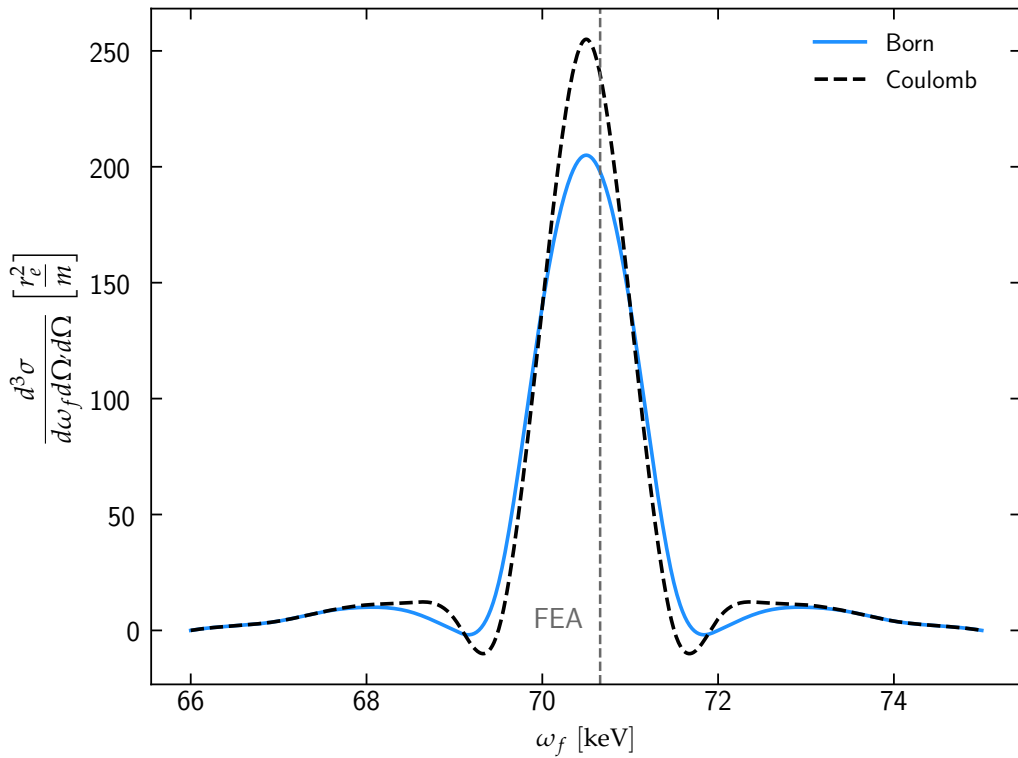


(b) $\omega_i = 300 \text{ keV}$, $\theta = 100^\circ$, $\vartheta = 20^\circ$.

Slika 4.3: Usporedba TDCS u Bornovoj aproksimaciji i aproksimaciji s Coulombovim valom za raspršenje fotona energije 300 keV na L1 elektronu atoma olova ($Z = 82$). Vertikalnom isprekidanom linijom prikazana je energija raspršenog fotona u slučaju slobodnog elektrona. Kutovi raspršenja fotona i elektrona su slijedom (a) $\theta = 50^\circ$ i $\vartheta = 40^\circ$, (b) $\theta = 100^\circ$ i $\vartheta = 20^\circ$, a azimutalni kut je $\phi = 180^\circ$.



(a) $\omega_i = 80 \text{ keV}$, $\theta = 120^\circ$, $\vartheta = 40^\circ$.



(b) $\omega_i = 80 \text{ keV}$, $\theta = 80^\circ$, $\vartheta = 20^\circ$.

Slika 4.4: Usporedba TDCS u Bornovoj aproksimaciji i aproksimaciji s Coulombovim valom za raspršenje fotona energije 80 keV na $M1$ elektronu atoma ugljika ($Z = 6$). Vertikalnom isprekidanom linijom prikazana je energija raspršenog fotona u slučaju slobodnog elektrona. Kutovi raspršenja fotona i elektrona su slijedom (a) $\theta = 120^\circ$ i $\vartheta = 40^\circ$, (b) $\theta = 80^\circ$ i $\vartheta = 20^\circ$, a azimutalni kut je $\phi = 180^\circ$.

5 Comptonovo raspršenje na pozitroniju

Pozitronij (Ps) je vezano stanje elektrona (e^-) i pozitrona (e^+) te predstavlja najjednostavniji egzotični atom¹¹. Po strukturi sličan je prociju¹², samo što je proton u jezgri zamijenjen pozitronom. Pozitronij je nestabilan jer se elektron i pozitron anihiliraju stvarajući dvije ili više gama zraka,

$$e^- + e^+ \longrightarrow 2\gamma. \quad (5.1)$$

Elektron i pozitron imaju jednaku masu ($m_e = m_{e^+} = 0.511 \text{ MeV}$), a to čini masu pozitronija približno 1.022 MeV . U slučaju raspada na dva fotona, oba imaju istu energiju, a za više fotona se ta energija raspodjeljuje. Energija njihovog vezanja je samo nekoliko eV, a energijski nivoi pozitronija slični su onima u vodikovom atomu, samo su na dvostruko manjim energijama.

Energijski nivoi za n -tu orbitalu vezanog sustava dani su Bohrovom [52] formulom

$$E_n^{\text{H}} = -\frac{e^4 \mu}{32\pi^2 \hbar^2 \varepsilon_0^2} \frac{1}{n^2}, \quad (5.2)$$

gdje je μ reducirana masa vezanog sustava. Budući da je masa protona mnogo veća od mase elektrona, za vodik vrijedi ($m_p \gg m_e$), vrijedi

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e. \quad (5.3)$$

Uz (5.3) i definiciju konstante fine strukture $\alpha = e^2 / (4\pi\hbar c)$ energijske razine vodika mogu se prikazati u obliku

$$E_n^{\text{H}} = -\frac{\alpha^2 m_e}{2n^2} \approx -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}. \quad (5.4)$$

Zbog jednake mase elektrona i pozitrona, reducirana masa u pozitroniju jednaka je

$$\mu = -\frac{m_e m_{e^+}}{m_e + m_{e^+}} = \frac{m_e}{2}. \quad (5.5)$$

Prema (5.2) i (5.5) energijski nivoi u pozitroniju dani su s

$$E_n^{\text{Ps}} = -\frac{\alpha^2 m_e}{4n^2} \approx -\frac{6.8 \text{ eV}}{n^2}. \quad (5.6)$$

Iz (5.4) i (5.6) proizlazi veza energija za n -tu orbitalu

$$E_n^{\text{Ps}} = \frac{1}{2} E_n^{\text{H}}. \quad (5.7)$$

¹¹Onijum je vezano stanje čestice i antičestice, a to čini pozitronij klasičnim onijumom.

¹²Procij je najlakši izotop vodika. Jezgra procija sastoji se od jednog protona.

Bohrov polumjer predstavlja udaljenosti između jezgre i elektrona u osnovnom stanju atoma vodika. Kao i energija, također je kvantiziran, a za osnovnu orbitalu vodikovog atoma iznosi

$$a_0 = \frac{1}{m_e \alpha}. \quad (5.8)$$

Budući da Bohrova definicija polumjera orbitale ne uključuje učinak reducirane mase, on nije točno jednak pravom orbitalnom polumjeru elektrona u modelima. Reducirana masa vodika (elektron-protoron sustav) je nešto manja od mase elektrona pa je stvarni orbitalni polumjer nešto veći od Bohrovog polumjera. Prikladniji oblik Bohrovog polumjera bio bi onaj gdje je reducirana masa μ uključena,

$$a = \frac{m_e}{\mu} a_0. \quad (5.9)$$

Također, za atome rednog broja $Z > 1$ treba nadodati i ispravku

$$a = \frac{m_e}{\mu} \frac{a_0}{Z}. \quad (5.10)$$

Taj zaključak može se generalizirati na druge kompozitne sustave koji uključuju kruženje elektrona, kao što je i pozitronij. Reducirana masa u pozitroniju jednaka je (5.5), stoga će polumjer orbitale biti

$$a_P = \frac{m_e}{\mu} a_0 = 2a_0. \quad (5.11)$$

Osnovno stanje pozitronija dobit ćemo prilagođavajući (4.2) scenariju u kojem je $Z = 1$ uz (5.11). Za sferni harmonik i radijalnu funkciju slijedi

$$R_{1,0}(r) = 2 \left(\frac{2}{a_P} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_P}}, \quad Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}}, \quad (5.12)$$

Osnovno stanje dano je s

$$\begin{aligned} |\Psi_i\rangle &= \Psi_{1,0,0}(\vec{r}) = R_{1,0}(r) Y_0^0(\theta, \phi) \\ &= \sqrt{\frac{8}{a_P^3 \pi}} e^{-\frac{r}{a_P}}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Definirajući konstante $\xi = 2/a_P$ i $N = \sqrt{\xi^3/\pi}$ dobivamo

$$|\Psi_i\rangle = N e^{-\frac{1}{2}\xi r}. \quad (5.14)$$

5.1 Diferencijalni udarni presjek po energiji fotona

Pri računanju diferencijalnog udarnog presjeka koristit ćemo iduće oznake:

ω_i - energija ulaznog fotona,

ω_f - energija raspršenog fotona,

E_B - energija vezanja pozitronija,

E_1 - energija elektrona,

E_2 - energija pozitrona,

\vec{k}_i - impuls ulaznog fotona,

\vec{k}_f - impuls raspršenog fotona,

\vec{p}_1 - impuls elektrona,

\vec{p}_2 - impuls pozitrona.

Vrijede zakon očuvanja energije i zakon očuvanja impulsa,

$$\begin{aligned}\omega + E_B &= \frac{p_1^2}{2m_e} + \frac{p_2^2}{2m_{e^+}}, \\ \vec{k} &= \vec{p}_1 + \vec{p}_2,\end{aligned}\tag{5.15}$$

gdje za mase elektrona i pozitrona vrijedi $m = m_e = m_{e^+}$. Prijenos impulsa je $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$, a razlika energija upadnog i raspršenog fotona je $\omega = \omega_i - \omega_f$.

Relativni impuls jednak je

$$\begin{aligned}\vec{p}' &= \frac{m_{e^+}}{m_e + m_{e^+}} \vec{p}_1 - \frac{m_e}{m_e + m_{e^+}} \vec{p}_2 \\ &= \frac{1}{2} \vec{p}_1 - \frac{1}{2} \vec{p}_2.\end{aligned}\tag{5.16}$$

Vjerojatnost prijelaza iz početnog u konačno stanje u A^2 aproksimaciji dana je s

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = 2\pi \sum_{\vec{\epsilon}_i \vec{\epsilon}_f} b^2 \sum_{e^+ e^-} \left| \langle \Psi_f | \langle F | \left(\frac{1}{m_e} e^{i\vec{k}_+ \cdot \vec{r}} + \frac{1}{m_{e^+}} e^{-i\vec{k}_- \cdot \vec{r}} \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} | I \rangle | \Psi_i \rangle \right|^2 \frac{d\vec{k}_f}{(2\pi)^3} V \frac{d\vec{P}_F}{(2\pi)^3} \delta(E_u),\tag{5.17}$$

gdje je

$$b = \frac{e^2 \vec{\epsilon}_i \vec{\epsilon}_f}{2\sqrt{\omega_i \omega_f}}, \quad \kappa_{\pm} = \frac{m_{e^{\pm}}}{m_e + m_{e^+}} \vec{k} = \frac{1}{2} \vec{k}.\tag{5.18}$$

Suma $\sum_{\vec{\epsilon}_i \vec{\epsilon}_f}$ je po polarizacijama fotona. Prema zakonu očuvanja impulsa vrijedi $-\vec{P}_F + \vec{k} + \vec{P}_I = 0$. Iz (5.17) slijedi

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = 2\pi \sum_{\vec{\epsilon}_i \vec{\epsilon}_f} b^2 \sum_{e^+ e^-} \left| \left\langle \Psi_f \left| \left(\frac{1}{m_e} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{1}{m_{e^+}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right) \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2 \frac{d\vec{k}_f}{(2\pi)^3} \cdot \int \left| \left\langle F \left| e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \right| I \right\rangle \right|^2 V \frac{d\vec{P}_F}{(2\pi)^3} \delta(E_u). \quad (5.19)$$

Za integral iz (5.19) vrijedi

$$\begin{aligned} \int \left| \left\langle F \left| e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \right| I \right\rangle \right|^2 V \frac{d\vec{P}_F}{(2\pi)^3} &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{P}_F \left| \frac{1}{V} \int e^{-i(\vec{P}_F \cdot \vec{R} + \vec{k} \cdot \vec{R} + \vec{P}_I \cdot \vec{R})} d\vec{R} \right|^2 \\ &= \int d\vec{P}_F \delta(-\vec{P}_F + \vec{k} + \vec{P}_I) = 1. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Za vjerojatnost prijelaza dobivamo

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = 2\pi \sum_{\vec{\epsilon}_i \vec{\epsilon}_f} b^2 \sum_{e^+ e^-} \left| \left\langle \Psi_f \left| \left(\frac{1}{m_e} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{1}{m_{e^+}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right) \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2 \frac{d\vec{k}_f}{(2\pi)^3} \delta(E_u). \quad (5.21)$$

Koristimo $d\vec{k}_f = d^3 k_f = \omega_f^2 d\omega_f d\Omega_f$ i dobivamo

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{\omega_f^2}{4\pi^2} \sum_{\vec{\epsilon}_i \vec{\epsilon}_f} b^2 \sum_{e^+ e^-} \left| \left\langle \Psi_f \left| \left(\frac{1}{m_e} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{1}{m_{e^+}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right) \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2 d\omega_f d\Omega_f \delta(E_u). \quad (5.22)$$

Veza vjerojatnosti prijelaza i diferencijalnog udarnog presjeka je

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = d\sigma J_{\text{inc}}, \quad (5.23)$$

gdje je J_{inc} upadni tok čestica. Koristeći $J_{\text{inc}} = 2$ za diferencijalni udarni presjek dobivamo

$$d\sigma = \frac{1}{2} \Gamma_{i \rightarrow f}. \quad (5.24)$$

Uvrstimo li (5.24) u (5.22) dobivamo

$$d\sigma = \frac{\omega_f^2}{8\pi^2} \sum_{\vec{\epsilon}_i \vec{\epsilon}_f} b^2 \sum_{e^+ e^-} \left| \left\langle \Psi_f \left| \left(\frac{1}{m_e} e^{i\frac{1}{2}\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{1}{m_{e^+}} e^{-i\frac{1}{2}\vec{k} \cdot \vec{r}} \right) \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2 d\omega_f d\Omega_f \delta(E_u). \quad (5.25)$$

Podsjetimo da je Thomsonov diferencijalni udarni presjek dan s

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_T = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi m}\right)^2 \sum_{\vec{\epsilon}_i \vec{\epsilon}_f} (\vec{\epsilon}_i \cdot \vec{\epsilon}_f)^2. \quad (5.26)$$

Zatim uz

$$\sum_{\vec{\epsilon}_i \vec{\epsilon}_f} b^2 = \frac{8\pi^2 m^2}{\omega_i \omega_f} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_T, \quad \sum_{e^+ e^-} \rightarrow \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3}, \quad d^3 p' = p'^2 dp' d\Omega', \quad (5.27)$$

dobivamo

$$d\sigma = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\omega_f}{\omega_i} m^2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_T \int \left| \left\langle \Psi_f \left| \left(\frac{1}{m_e} e^{i\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{1}{m_{e^+}} e^{-i\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{r}} \right) \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2 p'^2 d\omega_f d\Omega_f dp' d\Omega' \delta(E_u), \quad (5.28)$$

gdje je $\vec{p}' \equiv (p', \Omega')$ relativni impuls izlazne čestice, a Ω' prostorni kut izlazne čestice.

Integriramo po energiji izlazne čestice i koristimo zakon očuvanja energije $\omega_i = \omega_f - E_B + E_{CM} + p'^2/2\mu$ te dobivamo trostruki diferencijalni udarni presjek

$$\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega_f d\Omega'} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\omega_f}{\omega_i} m^2 p' E' \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_T \left| \left\langle \Psi_f \left| \left(\frac{1}{m_e} e^{i\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{1}{m_{e^+}} e^{-i\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{r}} \right) \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2, \quad (5.29)$$

gdje je u nerelativističkom režimu $E' \approx \mu$, a $p' = m\sqrt{\omega_i - \omega_f - |E_B| - \vec{k}^2/4m}$.

5.1.1 Bornova aproksimacija

Početno stanje Ψ_i predstavlja funkcija vezanog stanja (pozitronij), a konačno u konačnom stanju Ψ_f koristit ćemo ravni val (5.14) za elektron i pozitron. Amplituda dana u jednadžbi (5.29) raspisana pomoću ravnog vala će u slučaju raspršenja na pozitroniju poprimiti idući oblik:

$$\begin{aligned} & \left\langle \Psi_f \left| \frac{1}{m_e} e^{i\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{1}{m_{e^+}} e^{-i\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{r}} \right| \Psi_i \right\rangle \\ &= \frac{N}{m_e} \int e^{i\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}} e^{-\frac{1}{2}\zeta r} d^3 r + \frac{N}{m_{e^+}} \int e^{-i\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}} e^{-\frac{1}{2}\zeta r} d^3 r \\ &= \frac{N}{m_e} \int e^{i(\frac{1}{2}\vec{k} - \vec{p}')\cdot\vec{r}} e^{-\frac{1}{2}\zeta r} d^3 r + \frac{N}{m_{e^+}} \int e^{-i(\frac{1}{2}\vec{k} + \vec{p}')\cdot\vec{r}} e^{-\frac{1}{2}\zeta r} d^3 r. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Definiramo vektore $\vec{q}_+ = \frac{1}{2}\vec{k} + \vec{p}'$ i $\vec{q}_- = \frac{1}{2}\vec{k} - \vec{p}'$, za koje vrijedi $\vec{q}_\pm \cdot \vec{r} = q_\pm r \cos \vartheta$ kako vidimo na slici 5.1, te koristimo činjenicu $m_e = m_{e^+} = m$ pa integrali iz (5.30) postaju

$$\frac{N}{m} \left[\int e^{iq_- r \cos \vartheta} e^{-\frac{1}{2}\zeta r} d^3r + \int e^{-iq_+ r \cos \vartheta} e^{-\frac{1}{2}\zeta r} d^3r \right]. \quad (5.31)$$

Prelazimo na sferne koordinate u kojima gornji integrali postaju

$$\begin{aligned} \mathcal{M} &= \left\langle \Psi_f \left| \frac{1}{m_e} e^{i\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{1}{m_{e^+}} e^{-i\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{r}} \right| \Psi_i \right\rangle \\ &= \frac{N}{m} \left[\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{-\frac{1}{2}\zeta r} \left[e^{iq_- r \cos \vartheta} + e^{-iq_+ r \cos \vartheta} \right] r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\phi dr \right] \\ &= 2\pi \frac{N}{m} \left[\int_0^\infty r^2 e^{-\frac{1}{2}\zeta r} \int_0^\pi \left[e^{iq_- r \cos \vartheta} + e^{-iq_+ r \cos \vartheta} \right] \sin \vartheta d\vartheta dr \right] \\ &= 4\pi \frac{N}{q_+ q_- m} \int_0^\infty r e^{-\frac{1}{2}\zeta r} [q_- \sin(q_+ r) + q_+ \sin(q_- r)] dr \\ &= 64\pi \frac{N\zeta}{m} \left[\frac{1}{(\zeta^2 + 4q_+^2)^2} + \frac{1}{(\zeta^2 + 4q_-^2)^2} \right]. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Podsjetit ćemo se da je $q_\pm^2 = \vec{q}_\pm^2 = (\frac{1}{2}\vec{k} \pm \vec{p}')^2$ te $N = \sqrt{\zeta^3/\pi}$, pa za amplitudu raspršenja (5.32) dobivamo

$$\mathcal{M} = \frac{64\sqrt{\pi}\zeta^5}{m} \left(\frac{1}{\left[\zeta^2 + 4 \left(\frac{1}{2}\vec{k} + \vec{p}' \right)^2 \right]^2} + \frac{1}{\left[\zeta^2 + 4 \left(\frac{1}{2}\vec{k} - \vec{p}' \right)^2 \right]^2} \right). \quad (5.33)$$

Za potrebe računanja udarnog presjeka, amplitudu (5.33) treba kvadrirati. Pritom je, zbog preglednosti, zgodno definirati članove u zagradi kao

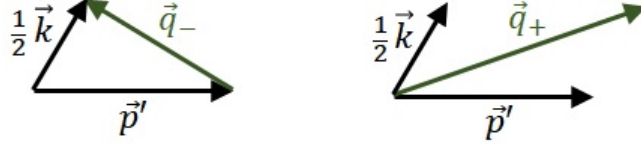
$$i_+ \equiv \frac{1}{\left[\zeta^2 + 4 \left(\frac{1}{2}\vec{k} + \vec{p}' \right)^2 \right]^2}, \quad i_- \equiv \frac{1}{\left[\zeta^2 + 4 \left(\frac{1}{2}\vec{k} - \vec{p}' \right)^2 \right]^2}. \quad (5.34)$$

Kvadriranjem amplitude (5.33) dobivamo

$$|\mathcal{M}|^2 = \frac{64\pi\zeta^5}{m^2} (i_+^2 + 2i_+i_- + i_-^2). \quad (5.35)$$

Trostruki diferencijalni udarni presjek dan je s (5.29) pa uz korištenje (5.35) dobivamo

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega_f d\Omega'} \right)_{\text{Born}}^{\text{Ps}} = \frac{8\zeta^5}{\pi^2} \frac{\omega_f}{\omega_i} p' E' (i_+^2 + 2i_+i_- + i_-^2) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T. \quad (5.36)$$



Slika 5.1: Vektori \vec{q}_+ i \vec{q}_- .

Integriranjem TDCS (5.36) po prostornom kutu $d\Omega' = 2\pi \sin\varphi d\varphi$ dobivamo DDCS za raspršenje fotona na pozitroniju

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_f d\Omega_f}\right)_{\text{Born}}^{\text{Ps}} &= 2\pi \int_0^\pi \left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega_f d\Omega'}\right)_{A^2}^{\text{Ps}} \sin\varphi d\varphi \\ &= \frac{16\zeta^5}{\pi} \frac{\omega_f}{\omega_i} p'E' \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_T \int_0^\pi (i_+^2 + 2i_+i_- + i_-^2) \sin\varphi d\varphi. \end{aligned} \quad (5.37)$$

Prema (5.34) integral u (5.37) možemo razdvojiti na tri integrala od kojih su integrali koji odgovaraju članovima i_+ i i_- jednaki

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \frac{\sin\varphi d\varphi}{\left[\zeta^2 + 4\left(\frac{1}{2}\vec{k} + \vec{p}'\right)^2\right]^4} &= \int_0^\pi \frac{\sin\varphi d\varphi}{\left[\zeta^2 + 4\left(\frac{1}{2}\vec{k} - \vec{p}'\right)^2\right]^4} \\ &= \frac{2}{3} \frac{3(4p'^2 + k^2 + \zeta^2)^2 + 16p'^2k^2}{[(4p'^2 + k^2 + \zeta^2)^2 - 16p'^2k^2]^3}, \end{aligned} \quad (5.38)$$

a integral koji odgovara srednjem članu $2i_+^2i_-^2$ je

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \frac{2 \sin\varphi d\varphi}{\left[\zeta^2 + 4\left(\frac{1}{2}\vec{k} + \vec{p}'\right)^2\right]^2 \left[\zeta^2 + 4\left(\frac{1}{2}\vec{k} - \vec{p}'\right)^2\right]^2} \\ &= \int_0^\pi \frac{2 \sin\varphi d\varphi}{[(4p'^2 + k^2 + \zeta^2)^2 - 16p'^2k^2 \cos^2\varphi]^2} \\ &= \frac{2}{(4p'^2 + k^2 + \zeta^2)^4 - 16p'^2k^2(4p'^2 + k^2 + \zeta^2)^2} + \frac{\ln\left|\frac{4p'^2 + k^2 + \zeta^2 + 4p'k}{4p'^2 + k^2 + \zeta^2 - 4p'k}\right|}{4p'k(4p'^2 + k^2 + \zeta^2)^3}. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Uvedemo li pokrate

$$\lambda = 4p'^2 + k^2 + \zeta^2, \quad s = 4p'k, \quad (5.40)$$

iz (5.37), (5.38) i (5.39) dobivamo

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_f d\Omega_f}\right)_{\text{Born}}^{\text{Ps}} &= \\ &= \frac{16\zeta^5}{\pi} \frac{\omega_f}{\omega_i} p'E' \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_T \left(\frac{2}{3} \frac{3\lambda^2 + s^2}{[\lambda^2 - s^2]^3} + \frac{2}{\lambda^4 - s^2\lambda^2} + \frac{\ln\left|\frac{\lambda+s}{\lambda-s}\right|}{s\lambda^3} \right). \end{aligned} \quad (5.41)$$

5.1.2 Coulombov val

U ovoj aproksimaciji za konačno stanje $|\Psi_f\rangle$ možemo koristiti Coulombovu valnu funkciju oblika

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{\pi\zeta/2} \Gamma(1 + i\zeta) {}_1F_1(-i\zeta, 1, -i(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r} + p'r)) e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}, \quad (5.42)$$

gdje je $\zeta = \zeta/p'$, a korištene su gama funkcija Γ i konfluentna hipergeometrijska funkcija ${}_1F_1$. Gaussova funkcija će iščeznuti prilikom kvadriranja amplitude raspršenja koristeći svojstvo

$$\left| e^{\pi\zeta/2} \Gamma(1 + i\zeta) \right|^2 = \frac{2\pi\zeta}{1 - e^{-2\pi\zeta}}. \quad (5.43)$$

Za početno stanje koristimo isto osnovno stanje kao i u prethodnom poglavlju (5.14). Amplituda raspršenja dana je s

$$\mathcal{M} = \left\langle \Psi_f \left| \frac{1}{m_e} e^{i\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{1}{m_{e^+}} e^{-i\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{r}} \right| \Psi_i \right\rangle \quad (5.44)$$

gdje su m_e i m_{e^+} masa elektrona i pozitrona, a $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ je prijenos impulsa. Vrijedi da je $m_e = m_{e^+} = m$. Za matični element nakon integriranja [35, 53] dobivamo

$$\mathcal{M}_{\pm} = \frac{1}{m} \sqrt{\frac{\zeta^5}{\pi}} e^{\frac{\pi\zeta}{2}} \Gamma(1 - i\zeta) \left(\frac{A_{\pm}}{B} \right)^{i\zeta} \left[\left(1 + \frac{A_{\pm}}{B} \right) - i\zeta \left(1 - \frac{A_{\pm}}{B} \right) \right], \quad (5.45)$$

gdje je

$$A_{\pm} \equiv \frac{1}{2} \left[\left(\pm \frac{\vec{k}}{2} - \vec{p}' \right)^2 + \zeta^2 \right], \quad B \equiv \frac{1}{4} (k^2 - 2p'^2 + 2\zeta^2) - i\zeta p', \quad \zeta \equiv \frac{\zeta}{p}. \quad (5.46)$$

Trostruki diferencijalni udarni presjek je dan s (5.29). Uvrštavanjem amplitude (5.45) i korištenjem jednadžbe (5.43) dobivamo

$$\begin{aligned} \frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega_f d\Omega'} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\omega_f}{\omega_i} m^2 p' E' \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T |\mathcal{M}_+ + \mathcal{M}_-|^2 \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\omega_f}{\omega_i} p' E' \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T \frac{\zeta^5}{\pi} \frac{2\pi\zeta}{1 - e^{-2\pi\zeta}} \left[|a_+|^2 + |a_-|^2 + 2\text{Re}(a_+ a_-^*) \right], \end{aligned} \quad (5.47)$$

gdje je

$$a_{\pm} = \frac{1}{A_{\pm} B} \left(\frac{A_{\pm}}{B} \right)^{i\zeta} [A_{\pm} + B - i\zeta(B - A_{\pm})]. \quad (5.48)$$

Kvadrati amplituda $|a_{\pm}|^2$ i $\text{Re}(a_+a_-^*)$ jednaki su

$$\begin{aligned} |a_{\pm}|^2 &= 16k^2 \frac{\frac{1}{2}k^2 \mp kp' \cos \gamma + (p'^2 + \zeta^2) \cos^2 \beta}{\left(\frac{1}{4}k^2 + p'^2 \mp kp' \cos \beta + \zeta^2\right)^4 \left[(p'^2 + \zeta^2 + \frac{1}{4}k^2)^2 - p'^2k^2\right]} e^{-2\zeta\psi}, \\ \text{Re}(a_+a_-^*) &= 16k^2 \frac{\left[\frac{1}{4}k^2 - ((1 + \zeta^2)^2 p'^2 \cos^2 \beta)\right] \cos \delta + \zeta p' k \cos \beta \sin \delta}{\left[\left(\frac{1}{2}k^2 + p'^2 + \zeta^2\right)^2 - kp' \cos^2 \beta\right]^2 \left[(p'^2 + \zeta^2 + \frac{1}{2}k^2)^2 - p'^2k^2\right]} e^{-2\zeta\psi}, \end{aligned} \quad (5.49)$$

gdje smo uveli iduće veličine

$$\begin{aligned} k &= |\vec{k}|, & p' &= m\sqrt{\omega_i - \omega_f - |E_B| - E_{CM}}, \\ \psi &= \arctan \frac{2\zeta p'}{\frac{1}{4}k^2 - p'^2 + \zeta^2}, & \cos \beta &= \frac{\frac{1}{2}\vec{k} \cdot \vec{p}'}{\frac{1}{2}p'}, & \delta &= \zeta \ln \frac{\frac{1}{4}k^2 + p'^2 + \zeta^2 - kp'}{\frac{1}{4}k^2 + p'^2 + \zeta^2 + kp'}. \end{aligned} \quad (5.50)$$

Uvedemo li sad često korištene varijable u i y definirane kao

$$u = \frac{m}{k\zeta} (\omega_i - \omega_f) - \frac{k}{2\zeta}, \quad y = \frac{2\zeta}{k}, \quad (5.51)$$

možemo definirati $|a_{\pm}|^2$ i $\text{Re}(a_+a_-^*)$ kao

$$\begin{aligned} |a_{\pm}|^2 &= e^{-2\psi\zeta} \frac{y^6}{\zeta^8} \frac{1 \mp 2\gamma t + (1 + 2uy)t^2}{(1 + u^2)(1 + uy \mp \gamma t)^4}, \\ \text{Re}(a_+a_-^*) &= e^{-2\psi\zeta} \frac{y^6}{\zeta^8} \frac{[1 - (1 + 2uy)t^2] \cos \chi + 2ytsin\chi}{(1 + u^2)[(1 + uy)^2 - \varphi^2 t^2]^2}, \end{aligned} \quad (5.52)$$

gdje smo definirali nove veličine

$$\zeta = \frac{y}{\gamma}, \quad \chi = \zeta \ln \frac{1 + uy - \gamma t}{1 + uy + \gamma t}, \quad \psi = \arccos \frac{y - u}{\sqrt{1 + u^2}}, \quad \gamma = \sqrt{1 + 2uy - y^2}, \quad t = \cos \beta. \quad (5.53)$$

Uvrštavanjem u (5.29) i integriranjem po izlaznom kutu elektrona dobivamo DDCS za raspršenje fotona na pozitroniju s Coulombovim valom oblika [51]

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_f d\Omega_f}\right)_{\text{Coulomb}}^{\text{Ps}} = \left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_f d\Omega_f}\right)_{\pm} + \mathbb{I}, \quad (5.54)$$

gdje je

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_f d\Omega_f}\right)_{\pm} = \frac{32}{3m^3 r_e^2} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{T}} \frac{\omega_f}{\omega_i} y^2 \frac{1 + \frac{uy}{2}}{(1 + u^2)^3} \cdot \frac{e^{-2\zeta\psi}}{1 - e^{-2\pi\zeta}}, \quad (5.55)$$

a \mathbb{I} je interferencijski član dan s

$$\mathbb{I} = \frac{1}{2\pi m} \frac{\omega_f}{\omega_i} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{T}} \frac{\zeta^6}{1 - e^{-2\pi\zeta}} \int 2\text{Re}(a_+a_-^*) d\Omega'. \quad (5.56)$$

5.2 Diferencijalni udarni presjek po energiji elektrona

U ovom poglavlju izvest ćemo dvostruki diferencijalni udarni presjek (DDCS) po energiji izlaznog elektrona, za razliku od prijašnjih udarnih presjeka diferenciranih po energiji raspršenog fotona. Kut između impulsa raspršenog i upadnog fotona je θ pa su impulsi upadnog i raspršenog fotona dani s

$$\vec{k}_i = (\omega_i, 0, 0), \quad \vec{k}_f = (\omega_f \cos \theta, \omega_f \sin \theta, 0), \quad (5.57)$$

a prijenos impulsa je

$$\vec{k} = (\omega_i - \omega_f \cos \theta, -\omega_f \sin \theta, 0). \quad (5.58)$$

Kut između impulsa raspršenog elektrona i upadnog fotona je φ_1 pa je impuls raspršenog elektrona dan s

$$\vec{p}_1 = (\cos \varphi_1 \cos \Phi, \sin \varphi_1 \cos \Phi, \sin \Phi) \quad (5.59)$$

gdje je s Φ označen kut između ravnine koja sadrži vektore \vec{k}_i i \vec{k}_f i ravnine koja sadrži vektore \vec{k}_i i \vec{p}_1 .

Vjerojatnost prijelaza dana je s

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = 2\pi \frac{e^4}{4\omega_i \omega_f} \sum_{\epsilon_i, \epsilon_f} (\epsilon_i \cdot \epsilon_f)^2 |\mathcal{M}|^2 \frac{d^3 k_f}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p_2}{(2\pi)^3} \delta \left(\omega_i + E_B - \omega_f - \frac{p_1^2}{2m} - \frac{p_2^2}{2m} \right) \delta^3 \left(\vec{k}_i - \vec{k}_f - \vec{p}_1 - \vec{p}_2 \right), \quad (5.60)$$

gdje je

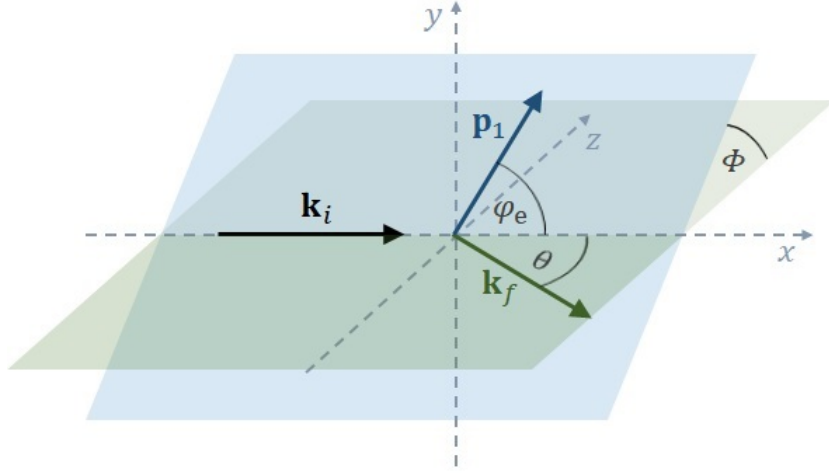
$$\mathcal{M} = \left\langle \Psi_f \left| \frac{1}{m} e^{i\frac{1}{2} \vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{1}{m} e^{-i\frac{1}{2} \vec{k} \cdot \vec{r}} \right| \Psi_i \right\rangle. \quad (5.61)$$

Pritom je $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$. Diferencijalni udarni presjek jednak je

$$d^3 \sigma = \frac{(2\pi)^3}{\omega_i \omega_f} m^2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T |\mathcal{M}|^2 \frac{d^3 k_f}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p_2}{(2\pi)^3} \delta \left(\omega_i + E_B - \omega_f - \frac{p_1^2}{2m} - \frac{p_2^2}{2m} \right) \delta^3 \left(\vec{k}_i - \vec{k}_f - \vec{p}_1 - \vec{p}_2 \right). \quad (5.62)$$

Prvo poništavamo impuls pozitrona koristeći trodimenzionalnu delta-funkciju za zakon očuvanja impulsa i dobivamo

$$d^3 \sigma = \frac{m^2}{\omega_i \omega_f} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T |\mathcal{M}|^2 \delta \left(\omega_i + E_B - \omega_f - \frac{p_1^2}{2m} - \frac{(\vec{k}_i - \vec{k}_f - \vec{p}_1)^2}{2m} \right) \frac{d^3 k_f}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3}. \quad (5.63)$$



Slika 5.2: Kinematika raspršenja na pozitroniju. Kut između ulaznog i raspršenog fotona je θ , a kut između ulaznog fotona i elektrona je φ_e . Kut između ravnine koja sadrži vektore \vec{k}_i i \vec{k}_f i ravnine koja sadrži vektore \vec{k}_i i \vec{p}_1 je Φ .

Koristeći $d^3p_1 = p_1^2 dp_1 d\Omega_1 = m p_1 dE_1 d\Omega_1$ i $d^3k_f = \omega_f^2 d\omega_f d\Omega_f$ dobivamo

$$\frac{d^3\sigma}{dE_1 d\Omega_1 d\Omega_f} = \left(\frac{m}{4\pi^2}\right)^3 \frac{p_1}{\omega_i} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_T |\mathcal{M}|^2 \cdot \int \omega_f \delta\left(\omega_i + E_B - \omega_f - E_1 - \frac{(\vec{k}_i - \vec{k}_f - \vec{p}_1)^2}{2m}\right) d\omega_f. \quad (5.64)$$

Zatim treba integrirati po energijama raspršenog fotona. Integraciju po energiji ω_f možemo značajno pojednostaviti ako u nastavku pretpostavimo da su energije ulaznog fotona ne veće od 10 keV [36]. Definiramo novu veličinu $t = \omega_f/\omega_i$ te pretpostavljamo da će za male energije ulaznog fotona vrijediti aproksimacija $t \approx 1$. U toj aproksimaciji koristeći (5.57) i (5.59) za prijenos impulsa dobivamo

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{(\vec{k}_i - \vec{k}_f)^2} = \sqrt{\omega_i^2 - 2\omega_i\omega_f \cos\theta + \omega_f^2} \\ &= \omega_i \sqrt{1 - 2t \cos\theta + t^2} \\ &\approx \omega_i \sqrt{2(1 - \cos\theta)}. \end{aligned} \quad (5.65)$$

Koristeći identitet $\sin\frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{1 - \cos\theta}{2}}$ zaključujemo

$$k \approx 2\omega_i \sin\frac{\theta}{2}. \quad (5.66)$$

Vektor prijenosa impulsa (5.58) u aproksimaciji $t \approx 1$ postaje

$$\vec{k} = \omega_i (1 - \cos\theta, -\sin\theta, 0). \quad (5.67)$$

Koristeći (5.67) i (5.59) možemo izračunati i skalarni umnožak

$$\vec{k} \cdot \vec{p}_1 = \omega_i p_1 [\cos \varphi_1 - \cos(\varphi_1 - \theta)] \cos \Phi. \quad (5.68)$$

Sad se integracija po ω_f može provesti na idući način

$$\int \omega_f \delta \left(\omega_i + E_B - \omega_f - E_1 - \frac{(\vec{k}_i - \vec{k}_f - \vec{p}_1)^2}{2m} \right) d\omega_f \approx \left(\omega_i + E_B - E_1 - \frac{(\vec{k} - \vec{p}_1)^2}{2m} \right). \quad (5.69)$$

Na taj način iz (5.64) dobivamo

$$\frac{d^3\sigma}{dE_1 d\Omega_1 d\Omega_f} = \left(\frac{m}{4\pi^2} \right)^3 \frac{p_1}{\omega_i} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T |\mathcal{M}|^2 \left(\omega_i + E_B - E_1 - \frac{(\vec{k} - \vec{p}_1)^2}{2m} \right). \quad (5.70)$$

Za kvadrat matričnog elementa koristimo (5.35), a uz definicije (5.34) dobivamo

$$\frac{d^3\sigma}{dE_1 d\Omega_1 d\Omega_f} = m \left(\frac{\xi}{\pi} \right)^5 \frac{p_1}{\omega_i} \left(\omega_i + E_B - E_1 - \frac{(\vec{k} - \vec{p}_1)^2}{2m} \right) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T (i_+^2 + 2i_+i_- + i_-^2). \quad (5.71)$$

Korištenjem (5.15) TDCS se može prikazati u ovisnosti o varijablama ω_i , E_1 i φ_1 . Grafovi TDCS danim s (5.71) u ovisnosti o kutu raspršenja elektrona prikazani su na slici 5.6. Rezultat je uspoređen s diferencijalnim udarnim presjekom iz I.S.Stepantsov [36] te pokazuje dobro poklapanje za kut raspršenja $\varphi = 0^\circ$ ("front-scattering"). Za taj kut izmjereni udarni presjek je najveći i iznosi oko $10^{-28} \text{cm}^2 \text{eV}^{-1} \text{sr}^{-2}$, dok je najmanji za kut raspršenja $\varphi = 180^\circ$ ("back-scattering") i iznosi oko $10^{-32} \text{cm}^2 \text{eV}^{-1} \text{sr}^{-2}$.

Zatim (5.70) integriramo po prostornom kutu izlaznog fotona,

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{dE_1 d\Omega_1} &= \int \frac{d^3\sigma}{dE_1 d\Omega_1 d\Omega_f} d\Omega_f \\ &= 2\pi \int_0^\pi \frac{d^3\sigma}{dE_1 d\Omega_1 d\Omega_f} \sin\theta d\theta \\ &= 2\pi m \left(\frac{\xi}{\pi} \right)^5 \frac{p_1}{\omega_i} \left(\omega_i + E_B - E_1 - \frac{(\vec{k} - \vec{p}_1)^2}{2m} \right) \\ &\quad \int_0^\pi \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_T (i_+^2 + 2i_+i_- + i_-^2) \sin\theta d\theta. \end{aligned} \quad (5.72)$$

Integriranjem dobivamo DDCS po energiji i prostornom kutu raspršenog elektrona. Grafovi ovisnosti DDCS danog s (5.72) o energiji elektrona E_1 prikazani su na slikama 5.7, 5.8 i 5.9 te su uspoređeni s [36]. Korišten je kut raspršenja elektrona $\varphi_1 = 0^\circ$, a energije fotona su:

$$\omega_i = 2 \text{ keV (slika 5.7a)}, \omega_i = 2.5 \text{ keV (slika 5.7b)},$$

$$\omega_i = 2.75 \text{ keV (slika 5.8a)}, \omega_i = 3 \text{ keV (slika 5.8b)},$$

$$\omega_i = 3.75 \text{ keV (slika 5.9a)}, \omega_i = 5 \text{ keV (slika 5.9b)}.$$

5.3 Pobuđena stanja

U ovom poglavlju izvest ćemo udarne presjeke za neke od pobuđenih stanja pozitronija, a pritom ćemo koristiti iste konstante $\xi = 2/a_p$ i $N = \sqrt{\xi^3/\pi}$ kao i za osnovno stanje. Početno stanje Ψ_i dobit ćemo koristeći odgovarajuće sferne harmonike i radijalne funkcije za pobuđeno stanje, a konačno stanje Ψ_f bit će ravni val za elektron i pozitron.

5.3.1 L1

Koristeći $Z = 1$, $a_p = 2a_0$ te konstante ξ i N , iz (4.14) zaključujemo da su radijalna funkcija i sferni harmonik oblika

$$R_{2,0} = 2 \left(\frac{1}{a_p} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{r}{a_p} \right) e^{-\frac{r}{a_p}}, \quad Y_0^0 = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\pi}}, \quad (5.73)$$

a početno stanje je opisano s

$$\Psi_i^{L1} = \frac{\sqrt{2}}{4} N \left(1 - \frac{1}{2} r \xi \right) e^{-\frac{\xi r}{2}}. \quad (5.74)$$

Matrični element je

$$\begin{aligned} \mathcal{M} &= \frac{1}{m} \langle \Psi_f | e^{i\frac{1}{2} \vec{k} \cdot \vec{r}} + e^{-i\frac{1}{2} \vec{k} \cdot \vec{r}} | \Psi_i \rangle \\ &= \frac{\sqrt{2} N}{4m} \left[\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{-\frac{1}{2} \xi r} \left[e^{iq_- r \cos \theta} + e^{-iq_+ r \cos \theta} \right] \left(1 - \frac{1}{2} r \xi \right) r^2 \sin \theta d\theta d\phi dr \right] \\ &= \frac{\sqrt{2} \pi N}{2m} \left[\int_0^\infty r^2 e^{-\frac{1}{2} \xi r} \left(1 - \frac{1}{2} r \xi \right) \int_0^\pi \left[e^{iq_- r \cos \theta} + e^{-iq_+ r \cos \theta} \right] \sin \theta d\theta dr \right] \\ &= \frac{\sqrt{2} \pi N}{q_+ + q_- m} \int_0^\infty r e^{-\frac{1}{2} \xi r} \left(1 - \frac{1}{2} r \xi \right) [q_- \sin(q_+ r) + q_+ \sin(q_- r)] dr \\ &= \frac{32 \sqrt{2} \pi N \xi}{m} \left[\frac{2q_+^3 + 2q_+^2 - \xi^2}{(\xi^2 + 4q_+^2)^3} + \frac{2q_-^3 + 2q_-^2 - \xi^2}{(\xi^2 + 4q_-^2)^3} \right]. \end{aligned} \quad (5.75)$$

Kvadriranjem amplitude (5.75), uvrštavanjem u jednadžbu (4.38) i sređivanjem dobivamo TDCS za raspršenje na pozitroniju u L1 stanju,

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega_f d\Omega'} \right)_{\text{Ps}}^{\text{L1}} = \frac{256\xi^5}{(m\pi)^2} p' E' \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{T}} \frac{\omega_f}{\omega_i} \cdot \left[\frac{2q_+^3 + 2q_+^2 - \xi^2}{(\xi^2 + 4q_+^2)^3} + \frac{2q_-^3 + 2q_-^2 - \xi^2}{(\xi^2 + 4q_-^2)^3} \right]^2. \quad (5.76)$$

5.3.2 M1

Koristeći $Z = 1$, $a_p = 2a_0$ te konstante ξ i N , iz (4.36) zaključujemo da su radijalna funkcija i sferni harmonik oblika

$$R_{3,0}(r) = 2 \left(\frac{2}{3a_p} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{4r}{3a_p} + \frac{8r^2}{27a_p^2} \right) e^{-\frac{2r}{3a_p}}, \quad Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}}, \quad (5.77)$$

a početno stanje je opisano s

$$\Psi_i^{\text{M1}} = \frac{1}{3\sqrt{3}} N \left(1 - \frac{2}{3} r \xi + \frac{2}{27} r^2 \xi^2 \right) e^{-\frac{\xi r}{3}}. \quad (5.78)$$

Analognim postupkom kao za L1-stanje dobivamo matrični element i odgovarajući TDCS dan s

$$\left(\frac{d^3\sigma}{d\omega_f d\Omega_f d\Omega'} \right)_{\text{Ps}}^{\text{M1}} = \frac{216\xi^5}{(m\pi)^2} p' E' \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{T}} \frac{\omega_f}{\omega_i} + \left\{ \frac{1}{(9q_+^2 + \xi^2)^2} + \frac{1}{(9q_-^2 + \xi^2)^2} - 6 \left[\frac{q_+ (3q_-^3 - q_- \xi^2)}{q_- (9q_-^2 + \xi^2)^3} + \frac{q_- (3q_+^3 - q_+ \xi^2)}{q_+ (9q_+^2 + \xi^2)^3} \right] + 9\xi^2 \left[\frac{(\xi^2 - 9q_-^2)}{(9q_-^2 + \xi^2)^4} + \frac{(\xi^2 - 9q_+^2)}{(9q_+^2 + \xi^2)^4} \right] \right\}^2. \quad (5.79)$$

Na slikama (5.10), (5.11) i (5.12) prikazana je ovisnost dobivenih TDCS o energiji raspršenog fotona za nekoliko kutova raspršenja fotona. Povećanjem kuta raspršenja vidimo kako su sve više izražena dva maksimuma, od kojih je veći maksimum onaj bliži FEA energiji.

5.4 Rezultati i diskusija

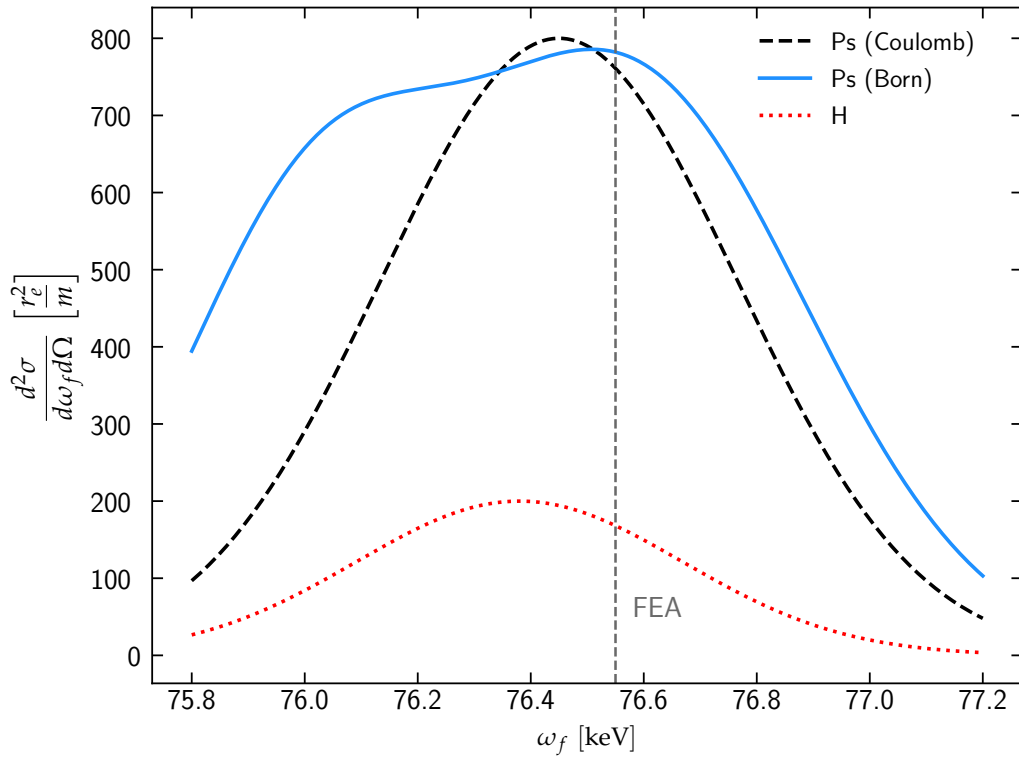
U poglavlju 5.1 izvedeni su diferencijalni udarni presjeci u A^2 aproksimaciji za raspršenje fotona na pozitroniju. Jednadžba (5.41) daje DDCS koristeći Bornovu aproksimaciju, a jednadžba (5.55) DDCS s Coulombovim valom bez interferencijskog člana. Sada ćemo prikazati DDCS za različite energije upadnog fotona te usporediti rezultate za Ps u Bornovoj aproksimaciji (puna linija), s Coulombovim valom (isprekidana linija) te za H-atom (točkasta linija). Na svim grafovima vertikalna isprekidana linija predstavlja energiju raspršenog elektrona u aproksimaciji slobodnog elektrona.

Na slikama 5.3, 5.4 i 5.5 jasno se vidi oblik Comptonskog vrha te njegovo širenje (defekt) u odnosu na energiju raspršenja na slobodnom elektronu. Rezultati dobiveni korištenjem Bornove aproksimacije dobro opisuju Comptonovu liniju i pokazuju jedan maksimum na energijama manjim od one dane FEA aproksimacijom te one na H-atomu. U rezultatima s Coulombovim valom uočavamo doprinos dvaju maksimuma, od kojih se jedan dobro podudara s maksimumom u Bornovoj aproksimaciji. Također, za sve aproksimacije uočavamo povećavanje DDCS sa smanjenjem energije upadnog fotona.

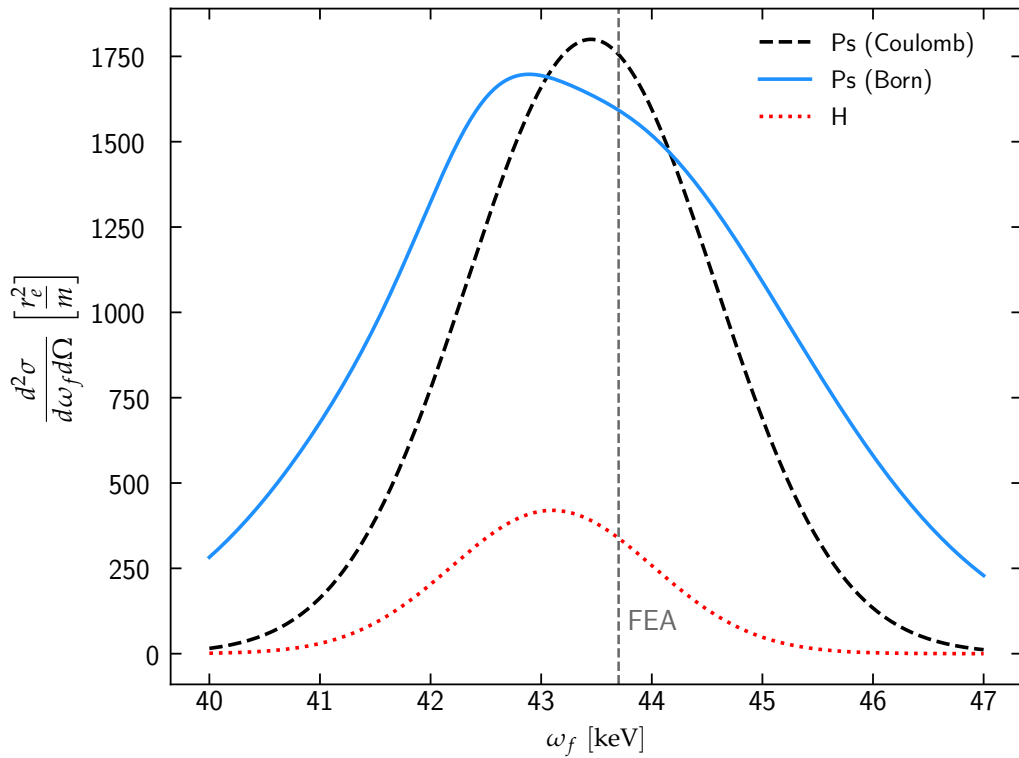
Slika 5.3a pokazuje dobro podudaranje energije raspršenja za vodikov atom i pozitronij u Bornovoj aproksimaciji, a u računu s Coulombovim valom za Ps vidimo dva maksimuma, od kojih se onaj veći gotovo podudara s računom u Bornovoj aproksimaciji, uz malo odstupanje prema višim energijama od nekoliko eV. Smanjenjem energije upadnog fotona upola, na slici 5.3a uočavamo sličnu situaciju, a DDCS se povećao gotovo dvostruko u odnosu na prijašnju energiju upadnog fotona.

Slika 5.4a pokazuje odlično slaganje Coulombovog računa s rezultatom Bornove aproksimacije, a maksimalna energija raspršenja je nešto niža od one za H-atom pri istim uvjetima. Na slici 5.4b su ponovno izražena dva maksimuma u Coulombovoj aproksimaciji, od kojih je viši maksimum onaj na nižim energijama i on se gotovo podudara s Bornovom aproksimacijom u visini i položaju.

Na slikama 5.5a, i 5.5b izraženije je širenje linija, a iznos DDCS je znatno veći nego pri prethodnim, višim energijama upadnog fotona. Račun Bornove aproksimacije i onaj s H-atomom predviđaju maksimum pri gotovo istim energijama, dok za rezultat s Comptonovim valom postoji odstupanje prema manjim energijama.

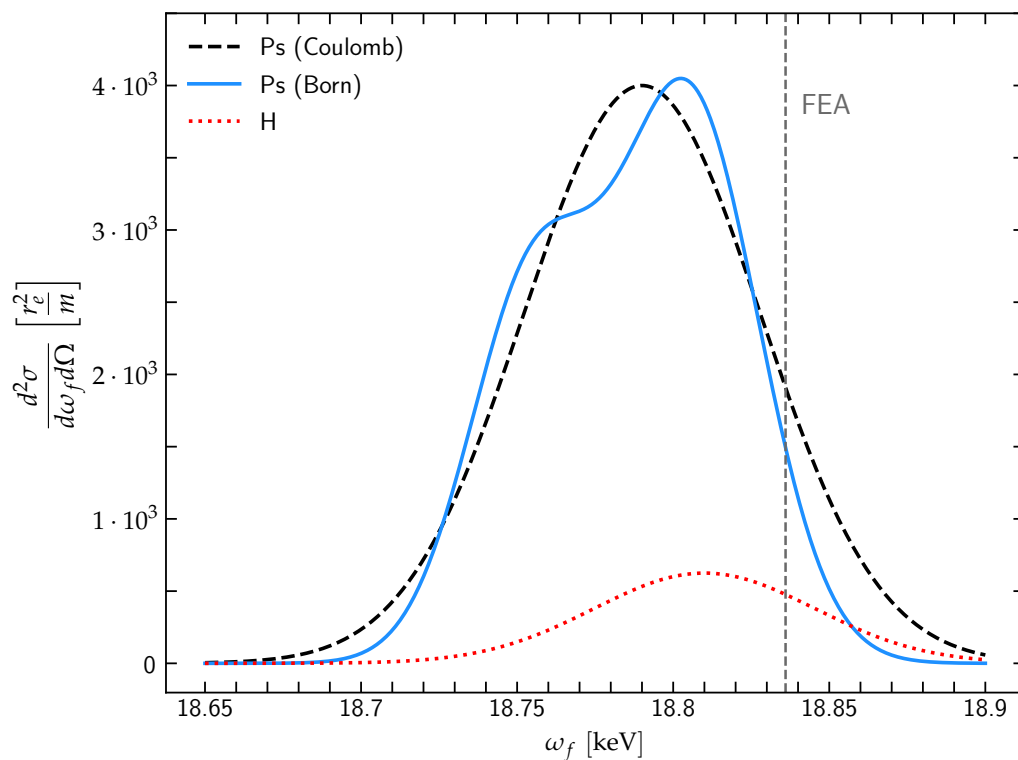


(a) $\omega_i = 100 \text{ keV}$, $\theta = 123^\circ$

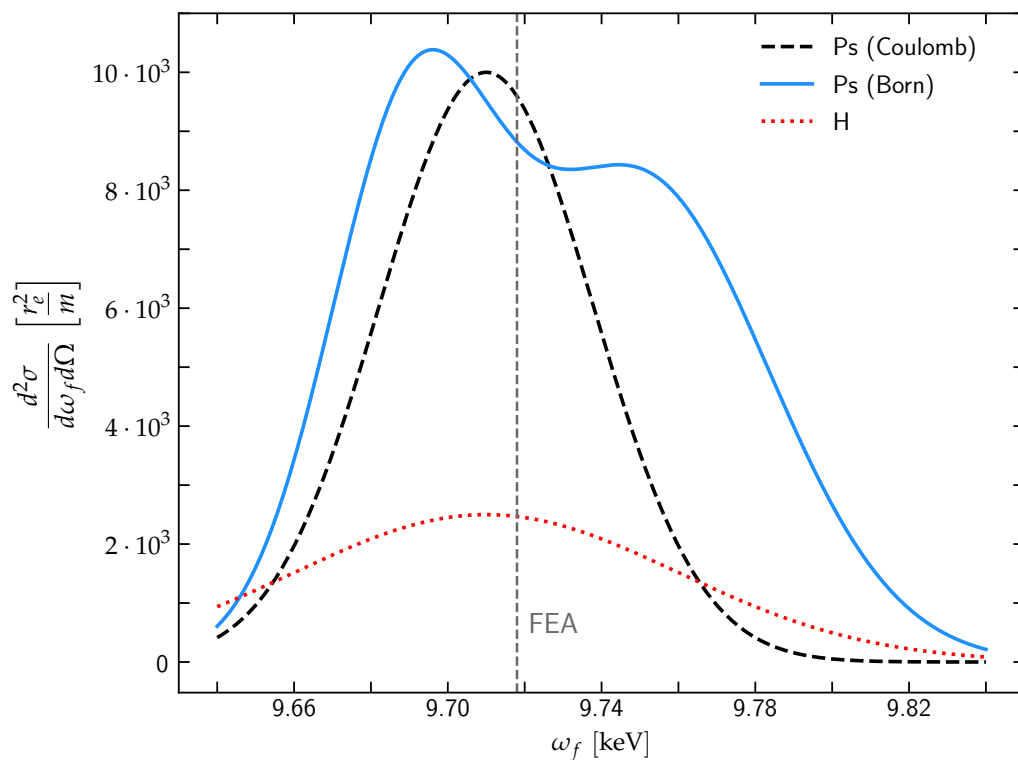


(b) $\omega_i = 50 \text{ keV}$, $\theta = 123^\circ$

Slika 5.3: Usporedba DDCS u A^2 aproksimaciji s ravnim valom i Coulombovim valom za raspršenje fotona energije (a) 100 keV i (b) 50 keV na pozitroniju. Vertikalnom isprekidanom linijom prikazana je energija raspršenog fotona u slučaju slobodnog elektrona, a točkastom linijom prikazan je DDCS za raspršenje na atomu vodika u osnovnom stanju. Kut raspršenja fotona je $\theta = 123^\circ$.

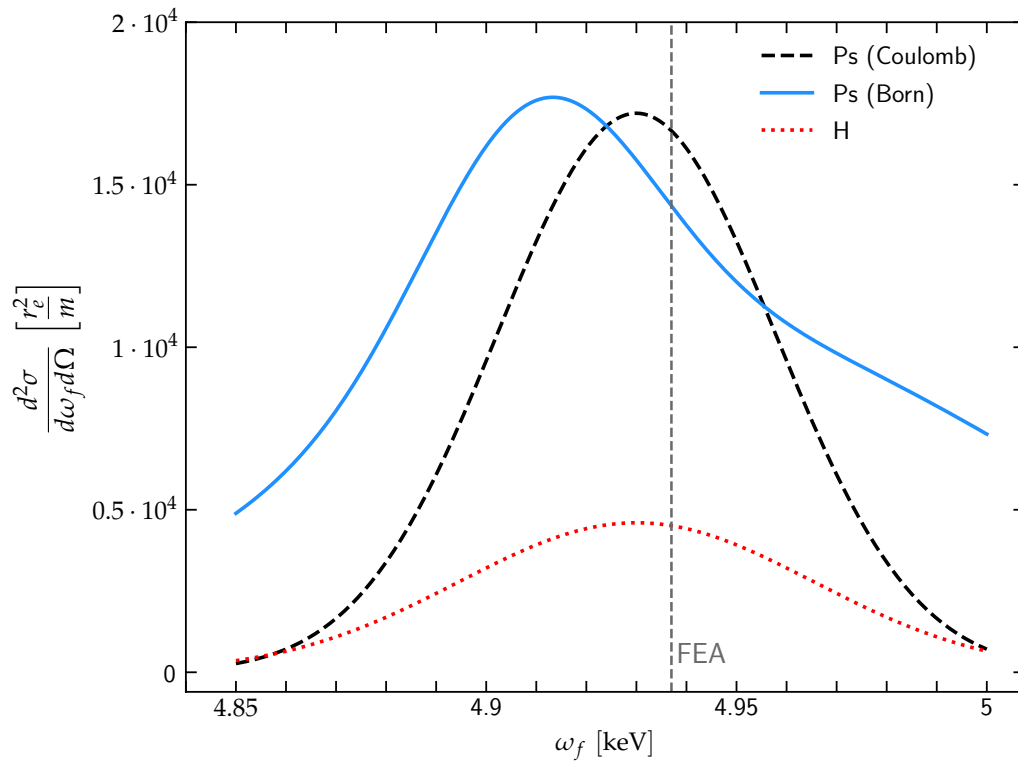


(a) $\omega_i = 20 \text{ keV}$, $\theta = 123^\circ$

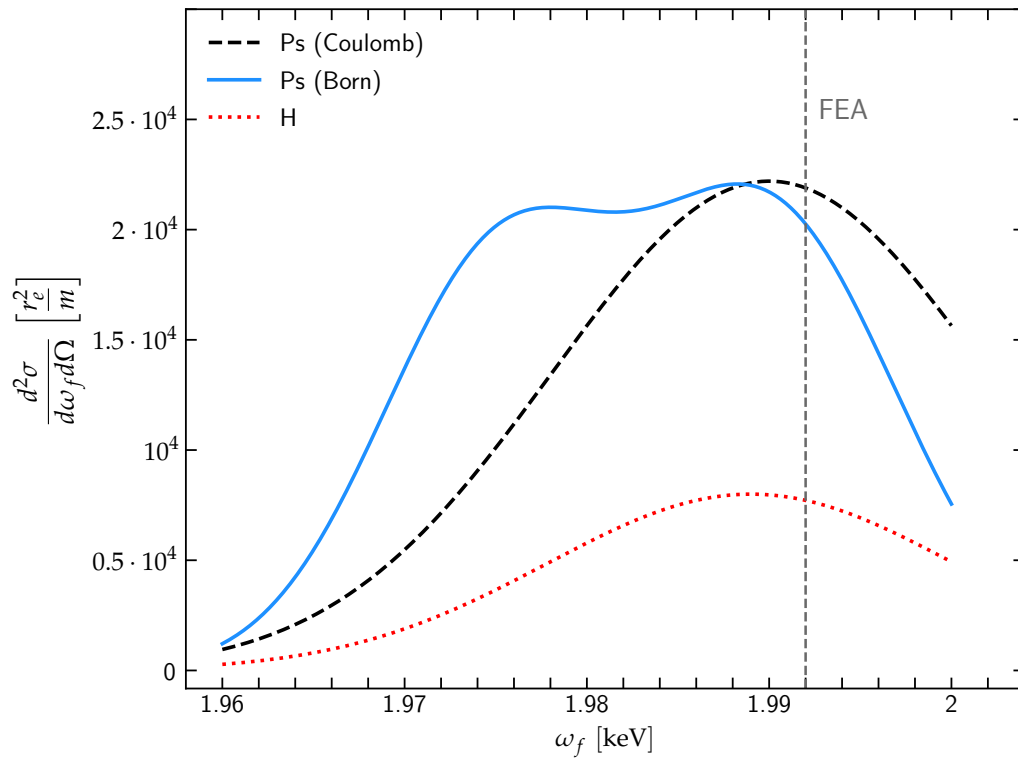


(b) $\omega_i = 10 \text{ keV}$, $\theta = 123^\circ$

Slika 5.4: Kao na slici 5.3, samo za raspršenje fotona energije (a) 20keV i (b) 10keV.



(a) $\omega_i = 5 \text{ keV}$, $\theta = 123^\circ$



(b) $\omega_i = 2 \text{ keV}$, $\theta = 123^\circ$

Slika 5.5: Kao na slici 5.3, samo za raspršenje fotona energije (a) 5 keV i (b) 2 keV.

U poglavlju 5.2 prikazani su rezultati za trostruko i dvostruko diferencirani udarni presjek raspršenja fotona na pozitroniju, diferencirani po energiji izlaznog elektrona. Izvodi su napravljeni koristeći A^2 aproksimaciju s ravnim valom, a rezultati su uspoređeni s onima danim u članku I. S. Stepantsova [36].

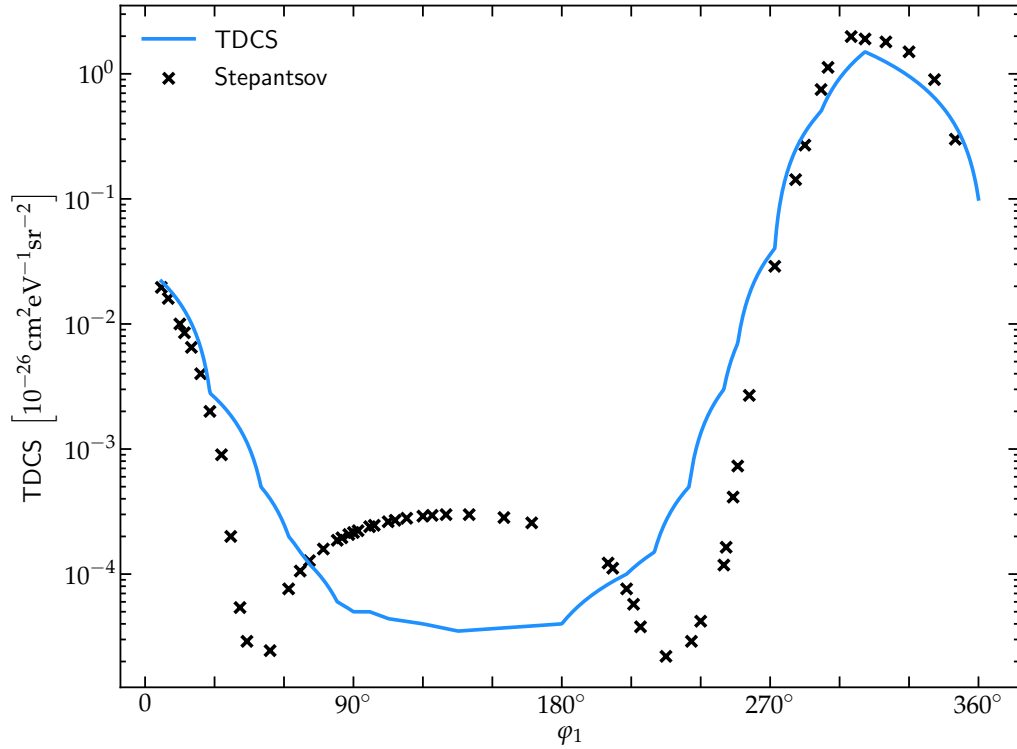
Na slici 5.6 prikazani su rezultati presjeka dobivenog jednadžbom (5.71) (puna linija) i usporedba s rezultatima iz članka (označeno križićima). Grafovi pokazuju ovisnost trostruko diferenciranog udarnog presjeka u ovisnosti o energiji raspršenog elektrona za dva kuta raspršenja fotona: $\theta = 90^\circ$ (slika 5.6a) i $\theta = 180^\circ$ (slika 5.6b). Vertikalna os prikazana je u logaritamskoj skali.

Na prvom grafu za slučaj fotona raspršenog pod kutom od 90° vidimo da rezultat iz ovog rada predviđa najmanji TDCS za kut raspršenja od oko 100° , što nije potpuno u suglasnosti s rezultatima iz članka, ali za maksimalnu vrijednost TDCS postoji podudaranje koje daje maksimum za kut oko 315° . Povećanjem kuta raspršenja fotona na $\theta = 180^\circ$ (*"back-scattering"*) vrijednost TDCS ostaje približno ista, ali se maksimum raspršenja elektrona pomiče prema kutu od 0° (*"front-scattering"*). Podudaranje s rezultatima iz članka je opet bolje za maksimum, ali ne i za minimum. U oba slučaja u rezultatima iz članka predviđena su dva minimuma, umjesto jednog, dok rezultatu u ovom radu predviđaju jedan minimum pri onom kutu koji je aritmetička sredina dvaju minimuma iz članka.

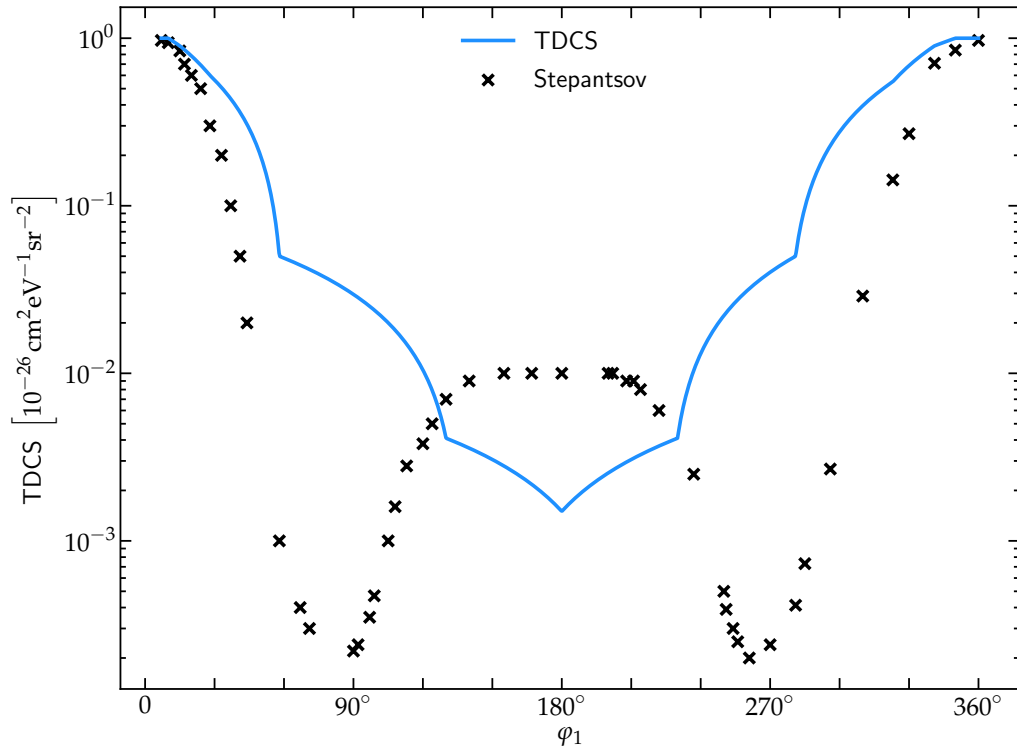
Na slici 5.7 prikazani su rezultati DDCS presjeka jednadžbom (5.72) i usporedba s rezultatima iz istog članka [36]. Uočavamo kako se presjek zamjetno razlikuje od nule pri malim kutovima emisije elektrona i pri njegovim niskim energijama. Također uočavamo kako diferencijalni udarni presjek teži prema nuli pri $E_1 \rightarrow 0$. Pri malim energijama upadnog fotona ($\omega_i < 0.01m_e$) najveći udarni presjek izmjeren je pri malim energijama elektrona, što je i očekivano za tako niske energije upadnog fotona.

Povećanjem upadne energije fotona na grafovima 5.8 i 5.9 uočavamo kako vrh pri manjim energijama postaje oštriji. Položaj maksimuma na malim kutovima (kao što je u ovim grafovima za $\varphi_1 = 0^\circ$) može se objasniti činjenicom da DDCS ima vrhunac onda kad elektron preuzima cijeli preneseni impuls. Vrh će se najjasnije vidjeti onda kada se foton rasprši unatrag (*"back-scattering"*), što dovodi do raspršenja elektrona prema naprijed.

Pri energijama elektrona $E_1 = 0.5\omega_i^2$ počinje se pojavljivati drugi, širi vrh koji postane izrazito vidljiv na grafu (5.9b). Povećanjem energije upadnog fotona dio impulsa se prenosi i na raspršeni pozitron i foton, pa se elektron ne raspršuje gotovo isključivo prema naprijed.

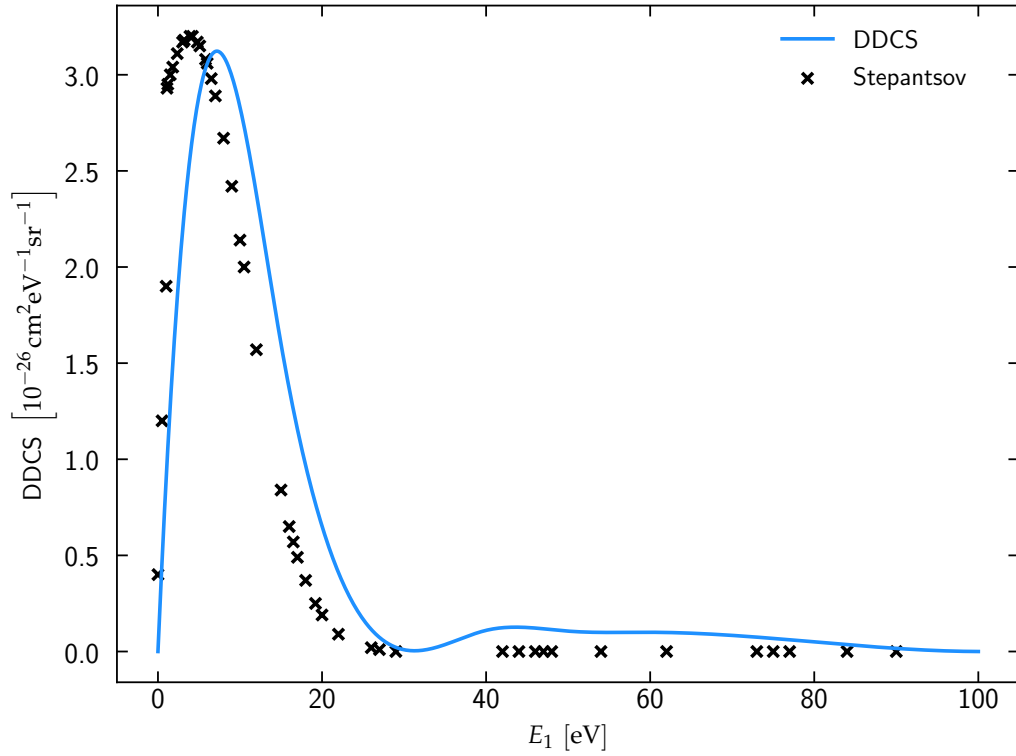


(a) $\theta = 90^\circ$

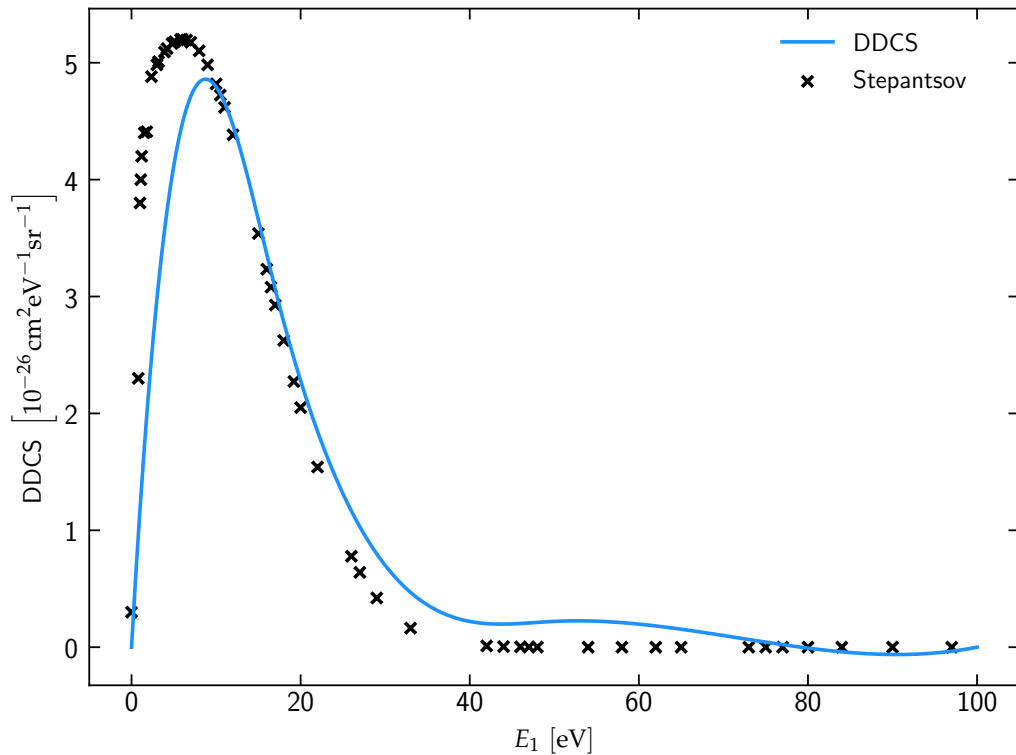


(b) $\theta = 180^\circ$

Slika 5.6: Ovisnost trostruko diferenciranog udarnog presjeka o kutu raspršenja elektrona za zadanu energiju fotona $\omega_i = 5 \text{ keV}$, energiju raspršenog elektrona $E_1 = 27.2 \text{ eV}$ i kuteve raspršenja fotona (a) $\theta = 90^\circ$ i (b) $\theta = 180^\circ$. Punom linijom je označen TDCS dobiven jednađbom (5.70), a križićima su označeni rezultati iz [36].

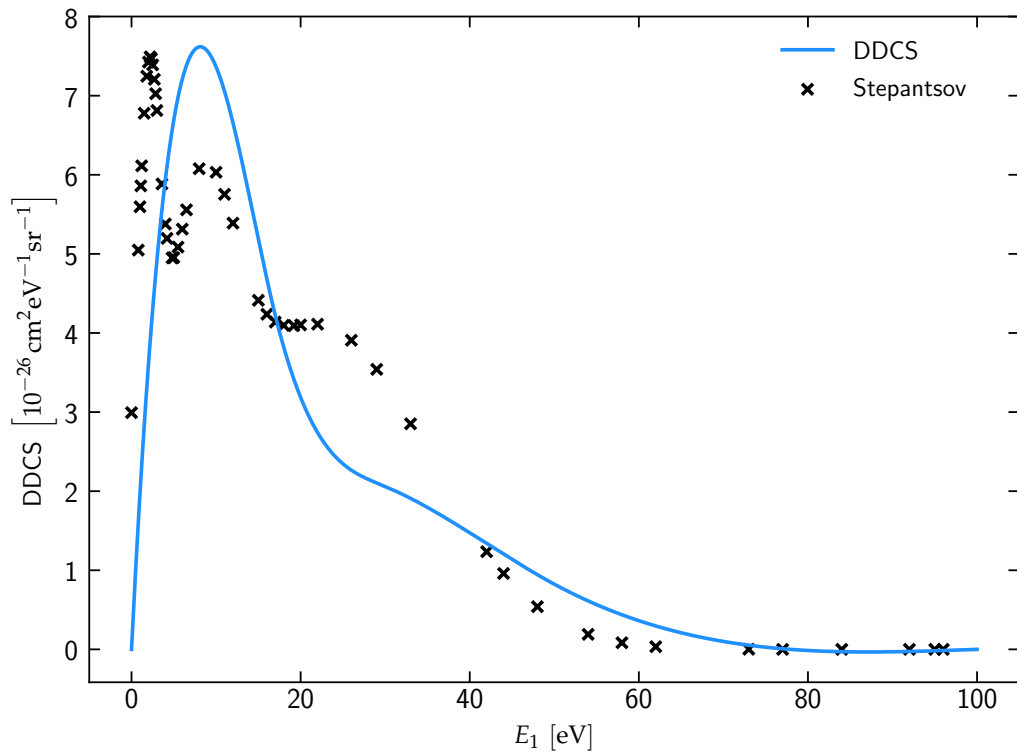


(a) $\omega_i = 2 \text{ keV}$, $\varphi_1 = 0^\circ$

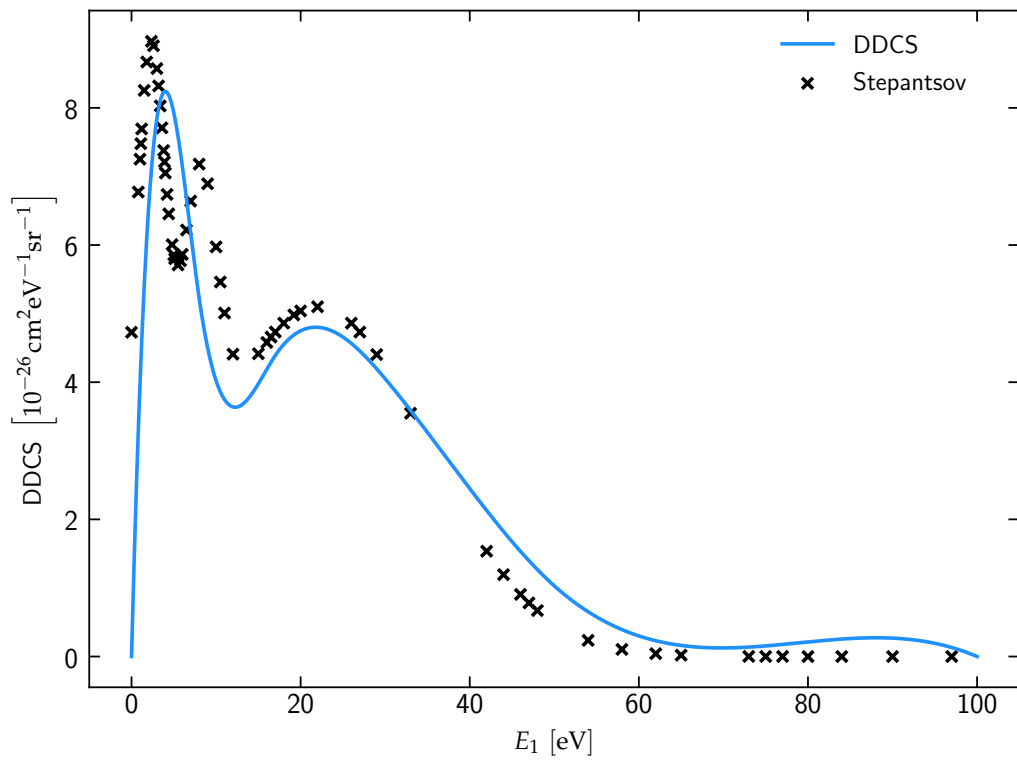


(b) $\omega_i = 2.5 \text{ keV}$, $\varphi_1 = 0^\circ$

Slika 5.7: Ovisnost dvostruko diferenciranog udarnog presjeka o energiji elektrona za zadanu energiju fotona (a) $\omega_i = 2 \text{ keV}$ i (b) $\omega_i = 2.5 \text{ keV}$ uz kut raspršenja elektrona $\varphi = 0^\circ$. energiju raspršenog elektrona $E_1 = 27.2 \text{ eV}$ i kutove raspršenja fotona (a) $\theta = 90^\circ$ i (b) $\theta = 180^\circ$. Punom linijom je označen TDCS dobiven jednađbom (5.70), a križićima su označeni rezultati iz [36].

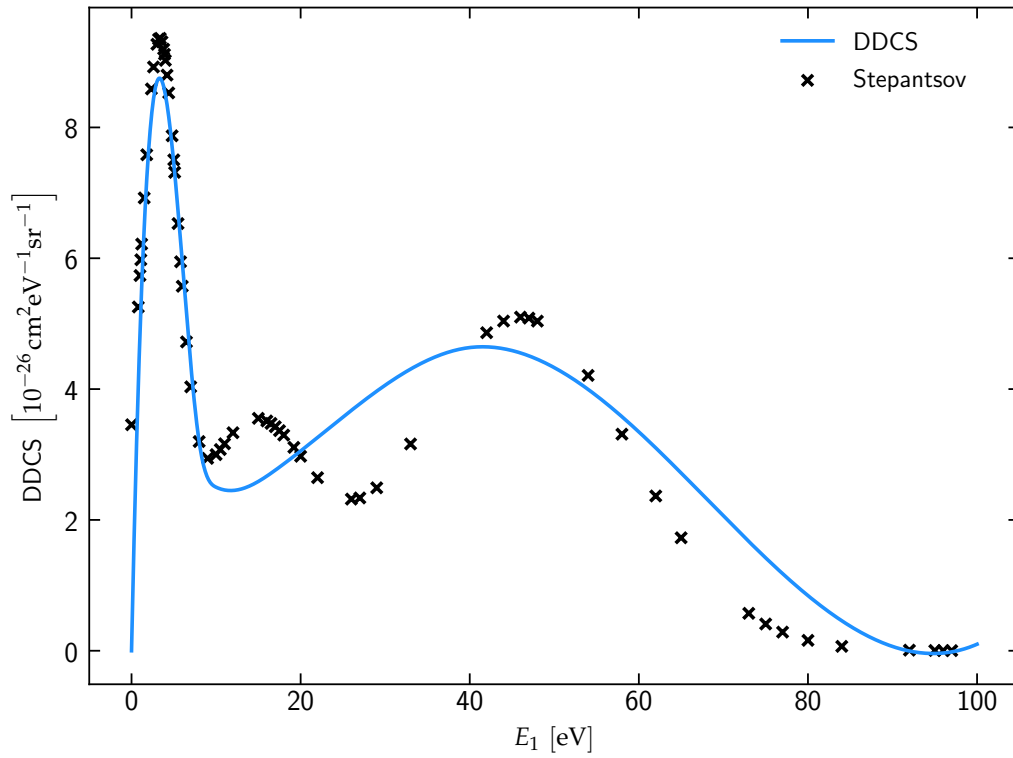


(a) $\omega_i = 2.75 \text{ keV}$, $\varphi_1 = 0^\circ$

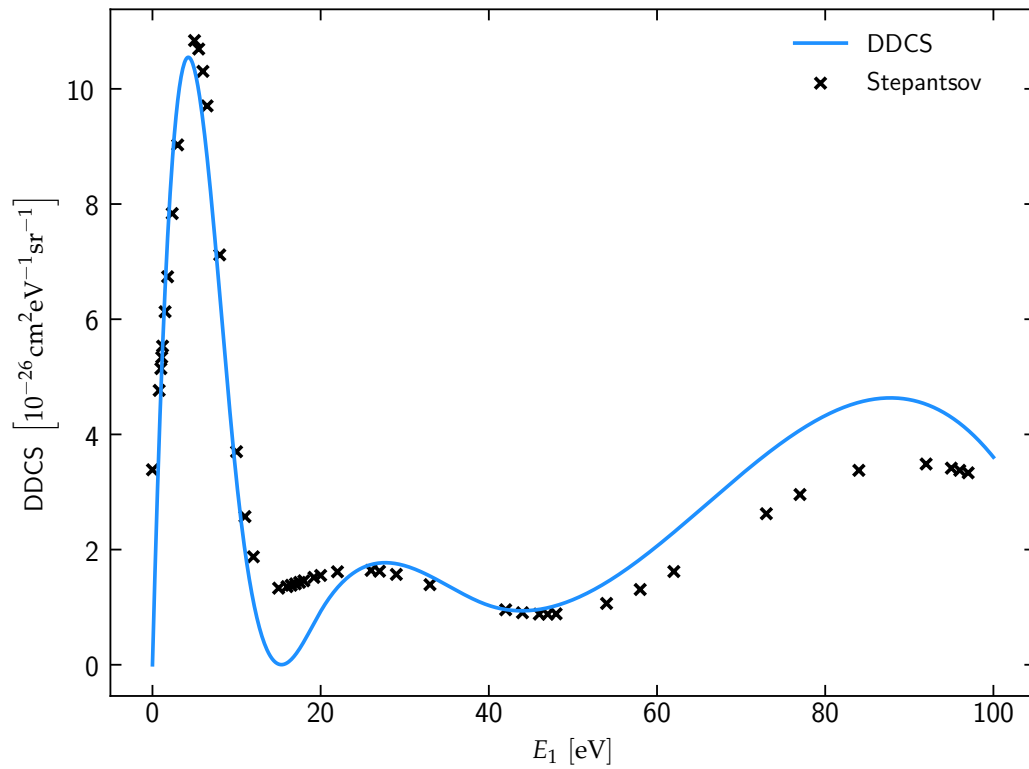


(b) $\omega_i = 3 \text{ keV}$, $\varphi_1 = 0^\circ$

Slika 5.8: Isto kao na slici 5.7, samo za energije fotona (a) $\omega_i = 2.75 \text{ keV}$ i (b) $\omega_i = 3 \text{ keV}$.



(a) $\omega_i = 3.75$ keV, $\varphi_1 = 0^\circ$



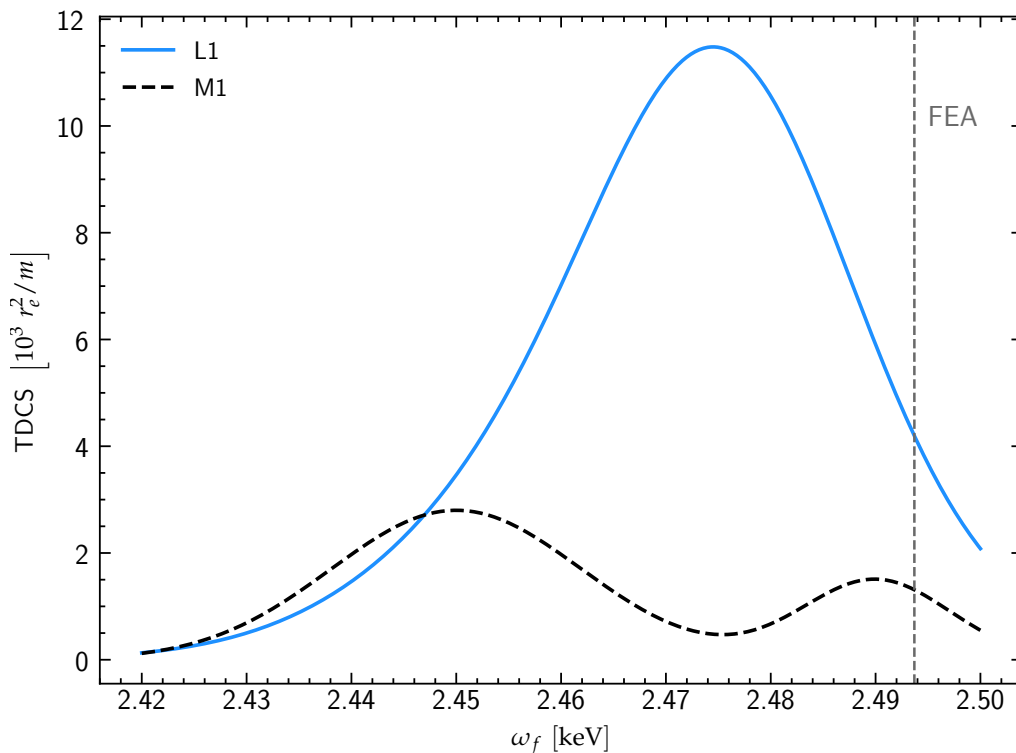
(b) $\omega_i = 5$ keV, $\varphi_1 = 0^\circ$

Slika 5.9: Isto kao na slici 5.7, samo za energije fotona (a) $\omega_i = 3.75$ keV i (b) $\omega_i = 5$ keV.

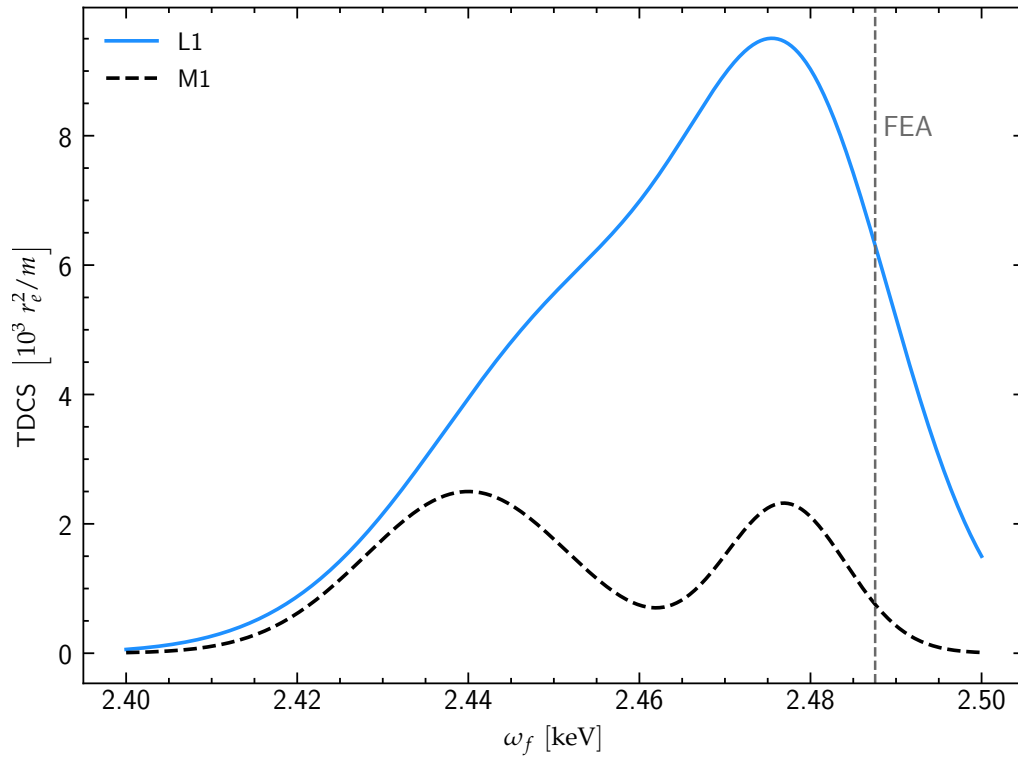
U poglavlju 5.3 izvedeni su trostruko diferencirani udarni presjeci za pobuđena stanja pozitronija: $L1$ (jednadžba 5.76) i $M1$ (jednadžba 5.76) koristeći Bornovu aproksimaciju. Na grafovima 5.10, 5.11 i 5.12 prikazani su diferencijalni udarni presjeci u ovisnosti o energiji raspršenog fotona pri energiji ulaznog fotona od 2.5 keV za tri različita kuta raspršenja fotona.

Pri kutu raspršenja od 60° dobiveno presjek za $L1$ stanje predviđa jedan maksimum, dok presjek za $M1$ stanje predviđa dva maksimuma koja su oko pet puta manjeg iznosa. Energije maksimuma su nešto manje nego one koje dobivamo FEA aproksimacijom na slobodnom elektronu.

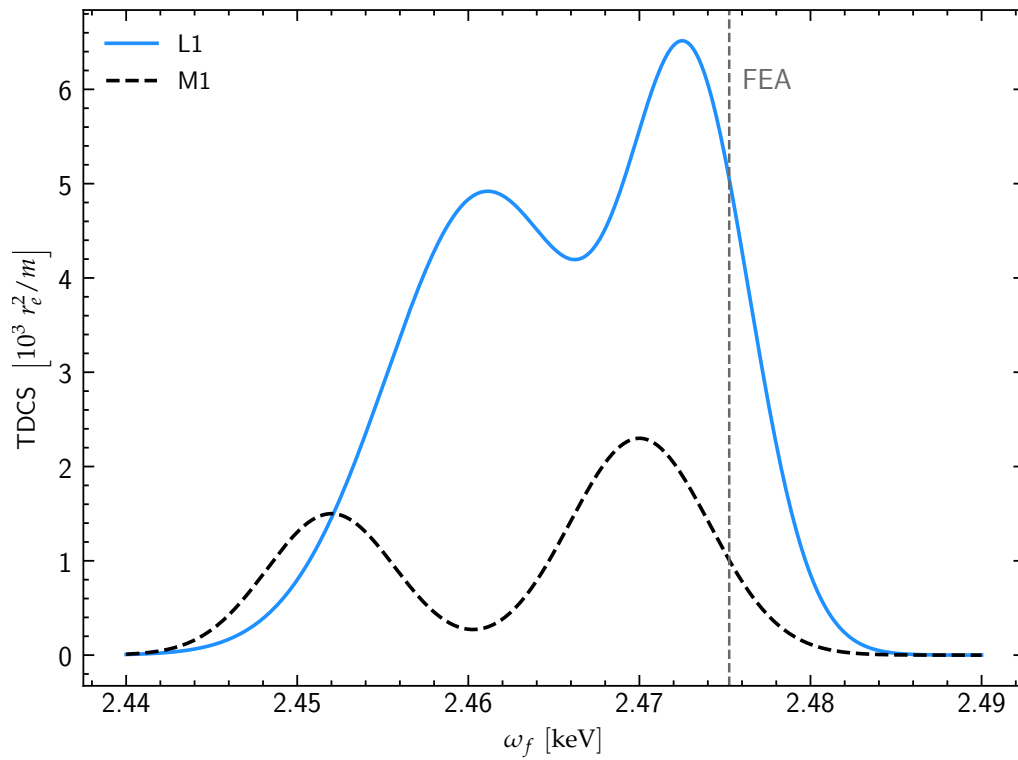
Povećavanjem kuta raspršenja fotona na 90° za $L1$ stanje uočavamo pojavljivanje drugog maksimuma i smanjivanje iznosa udarnog presjeka, dok se maksimumi za $L1$ stanje poštavaju. Taj trend se nastavlja i pri kutu raspršenja od 180° (*"back-scattering"*) gdje jasno vidimo po dva maksimuma za oba stanja, od kojih je nešto veći maksimum onaj na energijama bližima FEA energiji.



Slika 5.10: Ovisnost trostruko diferenciranog udarnog presjeka o energiji raspršenog fotona na pozitroniju stanja $L1$ (puna linija) i $M1$ (isprekidana linija). Energija upadnog fotona je $\omega_i = 2.5\text{ keV}$, a kut raspršenja fotona je $\theta = 60^\circ$. Vertikalnom isprekidanom linijom prikazana je energija raspršenog fotona u slučaju slobodnog elektrona.



Slika 5.11: Isto kao na slici 5.10, samo za kut raspršenja fotona $\theta = 90^\circ$.



Slika 5.12: Isto kao na slici 5.10, samo za kut raspršenja fotona $\theta = 180^\circ$.

6 Zaključak

Comptonovo raspršenje je neelastično raspršenje fotona na elektronu. U početnim poglavljima ovog rada prikazan je diferencijalni udarni presjek za raspršenje fotona na slobodnom gibajućem i mirujućem elektronu te raspršenje na vezanom elektronu. Kratko su predstavljene aproksimacije u okviru klasične elektrodinamike i teorije polja: Waller-Hartree aproksimacija i impulsna aproksimacija. Prikazan je diferencijalni udarni presjek u WH aproksimaciji izračunat korištenjem [42], te uspoređen s rezultatima mjerenja preuzetima iz [43], gdje vidimo dobro poklapanje ove aproksimacije s eksperimentalnim podacima. Korištenjem Bornove aproksimacije izračunati su diferencijalni udarni presjeci za vezane elektrone u osnovnoj K ljusci te u pobuđenim ljuskama (L,M). Također je u ovoj aproksimaciji izračunat diferencijalni udarni presjek po energiji raspršenog elektrona. Prikazani su diferencijalni udarni presjeci za K i L1 ljusku atoma silicija koji pokazuju da je DDCS nešto manji za pobuđenu ljusku, dok se maksimum pomiče prema većim energijama raspršenog fotona. Za pobuđena stanja su prikazani TDCS i potpuni udarni presjek, koji pokazuju dobro poklapanje s rezultatima iz [14]. Izračunati su i diferencijalni udarni presjeci korištenjem Coulombovog vala umjesto ravnog vala za osnovno stanje i nekoliko pobuđenih stanja (L1, M1). Grafički su uspoređeni rezultati za TDCS i DDCS u Bornovoj aproksimaciji i u aproksimaciji s Coulombovim valom, slijedom. Rezultati pokazuju dobro poklapanje položaja Coulombovog vrha koji je na nešto nižim energijama nego je to slučaj u FEA pristupu.

U posljednjem poglavlju obrađeno je raspršenje fotona na pozitroniju. Izvedena je opća jednačina za trostruko diferencirani udarni presjek po energiji fotona, a zatim su korištenjem ravnog i Coulombovog vala dobiveni dvostruko diferencirani udarni presjeci. Rezultati prikazani na grafički te pokazuju dobro poklapanje obje aproksimacije. Također uočeno je da je udarni presjek za raspršenje na pozitroniju veći nego za raspršenje na vodiku pri jednakim uvjetima, što je posljedica raspršenja na dvama centrima. slično kao pri raspršenju fotona na molekuli H_2 , kod pozitronija zbog raspršenja na dvama centrima se opaža učinak interferencije. Izračunat je i diferencijalni udarni presjek po energiji elektrona za Bornovu aproksimaciju, a rezultati su prikazani grafički i uspoređeni s rezultatima iz članka [36]. TDCS pokazuje dobro poklapanje na područjima maksimuma, ali slabije poklapanje za minimum, dok je za DDCS poklapanje jako dobro. Naposljetku, izračunati su diferencijalni udarni presjeci za pobuđena stanja pozitronija (L1 i M1) u Bornovoj aproksimaciji. Rezultati su prikazani grafički i pokazuju kako s porastom kuta raspršenja uočavamo dva maksimuma za DDCS, za oba pobuđena stanja, na približno jednakim energijama manjima od energije za FEA aproksimaciju pri istim uvjetima.



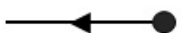



Dodaci

Dodatak A Feynmanovi dijagrami u QED

Feynmanovi dijagrami su simbolički prikaz interakcije čestica te ne predstavljaju stvarne putanje čestica u prostoru [54]. Vodoravna dimenzija je vrijeme, ali vertikalni razmak ne odgovara stvarnoj fizičkoj udaljenosti. Na Feynmanovim dijagramima vrijeme teče vodoravno i udesno. Dijagram se može iščitavati na način da nabijena čestica emitira ili apsorbira foton i zatim izlazi iz procesa. Ulazna čestica može biti kvark, elektron, ili bilo koji nabijeni lepton. Kad strijelica na liniji čestice pokazuje unatrag, to znači da se opisuje čestica koja se kreće unatrag u vremenu, odnosno antičestica koja ide naprijed u vremenu. U svakom vrhu dijagrama vrijedi očuvanje energije i momenta, a time i za dijagram u cjelini.

Svakoj vanjskoj liniji dodijeljen je četveroimpuls sa strijelicom koja pokazuje naprijed u vremenu. Ako je u pitanju fermion, strijelica četveromomenta podudarati će se sa strijelicom koja pokazuje gibanje fermiona. Naprotiv, za antifermion dvije strijelice će pokazivati u suprotnim smjerovima. Za svaku unutarnju liniju koja predstavlja fotonski propagator također se nadodaje četveroimpuls sa strijelicom kojoj proizvoljno odabiremo orijentaciju [54].

Vanjske i unutarnje linije prikazane su u tablici ispod [54].

Čestica	Orijentacija	Simbol	Oznaka
fermion	ulazni		u
	izlazni		\bar{u}
antifermion	ulazni		\bar{v}
	izlazni		v
foton	ulazni		ϵ_μ
	izlazni		ϵ_μ^*

Dodatak B Feynmanova pravila za QED

Vrhovi Za svaki vrh dodajemo član

$$i g_e \gamma^\mu, \quad (\text{B.1})$$

gdje je g_e bezdimenzijska konstanta vezanja.

Propagatori Za svaku unutarnju liniju dodajemo član:

Fermioni i antifermioni:

$$\frac{i(\gamma^\mu q_\mu + m)}{q^2 - m^2}, \quad (\text{B.2})$$

Virtualni fotoni:

$$\frac{-i g_{\mu\nu}}{q^2}. \quad (\text{B.3})$$

Očuvanje energije i momenta Za svaki vrh se nadodaje delta funkcija oblika

$$(2\pi)^4 \delta^4(k_1 + k_2 + \dots + k_n) \quad (\text{B.4})$$

gdje su k_i ($i \in \{1, 2, \dots, n\}$) četveroimpulsi koji ulaze u vrh (pozitivan predznak) ili izlaze iz njega (negativan predznak).

Četveroimpulsi Za svaki četveroimpuls dodajemo član

$$\frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \quad (\text{B.5})$$

i integriramo.

Poništavanje delta-funkcije Konačni izlaz sadržavat će član

$$(2\pi)^4 \delta^4(p_1 + p_2 + \dots - p_n) \quad (\text{B.6})$$

koji odgovara ukupnom očuvanju energije i impulsa. Taj član pokratimo, a nakon množenja s i preostaje samo \mathcal{M} .

Dodatak C Casimirov trik

Da bismo izveli jednadžbu za udarni presjek, potreban nam je kvadrat matrice raspršenja $|\mathcal{M}|^2$ [54]. Pritom moramo uzeti u obzir i moguće smjerove spinova, ali budući da su u eksperimentima smjerovi spinova čestica nasumični, možemo usrednjiti kvadrate amplituda po svim mogućim konfiguracijama spinova

$$\langle |\mathcal{M}|^2 \rangle = |\mathcal{M}(s_i \rightarrow s_f)|^2. \quad (\text{C.1})$$

Kvadrat amplitude raspršenja na primjeru raspršenja dviju čestica, koristeći pravila iz (B) je

$$|\mathcal{M}|^2 = \frac{g_e^2}{(p_1 - p_3)^4} (\bar{u}_3 \gamma^\mu u_1) ((\bar{u}_4 \gamma_\mu u_2) (\bar{u}_3 \gamma^\nu u_1)^* ((\bar{u}_4 \gamma_\nu u_2)^*), \quad (\text{C.2})$$

gdje su prva i treća te druga i četvrtta zagrada oblika

$$\Xi = (\bar{u}_a \Gamma_1 u_b) (\bar{u}_a \Gamma_2 u_b)^* = (\bar{u}_a \Gamma_2 u_b) (\bar{u}_a \bar{\Gamma}_2 u_b). \quad (\text{C.3})$$

Pritom su s a i b označeni odgovarajući spinovi i impulsi, a $\bar{\Gamma} = \gamma^0 \Gamma^\dagger \gamma^0$.

Sumiranjem po spinovima b dobivamo

$$\begin{aligned} \sum_b \Xi &= \bar{u}_a \Gamma_1 \left(\sum_{b=1,2} u^{(s_b)}(p_b) \bar{u}^{(s_b)}(p_b) \right) \bar{\Gamma}_2 u_a \\ &= \bar{u}_a \Gamma_1 (\not{p}_b + m_b) \bar{\Gamma}_2 u_a. \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Nadalje, sumiranjem po spinovima a dobivamo

$$\begin{aligned} \sum_a \sum_b \Xi &= \sum_a \bar{u}^{(s_a)}(p_a) \Gamma_1 (\not{p}_b + m_b) \bar{\Gamma}_2 u^{(s_a)}(p_a) \\ &= \text{Tr} [\Gamma_1 (\not{p}_b + m_b) \bar{\Gamma}_2 (\not{p}_a + m_a)]. \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Zajedno, zaključujemo da vrijedi

$$\sum_{\text{spinovi}} (\bar{u}_a \Gamma_1 u_b) (\bar{u}_a \Gamma_2 u_b)^* = \text{Tr} [\Gamma_1 (\not{p}_b + m_b) \bar{\Gamma}_2 (\not{p}_a + m_a)]. \quad (\text{C.6})$$

Na taj smo način sumiranje preko spinova zamijenili množenjem matrica i računanjem traga [54]. Ta metoda naziva se Casimirov trik¹³.

¹³nizozemski fizičar H. B. G. Casimir

Popis slika

1.1	Ovisnost trostruko diferenciranog udarnog presjeka o energijama izlaznog fotona.	2
3.1	Comptonovo raspršenje fotona na elektronu.	8
3.2	Comptonovo raspršenje na nerelativističkom elektronu.	10
3.3	Grafovi ovisnosti intenziteta zračenja o valnoj duljini za proizvoljne kutove raspršenja θ	11
3.4	Comptonovo raspršenje na mirujućem elektronu.	12
3.5	Diferencijalni udarni presjeci $d\sigma/d\Omega$ te $d\sigma/d\theta$ u ovisnosti o kutu raspršenja .	14
3.6	Asimptotsko ponašanje diferencijalnog udarnog presjeka $d\sigma/d\Omega$ i totalnog udarnog presjeka σ	15
3.7	Graf ovisnosti funkcije gustoće vjerojatnosti $f(\theta)$ o kutu raspršenja θ	17
3.8	Grafovi ovisnosti energije izlaznog fotona i kinetičke energije elektrona u ovisnosti o kutu raspršenja.	19
3.9	Grafovi ovisnosti gustoće vjerojatnosti energije izlaznog fotona i izlaznog elektrona u ovisnosti o postotku energije ulaznog fotona.	20
3.10	Feynmanovi dijagrami najnižeg reda koji doprinose Comptonovom raspršenju.	22
3.11	Comptonovo raspršenje u laboratorijskom sustavu mirujućeg elektrona.	26
3.12	Comptonovo raspršenje u sustavu centra mase.	28
4.1	Usporedba diferencijalnog udarnog presjeka $d\sigma/d\Omega$ u teorijskoj FEA aproksimaciji i WH aproksimaciji.	32
4.2	Usporedba dvostrukog diferencijalnog udarnog presjeka za zadani kut raspršenja u FEA te IA aproksimaciji.	34
4.3	Feynmanov dijagram koji odgovara A^2 u hamiltonijanu interakcije (4.23).	41
4.1	Trostruko diferencirani udarni presjek za raspršenje fotona energije $\omega_i = 100\text{keV}$ na atomu silicija.	45

4.2	Ovisnost trostruko diferenciranog udarnog presjeka o energijama raspršenog elektrona za tri vrijednosti upadne energije fotona ($\omega_i = 2\text{keV}$, $\omega_i = 3\text{keV}$ i $\omega_i = 4\text{keV}$).	53
4.3	Ovisnost potpunog udarnog presjeka o energijama upadnog fotona.	53
4.1	Usporedba TDCS za raspršenje fotona na K elektronu atoma vodika u Bornovoj aproksimaciji ravnog vala i u aproksimaciji Coulombovog vala.	55
4.2	Usporedba DDCS u Bornovoj aproksimaciji i aproksimaciji s Coulombovim valom za raspršenje fotona energije 10keV i 5keV na K elektronu vodikovog atoma.	56
4.3	Usporedba TDCS u Bornovoj aproksimaciji i aproksimaciji s Coulombovim valom za raspršenje fotona energije 300keV na $L1$ elektronu atoma olova.	58
4.4	Usporedba TDCS u Bornovoj aproksimaciji i aproksimaciji s Coulombovim valom za raspršenje fotona energije 80keV na $M1$ elektronu atoma ugljika.	59
5.1	Vektori \vec{q}_+ i \vec{q}_- .	66
5.2	Kinematika raspršenja na pozitroniju.	70
5.3	Usporedba DDCS u A^2 aproksimaciji s ravnim valom i Coulombovim valom za raspršenje fotona energije 100keV i 50keV na pozitroniju.	75
5.4	Usporedba DDCS u A^2 aproksimaciji s ravnim valom i Coulombovim valom za raspršenje fotona energije 20keV i 10keV na pozitroniju.	76
5.5	Usporedba DDCS u A^2 aproksimaciji s ravnim valom i Coulombovim valom za raspršenje fotona energije 5keV i 2keV na pozitroniju.	77
5.6	Ovisnost trostruko diferenciranog udarnog presjeka o kutu raspršenja elektrona.	79
5.7	Ovisnost dvostruko diferenciranog udarnog presjeka o energiji elektrona za zadanu energiju fotona $\omega_i = 2\text{keV}$ i $\omega_i = 2.5\text{keV}$.	80
5.8	Ovisnost dvostruko diferenciranog udarnog presjeka o energiji elektrona za zadanu energiju fotona $\omega_i = 2.75\text{keV}$ i $\omega_i = 3\text{keV}$.	81
5.9	Ovisnost dvostruko diferenciranog udarnog presjeka o energiji elektrona za zadanu energiju fotona $\omega_i = 3.75\text{keV}$ i $\omega_i = 5\text{keV}$.	82

5.10	Ovisnost trostruko diferenciranog udarnog presjeka o energiji raspršenog fotona na pozitroniju stanja $L1$ i $M1$. Kut raspršenja fotona je $\theta = 60^\circ$	83
5.11	Ovisnost trostruko diferenciranog udarnog presjeka o energiji raspršenog fotona na pozitroniju stanja $L1$ i $M1$. Kut raspršenja fotona je $\theta = 90^\circ$	84
5.12	Ovisnost trostruko diferenciranog udarnog presjeka o energiji raspršenog fotona na pozitroniju stanja $L1$ i $M1$. Kut raspršenja fotona je $\theta = 180^\circ$	84

Literatura

- [1] A. H. Compton, "A quantum theory of the scattering of X-rays by light elements," *Phys. Rev.*, vol. 21, p. 483., 1923.
- [2] O. Klein and Y. Y. Nishina, "Über die Streuung von Strahlung durch freie Elektronen nach der neuen relativistischen Quantendynamik von Dirac," *Z. Physik*, vol. 52, p. 853., 1929.
- [3] J. J. Thomson, *The Corpuscular Theory of Matter*. Archibald Constable and Co, Ltd., 1907.
- [4] J. W. M. Dumond, "Compton modified line structure and its relation to the electron theory of solid bodies," *Phys. Rev.*, vol. 33, 1929.
- [5] J. W. M. Dumond, "Breadth of Compton modified line," *Phys. Rev.*, vol. 36, 1930.
- [6] J. W. M. Dumond, "The linear momenta of electrons in atoms and in solid bodies as revealed by X-ray scattering," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 5, 1933.
- [7] R. Ribberfors, "Relationship of the relativistic Compton cross section to the momentum distribution of bound electron states," *Phys. Rev. B*, vol. 12, 1975.
- [8] R. Ribberfors, "Relationship of the relativistic Compton cross section to the momentum distribution of bound electron states-ii. Effects of anisotropy and polarization," *Phys. Rev. B*, vol. 12, 1975.
- [9] P. Eisenberger and W. A. Reed, "Relationship of the relativistic Compton cross section to the electron's velocity distribution," *Phys. Rev. B*, vol. 9, 1974.
- [10] S. Manninen, T. Paakkari, and K. Kajante, "Gamma ray compton profile of aluminium," *Philos. Mag.*, vol. 29, 1974.
- [11] D. R. Waller, I. and Hartree, "On the intensity of total scattering of X-rays," *Proceedings of the Royal Society of London, Ser.-A*, vol. 124, 1929.
- [12] P. M. Bergstrom and R. H. Pratt, "An overview of the theories used in Compton scattering calculations," *Radiation Physics and Chemistry*, vol. 50, no. 1, 1997.
- [13] R. H. Pratt, L. A. LaJohn, V. Florescu, T. Surić, B. K. Chatterjee, and S. C. Roy, "Compton scattering revisited," *Radiat. Phys. Chem.*, vol. 79, 2010.

- [14] P. M. Bergstrom Jr., T. Suric, K. Pisk, and R. Pratt, “Compton scattering of photons from bound electrons: Full relativistic independent-particle-approximation calculations,” *Physical Review A*, vol. 48, 1993.
- [15] P. Eisenberger and P. M. Platzman, “Compton scattering of X rays from bound electrons,” *Phys. Rev. A*, vol. 2, 1970.
- [16] F. Schnaidt, “Über das kontinuierliche und diskontinuierliche Comptonpektrum bei Wasserstoff,” *Ann. Phys.*, vol. 21, 1934.
- [17] A. Gummel and M. Lax, “Thermal capture of electrons in silicon,” *Ann. Phys.*, vol. 2, 1957.
- [18] M. Schumacher, F. Smend, and I. Borchert, “Incoherent scattering of gamma rays by inner-shell electrons,” *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, vol. 8, 1975.
- [19] M. Gavrilă, “Compton scattering by K-shell electrons. i. Nonrelativistic theory with retardation,” *Phys. Rev. A*, vol. 6, 1972.
- [20] M. Gavrilă, “Compton scattering by K-shell electrons. ii. Nonrelativistic dipole approximation,” *Phys. Rev. A*, vol. 6, 1972.
- [21] M. Gavrilă, “Numerical results for nonrelativistic Compton scattering of photons by K-shell electrons in the dipole approximation,” *Rev. Roum. Phys.*, vol. 19, 1974.
- [22] I. Whittingham, “Incoherent scattering of gamma rays in heavy atoms,” *J. Phys. A*, vol. 4, 1971.
- [23] I. Whittingham, “Compton scattering of 279.1 and 661.6 keV photons by K-shell electrons,” *Aust. J. Phys.*, vol. 34, 1981.
- [24] P. Bergstrom, T. Suric, K. Pisk, and R. Pratt, “Some preliminary calculations of whole atom Compton scattering of unpolarized photons,” *Nucl. Instrum. Meth. B*, vol. 71, 1992.
- [25] T. Suric, P. Bergstrom, K. Pisk, and R. Pratt, “Compton scattering of photons by inner-shell electrons,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 67, 1991.
- [26] T. Suric, “Compton scattering from bound electrons: Comparisons of the impulse approximation with exact IPA calculation,” *Nucl. Instrum. Meth.*, vol. 314, 1992.
- [27] H. A. Kramers and W. Heisenberg, “Über die Streuung von Strahlung durch Atome,” *Z. Phys.*, vol. 31, 1925.

- [28] I. Wailer, “Über eine verallgemeinerte Streuungsformel,” *Z. Phys.*, vol. 51, 1928.
- [29] I. Wailer, “Die Streuung kurzwelliger Strahlung durch Atome nach der Diracschen Strahlungstheorie,” *Z. Phys.*, vol. 58, 1929.
- [30] Z. Kaliman, T. Suric, K. Pisk, and P. R. H., “Triply differential cross section for Compton scattering,” *Physical Review A*, vol. 57, 1998.
- [31] M. e. Kircher, “Kinematically complete experimental study of Compton scattering at helium atoms near the threshold,” *Nat. Phys.*, vol. 16, 2020.
- [32] S. Mohorovicic, “Möglichkeit neuer Elemente und ihre Bedeutung für die Astrophysik,” *Astronomische Nachrichten*, vol. 253, 1934.
- [33] M. Deutsch, “MIT physicist who discovered positronium, dies at 85 (press release), mit,” 2002. Last accessed 25 August 2022.
- [34] J. Fernandez, O. Fojon, and F. Martin, “Double-slit, confinement, and non-Franck-Condon effects in photoionization of H2 at high photon energy,” *Phys. Rev. A*, vol. 79, 2009.
- [35] Z. Kaliman, K. Pisk, and R. Pratt, “Compton scattering from positronium and validity of the impulse approximation,” *Phys.Rev.A*, vol. 83, 2011.
- [36] I. Stepanov, I. Volobuev, and Y. Popov, “Comparative analysis of the Compton ionization of hydrogen and positronium,” *European Phys. Journal D*, vol. 76, 2022.
- [37] S. Houamer, O. Chuluunbaatar, I. Volobuev, and V. Popov, “Compton ionization of hydrogen atom near threshold by photons in the energy range of a few keV: Nonrelativistic approach,” *European Phys. Journal D*, vol. 74, 2020.
- [38] G. Grosso and P. Parravicini, *Solid State Physics*. Academic Press, 2000.
- [39] V. M. Gerrish, *Semiconductors and Semimetals*, vol. 43. Academic Press, 1995.
- [40] P. A. M. Dirac, “The quantum theory of the electron,” *Proceedings of the Royal Society*, vol. 117, no. 778, 1928.
- [41] M. E. Peskin and D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*. Westview Press, 1995.
- [42] J. H. H. et al., “Atomic form factors, incoherent scattering functions and photon scattering cross sections,” *Phys. Chern*, vol. 4, 1975.

- [43] P. Yalçın, N. Ekinçi, and Y. Kurucu, “Incoherent scattering of ^{241}Am gamma photons,” *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, vol. 57(4), 2002.
- [44] C.-K. Q. et al., “An overview of the Compton scattering calculation,” *Crystals*, vol. 11(5), 525, 2021.
- [45] J. J. Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics*. Addison- Wesley, New York, 1967.
- [46] Y. Namito, S. Ban, and H. Hirayama, “Implementation of the Doppler broadening of a Compton-scattered photon into the EGS4 code,” *Instrum. Meth. A*, vol. 49, 489- 494, 1994.
- [47] C. E. Ordonez, A. Bolozdynya, and W. Chang, “Doppler broadening of energy spectra in Compton cameras,” *IEEE Nuclear Science Symposium, Conference*, vol. Record 2, 1361-1365, 1997.
- [48] F. Biggs, L. B. Mendelsohn, and J. B. Mann, “Hartree-Fock Compton profiles for the elements,” *At. Data and Nucl. Data*, vol. 16, 1975.
- [49] E. G. Drukarev, A. I. Mikhailov, and I. A. Mikhailov, “Low-energy K-shell Compton scattering,” *Phys. Rev. A*, vol. 82, 2010.
- [50] E. G. Drukarev and A. I. Mikhailov, *High energy atomic physics*. Springer International Publishing, Switzerland, 2016.
- [51] Z. Kaliman, *Kutne korelacije u Comptonovom raspršenju na vezanim elektronima*. PhD thesis, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, 1998.
- [52] N. Bohr, “I. on the constitution of atoms and molecules,” *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 26, 1913.
- [53] T. Matesić, *A2 aproksimacija u Comptonovom raspršenju na atomskom elektronu*. Odjel za fiziku, Sveučilište u Rijeci, 2019.
- [54] D. Griffiths, *Introduction to elementary particles*. Willey, 1987.