

Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I

Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld¹

VON GERT MOLIÈRE

Aus dem Kaiser-Wilhelm-Institut für Physik, Hechingen

(Z. Naturforschg. 2a, 133–145 [1947]; eingegangen am 24. September 1946)

Die quantenmechanische Theorie der elastischen Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld wird unter Berücksichtigung der Abschirmung nach der Thomas-Fermi-Methode in analytischer Form entwickelt. Die Theorie ist gültig für beliebige Werte des Parameters $\alpha \equiv zZ/(137\beta)$ [Z = Ordnungszahl der streuenden Atome, $\pm ze$ = Ladung der gestreuten Teilchen, v deren Geschwindigkeit, $\beta = v/c$] sowie für Streuwinkel $\chi \leq 90^\circ$ und für kinetische Energie der Teilchen $E_{\text{kin}} \geq zZ^{4/3} \cdot 100 \text{ eV}$. Der Spineinfluß, der bei kleinen Streuwinkeln gering ist, wurde vernachlässigt, womit die Theorie für alle Sorten geladener Teilchen gilt.

Als Ergebnis wurde für das Verhältnis $q(\chi) \equiv Q(\chi)/Q_{\text{Ruth.}}(\chi)$ [$Q(\chi)$ = diff. Streuquerschnitt pro Raumwinkeleinheit um χ , $Q_{\text{Ruth.}}(\chi)$ = Rutherford'scher Streuquerschnitt] ein Integralausdruck gefunden, der bei großen χ in die für alle α gültige Formel

$$q(\chi) \equiv \frac{Q(\chi)}{Q_{\text{Ruth.}}(\chi)} \approx 1 - \frac{8,85}{(\chi/\chi_0^2)} \left[1 + \alpha^2 \cdot 2,303 \log_{10} \frac{\chi^4 \cdot 0,00072}{\chi_0^4 (\alpha^4 + \frac{1}{3} \alpha^2 + 0,13)} \right]$$

übergeht. Die hierbei und im folgenden auftretende Winkelkonstante ist $\chi_0 = Z^{1/3} \cdot 2,44 \cdot 10^5 \text{ eV}/(pc)$ [Winkelgrad] [p = Impuls; pc in Elektron-Volt]. Die asymptotische Formel ist praktisch verwendbar, solange sie $q(\chi) > 0,9$ ergibt. Im übrigen Bereich kann der Verlauf der Funktion $q(\chi)$ mit Hilfe von Interpolationsformeln der Gestalt $\chi_q = \chi_0 (A_q + B_q \alpha^2)^{1/2}$ ermittelt werden, wobei χ_q denjenigen Winkel bedeutet, für den das Verhältnis $Q/Q_{\text{Ruth.}}$ den festen Wert q annimmt. Die Zahlen A_q und B_q sind für eine Reihe von Werten q tabuliert (vergl. S. 143). Der so konstruierte Funktionsverlauf von $q(\chi)$ ist exakt für die Grenzfälle kleiner und großer α und stellt für Zwischenwerte von α eine gute Näherung dar, wie der Vergleich mit einigen durch numerische Auswertung erhaltenen Punkten zeigt (vergl. Abb. 2 S. 143). — Der letzte § (9) dient der Vorbereitung der im Tl. II behandelten Theorie der Vielfachstreuung.

Die Untersuchungen über die Streuung geladener Teilchen beim Durchgang durch Materie reichen weit zurück: Wir erinnern an die frühen, von Heinrich Hertz veranlaßten Kathodenstrahlforschungen von Philipp Lenard („Lenard-Fenster“ 1893) sowie die berühmten Experimente von Lord Rutherford über die Streuung von α -Strahlen (1911), die grundlegend wurden für die Entwicklung der modernen Atomphysik, ferner Versuche über Elektronenstreuung von J. A. Crowther (1911) u. a. Die weitere Entwicklung hat gezeigt, daß es für die Deutung der Experimente wesentlich darauf ankommt, ob

Einfachstreuung oder Mehrfach- bzw. Vielfachstreuung vorliegt. In letzter Zeit hat das Interesse für die Streuung geladener Teilchen — meist Elektronen —, und zwar insbesondere solche hoher Energie, vom experimentellen wie theoretischen Standpunkt wieder stark zugenommen, wobei es sich meist um ausgesprochene Vielfachstreuung handelt. Wir werden auf diese ganze Entwicklung und die hierüber vorliegende Literatur in einer II. Mitteilung, die sich mit der statistischen Theorie der Mehrfach- und Vielfachstreuung befassen wird, ausführlich eingehen. Bereits an dieser Stelle erwähnen wir nur eine der Arbeiten von E. J. Williams (1939)², in der u. a. die seiner Vielfachstreuungstheorie zugrundegelegte Theorie des Einzelstreuprozesses, die uns

¹ Meiner lieben Frau gewidmet.

² E. J. Williams, Proc. Roy. Soc. [London] Ser. A 169, 531 [1939].



hier angeht, behandelt ist, und weisen ferner hin auf das Buch von N. F. Mott und H. S. W. Massey³. — Vom Einfluß des Spins auf die Einzelstreuung von Elektronen können wir hier absehen, da es uns in erster Linie auf die Streuung zu kleinen Winkeln ankommt, bei denen dieser Einfluß gering ist (vergl. E. J. Williams²). Ebenso sehen wir ab von dem bei großen Streuwinkeln u. U. in Erscheinung tretenden Einfluß der Kernstruktur auf die Streuung von Elektronen.

Für den Einfluß der Abschirmung⁴ auf die Verteilung der Einzelstreuwinkel kommt es — wie bekannt — wesentlich auf die Größe des Parameters

$$\alpha = \frac{zZe^2}{\hbar v} = \frac{zZ}{137\beta} \quad (\text{E, 1})$$

an. (Z = Ordnungszahl des streuenden Atoms, $\pm ze$ = Ladung des gestreuten Teilchens, v dessen Geschwindigkeit, $\beta = v/c$.) Die beiden Grenzfälle $\alpha \ll 1$ und $\alpha \gg 1$ sind der Rechnung bequem zugänglich, besonders der erstere, in dem es gestattet ist, zur Bestimmung des Streuquerschnitts die Bornsche Näherungsmethode zu verwenden, während im letzteren Grenzfall asymptotisch der klassische (d. h. auf Grund der klassischen Bahnvorstellung für das gestreute Teilchen berechnete) Streuquerschnitt gültig ist. Der erstere Grenzfall kleiner α ist realisiert bei Streuung von Teilchen (insbes. Elektronen) mit hoher, der Lichtgeschwindigkeit vergleichbarer Geschwindigkeit ($\beta \approx 1$) an leichten Elementen ($Z \ll 137$). Der letztere Grenzfall größer α liegt vor bei Streuung von Teilchen geringer Geschwindigkeit $v \ll c$ und kommt daher insbesondere für die Streuung schwerer Teilchen in Betracht (z. B. kommen nach E. J. Williams⁵ für Streuung von α -Strahlen Werte von α im Bereich 20 bis 25 praktisch vor). — Bei mittleren Werten $\alpha \approx 1$, wie sie insbesondere bei Streuung schneller Elektronen an schweren Elementen auftreten (z. B. $\alpha \geq 0,6$ für Streuung an Blei), hat man sich bisher meist (abgesehen natürlich von den vorquantenmechanischen Arbeiten, in denen klassisch gerechnet wurde) wohl oder übel mit der Bornschen Näherung begnügt. Nach der bekannten Methode der Entwicklung der Streuwelle nach Kugelfunktionen läßt sich zwar leicht ein

allgemeiner, für alle α gültiger Ausdruck für den Streuquerschnitt angeben, dessen direkte Auswertung jedoch sehr umständlich ist. J. A. Bartlett jr. und T. A. Welton⁶ haben nach dieser Methode für einen Spezialfall (Streuung von 100 kV-Elektronen an Quecksilber entsprechend $\alpha = 1,07$) den Einfluß der Abschirmung (und zugleich den des Spins) numerisch berechnet; auf ein wichtiges Teilergebnis dieser Arbeit werden wir sogleich noch eingehen.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit besteht nun darin, das Streuproblem für alle α möglichst weitgehend in analytischer Form zu lösen, wobei es uns in erster Linie auf die Streuung von Teilchen hoher Energie und zu kleinen Winkeln ankommt. Es werden zwei verschiedene Lösungsverfahren angewandt, deren eines (§ 3), auf einer Kombination „strahlenoptischer“ Rechnung im atomaren Bereich und streng „wellenoptischer“ Fortsetzung auf große Entfernung hin beruhend, sich durch besondere Anschaulichkeit auszeichnet, in der Gültigkeit des Ergebnisses jedoch auf kleine Streuwinkel ($\lesssim 20^\circ$) beschränkt ist. Das andere Verfahren (§ 4) geht aus von der Kugelfunktionsentwicklung und beruht auf der Ersetzung der Kugelfunktionen $P_l(\cos \chi)$ durch eine für alle l und kleine χ gültige und bis $\chi \approx 90^\circ$ praktisch brauchbare asymptotische Darstellung [vergl. math. Anhang (A, 1)] und anschließendem Übergang von der Summe über l zu einem Integral. Die in den Koeffizienten der Kugelfunktionen maßgeblich auftretenden Phasenverschiebungen werden dabei unter Zugrundelegung einer analytischen Darstellung der Thomas-Fermi-Funktion mit Hilfe der WKB-Methode⁶ [„strahlenoptische“ Näherung für die Radialfunktionen] berechnet. Es läßt sich plausibel machen [wenn auch ein strenger Beweis dafür bisher aussteht], daß diese Methode die Phasenverschiebungen für alle Drehimpulsquantenzahlen l (unter gewissen Bedingungen) exakt liefert [vergl. Anm. 11]. Dies ist auch im Einklang mit dem Ergebnis von Bartlett u. Welton⁶, die sehr gute Übereinstimmung zwischen den exakt mit Hilfe einer Maschine [„differential analyzer“] und den nach der WKB-Methode, nicht jedoch den nach der Bornschen Näherungsmethode berechneten Phasenverschiebungen fanden. — Der Gültigkeitsbereich unserer

³ The Theory of Atomic Collisions, Oxford 1933.

⁴ Das gleiche gilt für jede Abweichung vom Coulomb-Feld; lediglich für reines Coulomb-Feld gilt unabhängig von α das Rutherfordsche Gesetz. Vergl. W. Gordon, Z. Physik 48, 180 [1928].

⁵ E. J. Williams, Physic. Rev. 58, 292 [1940].

⁶ J. A. Bartlett jr. u. T. A. Welton, Physic. Rev. 57, 1063 [1940]; Physic. Rev. 59, 281 [1941].

Theorie läßt sich mit Benutzung der Winkelkonstanten

$$\chi_0 = \lambda / 2\pi a \quad (\text{E}, 2)$$

[λ = de Broglie-Wellenlänge, a = Thomas-Fermi-Atomradius; χ_0 bestimmt im Fall $\alpha \leq 1$ und $\alpha \chi_0$ im Fall $\alpha > 1$ die Größe des von der Abschirmung wesentlich beeinflussten Winkelbereiches] durch die Bedingung

$$\alpha \chi_0 \ll 1 \quad (\text{E}, 3)$$

ausdrücken. Führen wir zur Präzisierung dieser Bedingung eine kleine Zahl ε als obere Grenze für $\alpha \chi_0$ ein, so folgt daraus zugleich auch eine obere Grenze für χ_0 selbst:

$$\alpha \chi_0 \lesssim \varepsilon; \quad \chi_0 \lesssim \left(\frac{\varepsilon}{z Z^{2/3} \mu} \right)^{1/2}, \quad (\text{E}, 3')$$

(wobei $\mu = m/m_e$ das Verhältnis der Teilchenmasse zur Elektronenmasse bedeutet). Die aus (E, 3') folgende untere Grenze der kinetischen Energie liegt (auch für Elektronen) im unrelativistischen Bereich und hat mit $\varepsilon \approx 1/6$ den in der Zusammenfassung angegebenen Wert. Im Gegensatz zur Gültigkeitsbedingung der Bornschen Näherung (s. oben) ist die Bedingung (E, 3) stets mit beliebiger Genauigkeit erfüllbar, wenn nur λ klein genug gewählt werden kann, d. h. der Theorie kommt asymptotisch für große Energie strenge Gültigkeit zu.

§ 1. Grundlagen und Problemstellung

Wir behandeln zunächst (§§ 1 bis 5) die Theorie der Streuung an einem beliebigen Zentralfeld $V(r)$, das erst später (§§ 6 bis 9) als abgeschirmtes Coulomb-Feld spezialisiert wird. — Da der (bei den hauptsächlich interessierenden kleinen Winkeln unwesentliche) Spineinfluß vernachlässigt werden soll, haben wir von der relativistischen Schrödinger-Gleichung

$$\Delta \psi + k^2(r) \psi = 0 \quad (\text{I}, 1)$$

auszugehen. Dabei ist zur Abkürzung die verallgemeinerte Wellenzahl

$$k(r) = \frac{1}{\hbar c} \sqrt{[E - V(r)]^2 - m^2 c^4} \quad (\text{I}, 2)$$

eingeführt, wobei E die Gesamtenergie des gestreuten Teilchens (einschließlich der Ruhenergie) und $V(r)$ dessen potentielle Energie im streuenden Atom bedeutet. $k(r)$ nach (1,2) läßt sich nach Potenzen von $V(r)$ entwickeln:

$$k(r) = k_0 \left[1 - \frac{V(r)}{\hbar k_0 v} - \frac{1}{2} \left(\frac{V(r)}{\hbar k_0 v} \right)^2 - \dots \right], \quad (\text{I}, 2')$$

wobei v die Geschwindigkeit und k_0 die Wellenzahl ($\hbar k_0 = \text{Impuls}$) des Teilchens im „Vakuum“, d. h. bei $V(r) = 0$, bedeuten. Das Verhältnis $n(r) \equiv k(r)/k_0$ kann als ein variabler „Brechungsindex“ des Atoms aufgefaßt werden. (Genau genommen sollte an Stelle von $V(r)$ in (1,2') stets $V(r) - \frac{V^2(r)}{2E}$ stehen, was jedoch nur in unmittelbarer Kernnähe und somit nur bei Streuung zu großen Winkeln einen merkbaren Unterschied ausmacht.)

Die Größenordnung der Entwicklungsglieder betreffend stellt (1,2') eine Entwicklung nach Potenzen der (eingangs definierten und als $\ll 1$ vorausgesetzten) Größe $\alpha \chi_0$ dar. Man erkennt dies, indem man in (1,2') zZe^2/r für $V(r)$ und dabei für r den die Größenordnung bestimmenden „Abschirmungsradius“ a einsetzt⁷. Im Rahmen unserer Voraussetzungen ist daher die Entwicklung (1,2') stets erlaubt und darf nach dem linearen Gliede abgebrochen werden. Zugleich sieht man, daß die Abweichung des Brechungsindex $n(r) = k(r)/k_0$ von eins klein von der Ordnung $\alpha \chi_0$ ist. — Im Gegensatz dazu stellt die Bornsche Näherung [s. § 2], die bekanntlich ebenfalls auf einer gewissen Entwicklung nach Potenzen von $V(r)$ beruht, größenordnungsmäßig eine solche nach Potenzen der Größe α dar.

Es sei nun $e^{ik_0(\hat{s}, r)}$ die in Richtung des Einheitsvektors \hat{s} einfallende ebene Welle; die Streuwelle $\psi_{\text{Str.}}$ in Richtung \hat{s}' soll bestimmt werden. Aus dieser folgt der Wirkungsquerschnitt für Ablenkung in den Einheitsraumwinkel um \hat{s}' [bzw. mit einem Ablenkungswinkel $\chi = \angle(\hat{s}, \hat{s}')$] gemäß:

$$Q(\chi) = r^2 |\psi_{\text{Str.}}(r, \chi)|^2. \quad (\text{I}, 3)$$

§ 2. Lösung in Bornscher Näherung

Diese liefert bekanntlich für die gestreute Welle den Ausdruck:

$$\psi_{\text{Str.}} = - \frac{k_0}{2\pi \hbar v} \frac{e^{ik_0 r}}{r} \int d\tau' V(r') e^{ik_0(\hat{s} - \hat{s}', r')}. \quad (\text{I}, 1)$$

⁷ Das hier Gesagte gilt natürlich nicht für den kernnahen Bereich $r \ll a$, der zur Streuung zu kleinen Winkeln nichts beiträgt.

Wir wollen diesen in eine Form bringen, die den Vergleich mit der weiter unten gegebenen genauen Lösung gestattet. Dazu führen wir für die Integrationsvariable r' in (2,1) Zylinderkoordinaten x, ϱ, γ ein, so, daß die Zylinderachse x in Richtung des Vektors $\hat{s} + \hat{s}'$ weist [vergl. Abb. 1, wo die Einheitsvektoren \hat{s} und \hat{s}' parallel zur Zeichenebene, dagegen der Vektor r' gegen diese geneigt zu denken sind]. Damit lautet (2,1):

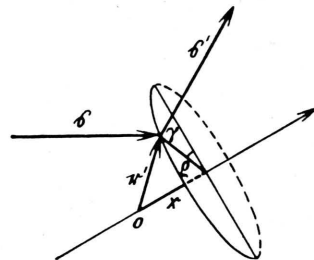


Abb. 1. Lage der Zylinderkoordinaten x, ϱ, γ .

$$\psi_{\text{Str.}} = - \frac{k_0}{2\pi\hbar v} \frac{e^{ik_0 r}}{r} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_0^{\infty} \varrho d\varrho \int_0^{2\pi} d\gamma V(\sqrt{x^2 + \varrho^2}) e^{ik_0 |\hat{s} - \hat{s}'| \varrho \cos \gamma} \quad (2,1')$$

Die Integration über γ führt hierbei auf die Bessel-Funktion nullter Ordnung gemäß $J_0(z)$ $= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{iz \cos \gamma} d\gamma$ mit dem Argument $z = k_0 |\hat{s} - \hat{s}'| \varrho = k_0 2 \sin \frac{\chi}{2} \varrho$. Für die Integration über x in (2,1') führen wir die für das Folgende wichtige Funktion

$$\Phi(\varrho) = - \frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\sqrt{x^2 + \varrho^2}) dx = - \frac{2}{\hbar v} \int_0^{\infty} \frac{V(r) r dr}{\sqrt{r^2 - \varrho^2}} \quad (2,2)$$

ein, die sich ihrer Bedeutung nach als eine Phasenverschiebung herausstellen wird. Geht man mit (2,1') nach Ausführung der Integrationen über φ und x in Gl. (1,3) für den Streuquerschnitt ein, so folgt für diesen in der hier verwandten Bornschen Näherung der Ausdruck:

$$Q(\chi)_{\text{Born}} = k_0^2 \left| \int_0^{\infty} \varrho d\varrho J_0 \left(k_0 2 \sin \frac{\chi}{2} \varrho \right) \Phi(\varrho) \right|^2, \quad (2,3)$$

den wir mit der unten folgenden exakten Lösung vergleichen werden.

Der Vergleich der Größe $\Phi(\varrho)$ nach (2,2) mit der Größe $V(r)/\hbar k_0 v$, nach deren Potenzen die Entwicklung (1,2') fortschreitet, und deren Größenordnung sich zu $\alpha \chi_0 = \alpha / a k_0$ ergab, zeigt unmittelbar, daß $\Phi(\varrho)$ von der Größenordnung α ist.

§ 3. Lösung für alle α und kleine Streuwinkel

Bei Beschränkung auf kleine Streuwinkel [in der Näherung, in der $\chi \approx \sin \chi$ gesetzt werden kann] ist ein besonders einfaches und anschauliches Lösungsverfahren möglich, das wir hier zunächst wiedergeben: Es beruht auf der Anwendung der *strahlenoptischen Näherung* (WKB-Methode) am Orte und in unmittelbarer Umgebung des streuenden Atoms sowie anschließen- der *streng wellenoptischer Fortsetzung* auf große Entfernung vom Atom hin⁸. Dieses durch die vor-

ausgesetzte Kleinheit der Wellenlänge λ ermöglichte Verfahren gestaltet sich dadurch besonders einfach, daß sich der Brechungsindex $n(r) \equiv k(r)/k_0$ nur wenig von eins unterscheidet. Dies besagt, daß die Wellenflächen der auf das Atom treffenden ebenen Welle $e^{ik_0 x}$ (die Achse der Zylinderkoordinaten x, ϱ, γ liege jetzt in der Einfallrichtung \hat{s}) beim Durchdringen des Atoms nur wenig deformiert werden, so daß ihre Orthogonaltrajektorien (abgesehen von den sehr nahe am Kern vorbeiführenden) innerhalb und in naher Umgebung des Atoms als gerade Linien betrachtet werden können. Die durch das Potential $V(r)$ verursachte Phasenverschiebung längs

⁸ Ein dem unseren analoges Verfahren wurde bereits von C. V. Raman u. N. S. Nagendra Nath (Proc. Indian. Acad. Sci. Sect. A 2, 406 u. 413 [1935]; ebendort 3, 75 [1936]) in der Theorie der Beugung von Licht an Ultraschallwellen verwendet. Vergl. hierzu auch: Bergmann, Der Ultraschall, Berlin 1937, VDI-Verlag.

einer solchen, zum „Stoßparameter“ ϱ gehörigen Orthogonaltrajektorie ist dann gegeben durch

$$\Phi(\varrho) = \int_{-\infty}^{+\infty} [k(r = \sqrt{x^2 + \varrho^2}) - k_0] dx. \quad (3, 1)$$

Setzt man hier für $k(r)$ die Entwicklung (1,2') bis zum linearen Gliede ein, so folgt für $\Phi(\varrho)$ genau wieder Gl. (2,2). Wir betrachten nun eine hinter dem Atom liegende Ebene $x = x_0 > 0$, wobei x_0 von der Größenordnung des Atomradius a , zugleich jedoch groß genug gewählt ist, so daß praktisch $V(r) = 0$ für $r \geq x_0$ (der genaue Wert von x_0 ist unwesentlich). Auf dieser Ebene lautet dann die Wellenfunktion:

$$\psi(x_0, \varrho) = \exp(i[k_0 x_0 + \Phi(\varrho)]). \quad (3, 2)$$

Um die Berechtigung des bis zu diesem Punkt angewandten Verfahrens zu erweisen, müssen wir zeigen, daß die Deformation δx der Wellenflächen (im Vergleich zum Atomradius a) bzw. die Neigungswinkel der Wellennormalen nach Durchdringung des Atoms klein sind. Dies soll zum mindesten für die mit a vergleichbaren „Stoßparameter“ ϱ (d. h. für den „Abschirmungsbereich“) gelten. — Der Brechungsindex im Atom sei $n = 1 + \delta n$; der Größenordnung nach fanden wir $\delta n \approx \alpha \chi_0 \ll 1$. Daraus folgt unmittelbar für die Größenordnung der Deformation δx (= Änderung der „optischen Weglänge“):

$$|\delta x| \approx a \delta n \approx \alpha \chi_0 = \alpha \lambda / 2\pi.$$

Das gleiche folgt auch aus der bereits bekannten Größenordnung α für die Phasenänderung $\Phi(\varrho)$ mit Zuhilfenahme der Beziehung $\Phi(\varrho) = 2\pi \delta x / \lambda$. — Der Winkel, den eine (zum „Stoßparameter“ ϱ gehörige) Orthogonaltrajektorie nach Durchdringung des Atoms mit der Einfallrichtung bildet, ist gleich dem Neigungswinkel der Wellenfläche und somit gegeben durch

$$z = \left| \frac{d(\delta x)}{d\varrho} \right| = \frac{\lambda}{2\pi} \left| \frac{d\Phi(\varrho)}{d\varrho} \right|. \quad (3, 3)$$

Die Größenordnung dieser Winkel ist demnach gegeben durch $\alpha(\lambda/\pi a) = \alpha \chi_0 \ll 1$. Damit ist gezeigt, daß unser zu (3,2) führendes Verfahren im Rahmen unserer Voraussetzungen gültig, und zwar asymptotisch (d. h. bei um so kleinerer Wellenlänge λ mit um so größerer Genauigkeit bzw. bis zu um so kleineren Stoßparametern ϱ hin) gültig ist.

Gl. (3,3) ist noch in anderer Hinsicht interessant: Würden wir zur Fortsetzung der Wellenfunktion (3,2) in den Raum $x > x_0$ bis zu großer Entfernung vom streuenden Atom weiterhin die strahlenoptische Näherung verwenden, so würden die Neigungswinkel (3,3) der Orthogonaltrajektorien direkt als Streuwinkel in Erscheinung treten. In der Tat stellt (3,3) zusammen

mit (2,2) den aus der klassischen Bahnvorstellung folgenden Zusammenhang zwischen Streuwinkel und Stoßparameter (in der Näherung kleiner Winkel) dar. Den gleichen Winkel errechnet man auch als das Verhältnis des seitlichen Impulsstoßes, den ein Teilchen auf seiner (durch eine Gerade angenäherten und zum Stoßparameter ϱ gehörigen) Bahn erhält, zum Gesamtimpuls. — Der Abschirmungsbereich der klassischen Streuwinkelverteilung ist somit $\alpha \chi_0$. Die im folgenden durchgeführte streng „wellenoptische“ Fortsetzung der Wellenfunktion (3,2) führt zu einer Verbreiterung der (Abschirmungs-) Streuwinkelbreite auf die Größenordnung $\chi_0 = \lambda/2\pi a$, die als Beugungseffekt zu deuten ist. Damit ist verständlich, daß bei kleinen α der „wellenoptische“ Beugungseffekt, und bei großen α der „strahlenoptische“ Brechungseffekt bzw. klassische Ablenkungseffekt für die Streuung überwiegt.

Es soll nun die nach (3,2) auf der Ebene $x = x_0$ bekannte Wellenfunktion ψ auf Grund strenger Wellentheorie gemäß der „Vakuum“-Wellengleichung $\Delta\psi + k_0^2\psi = 0$ in den Halbraum $x > x_0$ fortgesetzt werden, und zwar wünschen wir ψ an einem sehr weit vom streuenden Atom entfernten Aufpunkt \mathfrak{R} [$R \gg x_0$], der unter einem kleinen Streuwinkel χ vom Streuzentrum aus erreicht wird, zu bestimmen. Dazu dient uns der Green-sche Satz:

$$\int d\tau [\psi \Delta\varphi - \varphi \Delta\psi] = \int d\sigma \left[\psi \frac{\partial\varphi}{\partial n} - \varphi \frac{\partial\psi}{\partial n} \right] \quad (3, 4a)$$

mit der Hilfsfunktion

$$\varphi(\mathbf{r}) = e^{ik_0|\mathfrak{R}-\mathbf{r}|} / |\mathfrak{R}-\mathbf{r}|. \quad (3, 4b)$$

Das Volumenintegral in (3,4a), das über den Halbraum $x > x_0$ mit Ausnahme einer kleinen Kugel um den Aufpunkt \mathfrak{R} zu erstrecken ist, verschwindet wegen Gültigkeit der Wellengleichung für ψ und φ . Das über die kleine Kugelfläche zu erstreckende Oberflächenintegral liefert im Limes den Wert $-4\pi\psi(\mathfrak{R})$; in das über die Ebene $x = x_0$ zu erstreckende Oberflächenintegral setzen wir die nach (3,2) dort bekannte Funktion $\psi(\mathbf{r})$ und $\partial\psi/\partial n = -\partial\psi/\partial x = -ik_0\psi(\mathbf{r})$ ein. Damit folgt:

$$\psi(\mathfrak{R}) = \frac{1}{4\pi} \int_{(x=x_0)} d\sigma \left[\frac{\partial\varphi}{\partial n} + ik_0\varphi \right] \exp(i[k_0 x_0 + \Phi(\varrho)]). \quad (3, 5)$$

Dies ist die gesamte, d. h. einfallende + gestreute Welle. Subtrahiert man hiervon die erstere [für die man mit $\Phi(\varrho) = 0$ in (3,5) einen analog ge-

bauten Ausdruck erhält], so folgt für die Streuwelle:

$$\psi_{\text{Str.}}(\mathfrak{R}) = \frac{e^{ik_0 x_0}}{4\pi} \int_{(x=x_0)} d\sigma \left[\frac{\partial \varphi}{\partial n} + ik_0 \varphi \right] \left[e^{i\Phi(\varrho)} - 1 \right]. \quad (3,6)$$

In (3,6) erstreckt sich die Integration praktisch nur über einen kleinen Bereich der Ebene $x = x_0$ von atomarer Ausdehnung, außerhalb dessen der Integrand praktisch verschwindet. Es gilt daher unter Vernachlässigung von Gliedern der Ordnung $1/R$ und unter Berücksichtigung der Kleinheit von χ :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} \simeq ik_0 \varphi(\mathbf{r}) \cos \chi \simeq ik_0 \varphi(\mathbf{r}), \quad (3,7)$$

sowie im Exponenten von (3,4b) [mit Benutzung von Zylinderkoordinaten x_0, ϱ, γ für \mathbf{r}]:

$$\begin{aligned} |\mathfrak{R} - \mathbf{r}| &\simeq R - (x_0 \cos \chi + \varrho \cos \gamma \sin \chi) \\ &\simeq R - x_0 - \varrho \chi \cos \gamma, \end{aligned} \quad (3,8)$$

während es im Nenner von (3,4b) genügt, $|\mathfrak{R} - \mathbf{r}| = R$ zu setzen. Damit erhält man für (3,6):

$$\psi_{\text{Str.}}(\mathfrak{R}) = \frac{ik_0 e^{ik_0 R}}{2\pi R} \int_0^\infty \varrho d\varrho \int_0^{2\pi} d\gamma e^{-ik_0 \varrho \chi \cos \gamma} \left[e^{i\Phi(\varrho)} - 1 \right]. \quad (3,9)$$

Die Konstante x_0 ist dabei herausgefallen. Die Ausführung der Integration über γ führt auf die Bessel-Funktion J_0 . Nach Einsetzen in Gl. (1,3) für den Streuquerschnitt folgt daher:

$$Q(\chi) = k_0^2 \left| \int_0^\infty \varrho d\varrho J_0(k_0 \chi \varrho) \left[e^{i\Phi(\varrho)} - 1 \right] \right|^2. \quad (3,10)$$

Ist speziell χ und damit $\Phi(\varrho)$ klein, so kann man die Exponentialfunktion im Integranden von (3,10) entwickeln und kommt damit (bei Beschränkung auf kleine χ) wieder auf die Lösung (2,3) in Bornscher Näherung zurück. — Im folgenden § 4 werden wir das Ergebnis (3,10) in erweiterter, für Streuwinkel bis $\sim 90^\circ$ gültiger Form nochmals ableiten.

⁹ Vergl. A. Sommerfeld, Atombau und Spektrallinien II, S. 707, Braunschweig 1939.

§ 4. Lösung für alle χ und Streuwinkel bis $\sim 90^\circ$

Wir gehen jetzt aus von dem bekannten Verfahren, die einfallende ebene Welle $e^{ik_0 x} = e^{ik_0 r \cos \chi}$ nach Legendreschen Kugelfunktionen $P_l(\cos \chi)$ zu entwickeln und die durch das Potential $V(r)$ bei großen r verursachten Phasenverschiebungen Φ_l der Partialwellen verschiedener Drehimpulsquantenzahlen l zu bestimmen. Für die Streuwelle erhält man dann asymptotisch in bekannter Weise:

$$\psi_{\text{Str.}}(r, \chi) = \frac{e^{ik_0 r}}{ik_0 r} \sum_{l=0}^{\infty} \left(l + \frac{1}{2} \right) P_l(\cos \chi) \left[e^{i\Phi_l} - 1 \right]. \quad (4,1)$$

Um zunächst die Phasenverschiebungen Φ_l zu bestimmen, betrachten wir die zu l gehörige radiale Wellengleichung:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2(r) \right] R_l(r) = 0 \quad (4,2)$$

bzw. nach leichter Umformung:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{(l + \frac{1}{2})^2}{r^2} + k^2(r) \right] \sqrt{r} R_l(r) = 0. \quad (4,2')$$

Wir machen nun für die radialen Wellenfunktionen (z. B. im Fall der auslaufenden Wellen) den Ansatz

$$R_l(r) = A_l(r) e^{i\eta_l(r)},$$

wobei $A_l(r)$ eine hier nicht interessierende langsam veränderliche Amplitude und $\eta_l(r)$ die Phase einer rasch veränderlichen Funktion bedeutet. Die Bestimmung dieser Phase im Sinne der WKB-Methode⁹ führt auf einen Ausdruck der Form:

$$\eta_l(r) = \int_{(l+1/2)/k}^r dr \sqrt{k^2(r) - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}} - \frac{\pi}{4}. \quad (4,3a)$$

Als untere Integrationsgrenze ist dabei die Stelle r gewählt, wo der Integrand verschwindet. Gl. (4,3a) folgt nach der WKB-Methode insofern nicht ganz eindeutig, als an Stelle von $(l + 1/2)^2$ ebensogut $l(l+1)$ oder ein ähnlicher Ausdruck stehen könnte. Die Wahl in dieser Hinsicht wurde so getroffen, daß sich beim Übergang $k(r) \rightarrow k_0$ Übereinstimmung mit der folgenden, auf anderem

Wege erhaltenen Gl. (4,3b) ergibt, wodurch auch die additive Konstante in (4,3a) festgelegt ist. — Die strenge Lösung der (4,2') entsprechenden „Vakuum“-Gleichung mit k_0 an Stelle von $k(r)$ ist bekanntlich eine Zylinderfunktion mit dem Index $l + 1/2$, also z. B. für die auslaufende Welle:

$$\sqrt{r} R_l^{(0)}(r) = H_{l+1/2}^{(1)}(k_0 r).$$

Die Phase derselben kann für *alle* l und *genügend große* r aus der Debyeschen asymptotischen Darstellung der Zylinderfunktionen entnommen werden und lautet¹⁰:

$$\gamma_l^{(0)}(r) = \sqrt{x^2 - p^2} - p \arctg(\sqrt{x^2 - p^2}/p) - \pi/4$$

(mit $x = k_0 r$ und $p = l + 1/2$)

oder identisch in Form eines Integrals ausgedrückt¹¹:

$$\gamma_l^{(0)}(r) = \int_{(l+1/2)/k_0}^r dr \sqrt{k_0^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}} - \frac{\pi}{4}. \quad (4,3b)$$

Mit (4,3a u. b) können wir nun die Phasenverschiebung Φ_l in (4,1) wie folgt darstellen:

$$\Phi_l = 2 \lim_{r \rightarrow \infty} \left[\gamma_l(r) - \gamma_l^{(0)}(r) \right]. \quad (4,4)$$

(Der Faktor 2 in (4,4) rührt davon her, daß die gleiche Phasenverschiebung je einmal bei der einlaufenden und der auslaufenden Welle auftritt.) Wir erinnern nun daran, daß nach (1,2') $k(r) \simeq k_0(1 - \varepsilon)$ mit $\varepsilon = V(r)/\hbar k_0 r \ll 1$ ist; wir können daher $\gamma_l(r)$ in (4,4) bzw. (4,3a) nach dieser Größe ε entwickeln. Das Ergebnis dieser Entwicklung läßt sich mit Benutzung der in (2,2)

¹⁰ Vergl. Jahnke u. Emde, Funktionentafeln, 3. Aufl., S. 139 f.

¹¹ Wegen der formalen Übereinstimmung zwischen (4,3a) und (4,3b) dürfen wir für beide Formeln auch den gleichen Gültigkeitsbereich annehmen. Dies würde besagen, daß die WKB-Methode die Phasen $\gamma_l(r)$ für *alle* l und *große* r *asymptotisch von höherer Ordnung genau* und somit die Phasendifferenzen [im Limes großer r] *exakt* zu bestimmen gestattet. Dies sollte zum mindesten gelten, sofern sich [wie in unserem Falle] $k(r)$ nur wenig von k_0 unterscheidet. Wegen der großen praktischen Bedeutung für alle möglichen Streuprozesse wäre es sehr wünschenswert, für unsere Annahme einen strengen Beweis bzw. ein Kriterium ihrer Gültigkeit sowie eine allgemeine Vorschrift zur Festlegung der dem WKB-Verfahren anhaftenden Unbestimmtheit [die in unserem Falle durch den Vergleich mit der Phase der Debyeschen Reihen (4,3b) gelang] zu besitzen.

definierten Funktion $\Phi(q)$ wie folgt ausdrücken:

$$\Phi_l = \Phi\left(\frac{l + 1/2}{k_0}\right). \quad (4,4')$$

Setzt man nun in den Ausdruck (4,1) der Streuwelle das Ergebnis (4,4') für die Phasenverschiebungen Φ_l und zugleich für die Kugelfunktionen $P_l(\cos\chi)$ die asymptotische Formel (A,1) des math. Anhangs (vergl. auch die dortige Abb. 3, S. 145) ein, so nimmt (4,1) die Form einer Summe

$\sum_{l=0}^{\infty} f(l + 1/2)$ an, die nach der Eulerschen Summenformel mit guter Annäherung durch das

Integral $\int_0^{\infty} f(l) dl$ ersetzt werden kann¹², womit man erhält:

$$\psi_{\text{Str.}}(r, z) = \frac{e^{k_0 r}}{i k_0 r} \sqrt{\frac{z}{\sin z}} \int_0^{\infty} l dl J_0(lz) \left[e^{i \Phi(l/k_0)} - 1 \right]. \quad (4,5)$$

Geht man hierin von der Integrationsvariablen l zu $q = l/k_0$ ¹³ über und setzt das Ergebnis $\psi_{\text{Str.}}$ in Gl. (1,3) für den Wirkungsquerschnitt ein, so folgt für diesen:

$$Q(z) = k_0^2 \frac{z}{\sin z} \left| \int_0^{\infty} q dq J_0(k_0 z q) \left[e^{i \Phi(q)} - 1 \right] \right|^2. \quad (4,6)$$

Daß (4,6) gegenüber (3,10) tatsächlich eine Verbesserung darstellt, wird durch die folgende Betrachtung bestätigt: Das Rutherford'sche Grenzgesetz, in das der Streuquerschnitt bei großen Streuwinkeln χ (groß gegenüber den den Bereich des Abschirmungseinflusses charakterisierenden Winkelkonstanten χ_0 bzw. $\alpha\chi_0$; s. die Einleitung) übergeht, ergibt sich nach (3,10) in der (nur bei kleinen Winkeln brauchbaren) Näherungsform $(2\alpha/k_0)^2 \chi^{-4}$, nach (4,6) dagegen in der verbesserten Form

$$\left(\frac{2\alpha}{k_0}\right)^2 z^{-3} \sin^{-1} z$$

$$= \left(\frac{2\alpha}{k_0}\right)^2 z^{-4} \left[1 + \frac{z^2}{6} + \frac{6}{320} z^4 + \dots \right]. \quad (4,7)$$

¹² Diese Ersetzung ist um so genauer bei um so kleineren Streuwinkeln χ , bei denen um so mehr Glieder der Kugelfunktionsreihe praktisch mitwirken.

¹³ $q = l/k_0$ bedeutet anschaulich den dem Drehimpuls $l\hbar$ klassisch zugeordneten Stoßparameter.

Diese stimmt in den ersten beiden Gliedern der Potenzentwicklung nach χ^2 (und näherungsweise noch im folgenden Gliede) überein mit der exakten Rutherford-Formel

$$Q_{\text{Ruth.}}(\chi) = \left(\frac{2\alpha}{k_0}\right)^2 \left(2 \sin \frac{\chi}{2}\right)^{-4} \\ = \left(\frac{2\alpha}{k_0}\right)^2 \chi^{-4} \left[1 + \frac{\chi^2}{6} + \frac{7}{360} \chi^4 + \dots\right] \quad (4,7')$$

und weicht von dieser bei $\chi = 60^\circ$ erst um 0,5% und bei $\chi = 90^\circ$ um 3% ab. — Da nach unseren Voraussetzungen [vergl. (E,3'), S.135] der Einfluß der Abschirmung nur bei kleinen Winkeln beträchtlich ist, kann man (4,6) leicht zu einer im ganzen Winkelbereich gültigen Streuformel erweitern, indem man dort den Faktor $\chi/\sin \chi$ durch

$$\chi^4/(2 \sin \chi/2)^4 \equiv Q_{\text{Ruth.}}(\chi) \cdot (k_0/2\alpha)^2 \chi^4$$

ersetzt¹⁴:

$$\frac{Q(\chi)}{Q_{\text{Ruth.}}(\chi)} = \frac{(k_0 \chi)^4}{4 \alpha^2} \left| \int_0^\infty q \, dq \, J_0(k_0 \chi q) \left[e^{i\Phi(q)} - 1 \right] \right|^2 \quad (4,6')$$

Gl. (4,6') ist — insbes. auch bezüglich des Abschirmungseinflusses — in dem gleichen Winkelbereich [$\chi \lesssim 90^\circ$] gültig wie (4,6); sofern bei größeren Winkeln [$\chi > 90^\circ$] der Einfluß der Abschirmung vernachlässigbar klein ist, gilt (4,6') darüber hinaus praktisch im ganzen Winkelbereich.

§ 5. Der klassische Grenzfall [$\alpha \gg 1$]

Für den Nachweis, daß im Grenzfall großer α der klassische Streuquerschnitt gilt, beschränken wir uns auf den Gültigkeitsbereich der Gl. (3,10)

[kleine χ] und können uns im übrigen kurz fassen, da der allgemeine Fall bereits bei Mott und Massey³ behandelt worden ist.

Klassisch ist ein bestimmter Streuwinkel χ mit einem bestimmten Stoßparameter, sagen wir q_0 , verknüpft. Quantenmechanisch ergibt sich das gleiche im Grenzfall großer α wie folgt: Mit $\alpha \gg 1$ ist auch [abgesehen von großem q] $\Phi(q) \gg 1$ und damit die Exponentialfunktion $e^{i\Phi(q)}$ im Integranden von (3,10) rasch oszillierend, und zwar, da $\Phi(q)$ [vom Vorzeichen abgesehen] monoton fällt, um so rascher bei um so kleinerem q . Dem überlagern sich die Oszillationen der Bessel-Funktion J_0 in (3,10); es trägt daher praktisch nur ein kleiner Bereich der Integrationsvariablen q [wie sich zeigen wird, in unmittelbarer Umgebung des klassisch zu χ gehörigen Stoßparameters q_0], in dem die Oszillationen von J_0 diejenigen von $e^{i\Phi(q)}$ gerade aufheben, etwas zu dem Integral in (3,10) bei. — Das soeben Gesagte wird nur ungültig im Bereich großer q , in dem $\Phi(q) \rightarrow 0$ geht, und der für das Verhalten der Streufunktion im Grenzfall $\chi \rightarrow 0$ maßgeblich ist¹⁵. Beschränken wir uns dementsprechend auf endliche χ , so dürfen wir die Eins neben der Exponentialfunktion in (3,10) streichen [denn das damit weggelassene Teilintegral stellt die zweidimensionale δ -Funktion in der χ -Ebene dar und trägt bei endlichen χ nichts bei]. — In dem in Betracht kommenden Bereich von q ist das Argument der Bessel-Funktion J_0 von gleicher Größenordnung wie $\Phi(q)$ [genauer gesagt: wie $q d\Phi/dq$], weshalb die Bessel-Funktion durch ihre asymptotische Form ersetzt werden darf:

$$J_0(k_0 \chi q) \approx \frac{\cos(k_0 \chi q - \pi/4)}{\sqrt{\frac{\pi}{2} k_0 \chi q}} = \frac{\exp(i(k_0 \chi q - \pi/4)) + \exp(-i(k_0 \chi q - \pi/4))}{\sqrt{2\pi k_0 \chi q}} \quad (5,1)$$

Damit nimmt der Ausdruck (3,10) für den Streuquerschnitt die Form an:

$$Q(\chi) = \frac{k_0}{2\pi\chi} \left| \int_0^\infty \sqrt{q} \, dq \left\{ \exp(i[\Phi(q) + k_0 \chi q - \pi/4]) + \exp(i[\Phi(q) - k_0 \chi q + \pi/4]) \right\} \right|^2 \quad (5,2)$$

¹⁴ Eine andere formale, wenn auch weniger konsequente Möglichkeit, eine Streuformel zu erhalten, die zugleich bei kleinen Winkeln den Einfluß der Abschirmung richtig beschreibt und bei großen Winkeln in das exakte Rutherford-Gesetz übergeht, besteht darin, in (3,10) [ähnlich wie bei Gl. (2,3)] χ durch $2 \sin(\chi/2)$ zu ersetzen.

¹⁵ Für das Verhalten der Streuung bei $\chi \rightarrow 0$ ist vielmehr für jedes α die Bornsche Näherung zuständig. Wir legen jedoch auf die genaue Bestimmung dieses Verhaltens keinen Wert, da es von der genauen Ladungsverteilung im äußersten Bereich der Elektronenhülle abhängt, für den die Thomas-Fermi-Methode versagt, und der überdies durch Nachbaratome usw. beeinflusst wird.

Wir nehmen nun beispielshalber $\Phi(q) > 0$ an (Streuung eines negativ geladenen Teilchens). In diesem Falle liefert die erste Exponentialfunktion in der geschweiften Klammer von (5,2) praktisch keinen Beitrag. Die zweite Exponentialfunktion entwickeln wir im Sinne einer Sattelpunktmethode im Exponenten in der Umgebung der Stelle q_0 , wo dieser extremal ist. Für diese Extremalstelle gilt:

$$k_0 \chi = |\Phi'(q_0)|. \quad (5,3)$$

Dies ist die bereits in (3,3) erhaltene klassische Beziehung zwischen Streuwinkel und Stoßparameter (in der Näherung kleiner Winkel). Für den Streuquerschnitt (5,2) folgt, indem man zugleich $\sqrt{q} \approx \sqrt{q_0}$ vor das Integralzeichen zieht:

$$Q(\chi) = \frac{k_0 q_0}{2\pi\chi} \left| \int_0^\infty dq e^{i(q - q_0)^2 \Phi''(q_0)/2} \right|^2 \\ \approx \frac{k_0 q_0}{\pi\chi \Phi''(q_0)} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i x^2} \right|^2. \quad (5,4)$$

Dabei hat das Integral auf der rechten Seite den Wert $\sqrt{i\pi}$. Setzt man dies ein und bildet den Wirkungsquerschnitt für Streuung in den Raumwinkel zwischen χ und $\chi + d\chi$, so erhält man schließlich:

$$Q(\chi) \cdot 2\pi\chi d\chi = 2\pi q_0 \frac{k_0}{\Phi''(q_0)} \frac{d\chi}{dq_0} dq_0 = 2\pi q_0 dq_0. \quad (5,4')$$

Dabei ist benutzt, daß nach (5,3) $d\chi/dq_0 = \Phi''(q_0)/k_0$ ist. Die rechte Seite von (5,4') stellt in der Tat den klassischen Querschnitt für Streuung in den einem Stoßparameterbereich dq_0 bei q_0 zugeordneten Winkelbereich dar. — Für das Verhältnis von $Q(\chi)$ nach (5,4') zum Rutherford'schen Streuquerschnitt erhält man:

$$\left[\frac{Q(\chi)}{Q_{\text{Ruth.}}(\chi)} \right]_{(\chi \rightarrow \infty)} = \frac{q_0 k_0^3 \chi^3}{4\alpha^2 \Phi''(q_0)}, \quad (5,4'')$$

wobei q_0 gemäß (5,3) als Funktion von χ zu betrachten ist.

§ 6. Auswertung auf Grund des Thomas-Fermi-Potentials

Zur Auswertung der Ergebnisse der §§ 1 bis 5 setzen wir für das bisher noch weitgehend unbestimmt gelassene Potential $V(r)$ nunmehr nach Thomas und Fermi:

$$V(r) = \pm \frac{zZe^2}{r} \omega(r/a). \quad (6,1)$$

Dabei bedeutet $\pm ze$ die Ladung des gestreuten Teilchens, ferner $\omega(r/a)$ die Thomas-Fermische Funktion und $a = Z^{-1/3} \cdot 0,466 \cdot 10^{-8}$ cm die Thomas-Fermische Längeneinheit. Wir werden im folgenden alle Längen in der Einheit a messen und führen daher die reduzierten Längen $r' = r/a$ und $y = q/a$ ein. Damit nimmt die Phasenfunktion $\Phi(q)$ nach (2,2) die Gestalt an:

$$\Phi(ay) = \pm a \varphi(y), \quad (6,2)$$

wobei

$$\alpha = \frac{zZe^2}{\hbar v} = \frac{zZ}{137\beta} \quad (\beta = v/c) \quad (6,3)$$

den bereits eingeführten Parameter und $\varphi(y)$ die Funktion

$$\varphi(y) = 2 \int_y^\infty \frac{\omega(r') dr'}{\sqrt{r'^2 - y^2}} \quad (6,4)$$

bedeutet. Mit der gleichfalls schon benutzten Winkelkonstanten

$$z_0 = \frac{1}{\alpha k_0} = \frac{\lambda}{2\pi a} \quad (6,5)$$

lautet dann Gl. (4,6') für den Streuquerschnitt $Q(\chi)$ (bzw. dessen Verhältnis zum Rutherford'schen):

$$\frac{Q(\chi)}{Q_{\text{Ruth.}}(\chi)} = \frac{(\chi/z_0)^4}{4\alpha^2} \left| \int_0^\infty y dy J_0\left(y \frac{\chi}{z_0}\right) \left[e^{\mp i\alpha\varphi(y)} - 1 \right] \right|^2. \quad (6,6)$$

Man sieht übrigens, daß das Vorzeichen im Exponenten von (6,6) belanglos ist, d.h. das Ladungsvorzeichen des gestreuten Teilchens ist im Rahmen unserer Voraussetzungen ohne Einfluß auf den Streuquerschnitt.

§ 7. Analytische Darstellung der Thomas-Fermi-Funktion

Für die Thomas-Fermische Funktion $\omega(r')$ ¹⁶ führen wir nun die Darstellung

$$\omega(r') \simeq \sum_{i=1}^3 a_i e^{-b_i r'} \quad (7, 1a)$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} a_1 &= 0,1; & a_2 &= 0,55; & a_3 &= 0,35; \\ b_1 &= 6; & b_2 &= 1,2; & b_3 &= 0,3 \end{aligned} \quad (7, 1b)$$

ein. Der absolute Fehler dieser Darstellung bleibt für $0 \leq r' \lesssim 6$ unter 0,002¹⁷. Für die Phasenfunktion $\varphi(y)$ aus (6,4) erhält man damit auf Grund der bekannten Integraldarstellung der Hankel-Funktion nullter Ordnung und unter Benutzung der im Anhang (A,2) eingeführten Funktionen L_p :

$$\varphi(y) = 2 \sum_{i=1}^3 a_i L_0(b_i y) \quad (7, 2)$$

mit den gleichen Koeffizienten (7,1b). Die [im folgenden benötigten] ersten Glieder der Potenzreihenentwicklung von (7,2) lauten:

$$\varphi(y) = 0,516 - 2 \log y - 0,81 y^2 - 2,21 y^2 \log y + \dots \quad (7, 2')$$

Im Grenzfall kleiner α [entsprechend der Bornschen Näherung] kann die Exponential-

funktion im Integranden von (6,6) entwickelt werden; die Anwendung der Transformationsformel (A,3) des math. Anhangs ergibt dann unmittelbar:

$$\left[\frac{Q(z)}{Q_{\text{Ruth.}}(z)} \right]_{\alpha \rightarrow \infty} = \left(\frac{z}{z_0} \right)^4 \left(\sum_{i=1}^3 \frac{a_i}{b_i^2 + (z/z_0)^2} \right)^2 \quad (7, 3)$$

Die für den entgegengesetzten Grenzfall $\alpha \rightarrow \infty$ gültige Parameterdarstellung (5,4'') mit (5,3) nimmt in den neuen Einheiten die Gestalt an:

$$\left[\frac{Q(z)}{Q_{\text{Ruth.}}(z)} \right]_{\alpha \rightarrow \infty} = \frac{y}{4 \varphi''(y)} \left(\frac{z}{\alpha z_0} \right)^3; \quad \frac{z}{\alpha z_0} = \left| \varphi'(y) \right|. \quad (7, 4)$$

Zur Auswertung der ersten und zweiten Ableitung von $\varphi(y)$ gemäß (7,2) können bekannte Differentialformeln für die Zylinderfunktionen verwendet werden.

§ 8. Verhalten für alle α bei großem χ

Für das asymptotische Verhalten von Gl. (6,6) bei [im Vergleich zu χ_0 bzw. $\alpha \chi_0$] großem Argument χ kommt es nur auf das Verhalten von $\varphi(y)$ bei kleinem y an, so daß wir die Entwicklung (7,2') benutzen können. Ferner ist es wie im § 5 erlaubt, die Eins neben der Exponentialfunktion in (6,6) zu streichen. Damit ergibt (6,6) mit (7,2') und bei Entwicklung der Exponentialfunktion nach dem y^2 als Faktor enthaltenden Teil des Exponenten:

$$\frac{Q(z)}{Q_{\text{Ruth.}}(z)} = \frac{(z/z_0)^4}{4 \alpha^2} \left| \int_0^\infty y dy J_0 \left(y \frac{z}{z_0} \right) y^{-2i\alpha} [1 + i \alpha y^2 (-0,81 - 2,21 \log y)] \right|^2 \quad (8, 1)$$

und weiter nach Einführung der neuen Integrationsvariablen $x = y \chi / \chi_0$:

$$\frac{Q(z)}{Q_{\text{Ruth.}}(z)} = \frac{1}{4 \alpha^2} \left| \int_0^\infty x dx J_0(x) \left[x^{-2i\alpha} + \frac{i \alpha x^{2(1-i\alpha)}}{(z/z_0)^2} \left(-0,81 - 2,21 \log \frac{x}{z/z_0} \right) \right] \right|^2 \quad (8, 2)$$

Zur Auswertung dieses Ausdrucks benutzen wir die Formeln (A,4) und (A,4') des math. Anhangs

¹⁶ Vergl. E. Fermi, Z. Physik 48, 73 [1928]; ferner A. Sommerfeld, Atombau und Spektrallinien II, S. 690, Braunschweig 1939, und F. Perrin, Mécanique statistique quantique, Paris 1939.

¹⁷ Vom physikalischen Standpunkt ist die Darstellung (7,1a u. b) ebenso befriedigend wie die genaue Thomas-Fermi-Funktion, die bekanntlich nur eine Annäherung an die wirklichen Verhältnisse darstellt insofern, als sie die Schalenstruktur der Atomhüllen unterdrückt und überdies bei großem

Argument zu langsam (wie r'^{-3}) abfällt. — Über eine gewisse Willkür in der Wahl der Konstanten der Darstellung, insbesondere betreffs der Genauigkeit, mit der sie auch die Neigung und Krümmung der Thomas-Fermi-Funktion bei kleinem Argument wiedergibt, wurde sinngemäß und nach Zweckmäßigkeitsgründen verfügt. (Wohlgemerkt gelten die angegebenen engen Genauigkeitsgrenzen für die Funktion $\omega(r')$ selbst auch bei kleinem Argument r' ; dort allerdings nicht für ihre Ableitungen.)

mit $p = -i\alpha$ bzw. $p = (1 - i\alpha)$, womit folgt:

$$\frac{Q(\chi)}{Q_{\text{Ruth.}}(\chi)} = \left| 1 - \frac{4i\alpha(1-i\alpha)^2}{(\chi/\chi_0)^2} \left\{ -0,81 + 2,21 \left[\log \frac{\chi}{2\chi_0} - \Re \left(\Psi(i\alpha) \right) - \frac{1}{1-i\alpha} + \frac{1}{2i\alpha} \right] \right\} \right|^2 \quad (8,3)$$

und schließlich nach Ausführung des Absolutquadrates:

$$\frac{Q(\chi)}{Q_{\text{Ruth.}}(\chi)} = 1 - \frac{8,85}{(\chi/\chi_0)^2} \left\{ 1 + 4\alpha^2 \left[\log \frac{\chi}{2\chi_0} - \Re \left(\Psi(i\alpha) \right) - 1,12 \right] \right\}. \quad (8,4)$$

Die Funktion

$$\Re \left(\Psi(i\alpha) \right) = \frac{1}{2} \left(\Psi(i\alpha) + \Psi(-i\alpha) \right)$$

[vergl. math. Anhang (A, 5)] kann dabei mit größerer Genauigkeit [s. Anhang] ersetzt werden durch die Darstellung:

$$\Re \left(\Psi(i\alpha) \right) \approx \frac{1}{4} \log \left(\alpha^4 + \frac{\alpha^2}{3} + 0,13 \right), \quad (8,5)$$

womit (8,4) die in der Zusammenfassung angegebene Gestalt annimmt. Man überzeugt sich leicht, daß (8,4) im Grenzfall kleiner α in die entsprechende Entwicklung von (7,3) übergeht, während die für große α gültige Grenzform von (8,4) auch direkt aus (7,4) mit Benutzung von (7,2') abgeleitet werden kann.

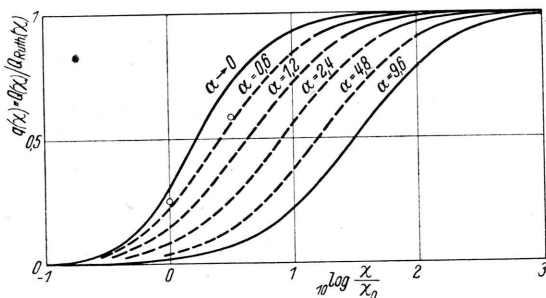


Abb. 2. Einfluß der Abschirmung auf den Streuquerschnitt $Q(\chi)$ für verschiedene Werte des Parameters α .

In Abb. 2 sind die Kurven $q(\chi) = Q(\chi)/Q_{\text{Ruth.}}(\chi)$ [mit $\log(\chi/\chi_0)$ als Abszisse] für den Grenzfall $\alpha \rightarrow 0$ sowie für eine Anzahl je um einen Faktor 2 sich unterscheidende α -Werte eingetragen. Die ausgezogenen Kurventeile wurden dabei nach (8,4), die beiden vollständig ausgezogenen Kurven nach (7,3) [für $\alpha \rightarrow 0$] und (7,4) [für $\alpha = 9,6$, wofür praktisch bereits der klassische Grenzfall gilt] berechnet. Die gestrichelten Kurventeile wurden durch Interpolation zwischen (7,3) und

(7,4) mit Hilfe von Formeln der Gestalt

$$\chi_q = \chi_0 \sqrt{A_q + B_q \alpha^2} \quad (8,6)$$

ermittelt, wobei χ_q denjenigen Winkel bedeutet, für den das Verhältnis $Q/Q_{\text{Ruth.}}$ jeweils einen festen Wert q annimmt. Die Zahlen A_q und B_q in (8,6) sind für eine Reihe von q -Werten in der folgenden Tabelle zusammengestellt.

q	A_q	B_q	q	A_q	B_q
0,05	0,102	0,059	0,5	2,75	10,85
0,1	0,209	0,214	0,6	4,68	22,8
0,2	0,525	0,891	0,7	8,71	50,8
0,3	0,977	2,31	0,8	19,5	128,8
0,4	1,675	5,20	0,9	61,7	421

Für $\alpha = 0,6$ [$\approx 82/137$ entsprechend der Streuung schnellster Elektronen an Blei] wurde Gl. (6,6) für zwei Argumente $\chi/\chi_0 = 1$ und $\chi/\chi_0 = \sqrt{10}$ direkt numerisch ausgewertet mit den respektiven Ergebnissen $q = 0,25$ und $q = 0,585$, die als Kreise in Abb. 2 eingetragen sind. Der Vergleich mit der entsprechenden Interpolationskurve zeigt, daß sich die zu mittleren α gehörigen Kurven bei kleineren q bzw. χ der Grenzkurve $\alpha \rightarrow 0$ etwas enger anschmiegen sollten, als es für die Interpolationskurven der Fall ist. Der Fehler in den Winkeln dürfte jedoch 10% nicht wesentlich überschreiten.

Für das asymptotische Verhalten bei großen χ wäre es auch möglich gewesen, an Stelle der Darstellung (7,1 a u. b) die bekannte (nach halbzahlgigen Potenzen von r' fortschreitende) Reihenentwicklung der genauen Thomas-Fermi-Funktion zugrunde zu legen. An Stelle von (7,2') führt dies auf die Entwicklung:

$$\varphi(y) = \text{const} - 2 \log y + 2,33 y^{3/2} + 0,91 y^{5/2} + \dots \quad (8,7)$$

(const fällt bei der weiteren Rechnung heraus.) In analoger Weise wie oben folgt daraus eine (8,4) entspr. asymptotische Formel für $q(\chi) = Q(\chi)/Q_{\text{Ruth.}}(\chi)$, die hier der Kürze halber nur für die beiden Grenzfälle kleiner und großer α mitgeteilt sei:

$$q(\chi)_{\alpha \rightarrow 0} = 1 - 2,51 (\chi_0/\chi)^{3/2} + 3,0 (\chi_0/\chi)^{5/2} - + \dots \quad (8, 8a)$$

und

$$q(\chi)_{\alpha \rightarrow \infty} = 1 - 17,3 (\alpha \chi_0/\chi)^{3/2} - 29 (\alpha \chi_0/\chi)^{5/2} + - \dots \quad (8, 8b)$$

(8, 8a) ergibt für $q(\chi) \gtrsim 0,9$ bis auf Bruchteile eines Prozent genau den gleichen Verlauf wie (7, 3) [bzw. wie (8, 4) für $\alpha = 0$]. Entsprechendes gilt auch für (8, 8b) für den Grenzfall großer α , allerdings erst für $q(\chi) \gtrsim 0,98$; um in einem weiteren Bereich brauchbar zu sein, müßte (8, 8b) durch weitere Entwicklungsglieder ergänzt werden. — Damit ist genügend sichergestellt, daß die Genauigkeit der auf der Darstellung (7, 1) beruhenden asymptotischen Formel (8, 4) im Rahmen der Gültigkeit der Thomas-Fermi-Theorie ausreicht (vergl. Anm. 17).

§ 9. Vereinfachte Darstellung von $Q(\chi)$ für die Theorie der Vielfachstreuung

Für die in der II. Mitteilung zu behandelnde statistische Theorie der Mehrfach- und Vielfachstreuung wird es — sofern *Vielfachstreuung* vorliegt, d. h. bei genügend großer Dicke der streuenden Materieschicht — genügen, den Einfluß der Abschirmung auf den differentiellen Streuquerschnitt $Q(\chi)$ durch eine einzige Konstante, den „Abschirmungswinkel“ χ_a zu charakterisieren, und zwar wird es bequem sein, zu setzen¹⁸:

$$q(\chi) \equiv Q(\chi)/Q_{\text{Ruth.}}(\chi) = \chi^4/(\chi^2 + \chi_a^2)^2. \quad (9, 1)$$

Zur Festlegung des „Abschirmungswinkels“ χ_a in Gl. (9, 1) als Funktion des Parameters α soll die folgende Bedingung dienen: Es sei $\chi_g (\gtrsim \chi_a)$ ein praktisch im Gültigkeitsbereich des Rutherford'schen Grenzesetzes liegender, im übrigen aber willkürlich gewählter Grenzwinkel. Der von Einzelstreu winkeln $\chi < \chi_g$ herrührende Beitrag zu dem auf Vielfachstreuung beruhenden mittleren Winkelquadrat ist [abgesehen von einem der durchstrahlten Schichtdicke proportionalen konstanten Faktor] definiert durch das Integral:

$$\int_0^{\chi_g} Q(\chi) \chi^2 \sin \chi \, d\chi, \quad (9, 2)$$

¹⁸ Die Einzelheiten des durch (9, 1) gegebenen Funktionsverlaufes sind für den vorgesehenen Zweck belanglos. Statt (9, 1) hätte z. B. ebensogut eine Stufenfunktion verwendet werden können, die plötzlich von Null auf Eins springt, und zwar, um mit der folgenden Bedingung im Einklang zu sein, an der Sprungstelle $\sqrt{e'} \chi_a$.

das seinerseits proportional ist zu dem Integral:

$$\int_{-\infty}^{\log \chi_g} q(\chi) \, d(\log \chi) = \frac{1}{2} \left[\log \frac{\chi_g^2}{\chi_a^2} - 1 \right]. \quad (9, 2')$$

Man erkennt dies, indem man in (9, 2) $Q(\chi) = Q_{\text{Ruth.}}(\chi) \cdot q(\chi)$ einsetzt und dabei für $Q_{\text{Ruth.}}(\chi)$ die bis $\sim 90^\circ$ gültige Näherungsform (4, 7) benutzt. [In der II. Mitteilung werden wir uns allerdings auf Streuwinkel bis $\sim 20^\circ$ beschränken. Das Integral in (9, 2') bedeutet übrigens anschaulich den von der betreffenden Kurve im Diagramm der Abb. 2 überdeckten Flächeninhalt.] Die rechte Seite von (9, 2') folgt durch Einsetzen von $q(\chi)$ nach (9, 1) unter Berücksichtigung, daß $\chi_a \ll \chi_g$ ist. — Die genannte Bedingung besteht nun darin, χ_a so festzulegen, daß die Gl. (9, 2') erhalten bleibt, wenn für $q(\chi)$ in (9, 2') der zu dem jeweiligen Wert von α gehörige) *genaue* Funktionsverlauf, wie er in den vorhergehenden Abschnitten berechnet wurde, eingesetzt wird. Der dieser Bedingung genügende „Abschirmungswinkel“ χ_a kann als Funktion von α mit ausreichender Näherung durch eine Interpolationsformel der Gestalt (8, 6), und zwar

$$\chi_a = \chi_0 \sqrt{1,13 + 3,76 \alpha^2} \quad (9, 3)$$

dargestellt werden.

Mathematischer Anhang

1. Durch Kombination der bekannten asymptotischen Darstellungen durch trigonometrische Funktionen der Legendreschen Kugelfunktionen P_l einerseits und der Bessel-Funktion J_0 andererseits¹⁹ erhält man als asymptotischen Ausdruck für die ersteren:

$$P_l(\cos \chi) \approx \sqrt{\chi/\sin \chi} J_0([l + 1/2] \chi), \quad (A, 1)$$

der zugleich als Verallgemeinerung der bekannten Grenzbeziehung $J_0(x) = \lim_{l \rightarrow \infty} P_l(\cos x/l)$ betrachtet werden kann. (A, 1) gilt einerseits für beliebige $\chi < \pi$ im Limes großer l und andererseits für alle l im Limes kleiner χ . Wie gut diese Darstellung selbst für kleine l und $\chi \lesssim \pi/2$ brauchbar ist, zeigt Abb. 3, in der die Kugelfunktionen für

¹⁹ Vergl. Jahnke-Emde, Funktionentafeln, 3. Aufl. S. 117 u. 138.

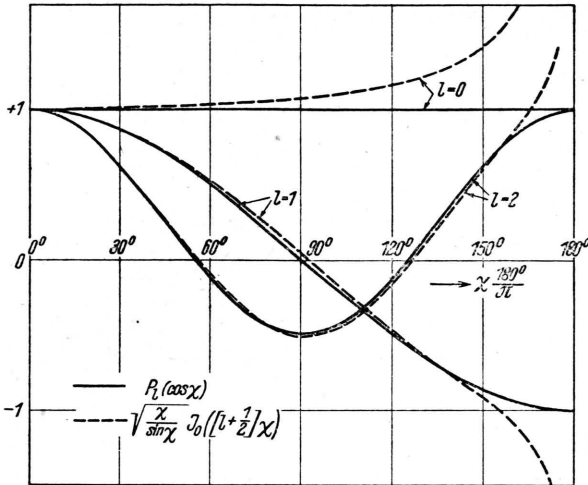


Abb. 3. Vergleich der Kugelfunktionen $P(\cos \chi)$ mit ihrer Darstellung nach (A,1) für $l=0, 1$ und 2 .

$l=0, 1$ und 2 mit den entsprechenden Darstellungen nach (A,1) verglichen sind [Fehler für $l=0$ und $\chi=\pi/2$ etwa 7%].

2. Setzt man zur Abkürzung:

$$L_p(x) \equiv \frac{\pi}{2} \left(\frac{\gamma}{2}\right)^p \frac{i^{p+1}}{p!} H_p^{(1)}(ix), \quad (\text{A}, 2)$$

wobei $H_p^{(1)}$ die Hankelsche Funktion erster Art bedeutet [Bezeichnung nach Jahnke-Emde], so gilt für $p > -1$ die Transformationsformel²⁰:

$$\int_0^\infty x dx J_0(xy) L_p(x) = (1+y^2)^{-(p+1)}, \quad (\text{A}, 3)$$

sowie deren „Fourier-Umkehrung“²¹:

$$\int_0^\infty y dy J_0(xy) (1+y^2)^{-(p+1)} = L_p(x). \quad (\text{A}, 3')$$

3. Es gilt für alle p :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty y dy J_0(xy) \left(\frac{y^2}{4}\right)^p &= \frac{2p!}{(-p-1)!} x^{-2(p+1)} \\ &= -\frac{2}{\pi} \sin \pi p p!^2 x^{-2(p+1)}, \end{aligned} \quad (\text{A}, 4)$$

²⁰ Vergl. z. B. G. N. Watson, Bessel Functions.

²¹ Ein gewöhnliches zweidimensionales Fourier-Integral einer zylindersymmetrischen Funktion geht bei Einführung ebener Polarkoordinaten und Ausführung der Integration über den Azimutwinkel in ein J_0 -Integral der hier betrachteten Art über.

woraus durch Differenzieren nach p die weitere Formel folgt:

$$\int_0^\infty y dy J_0(xy) \left(\frac{y^2}{4}\right)^p \log \frac{y^2}{4} = \frac{2p! x^{-2(p+1)}}{(-p-1)!} \left[-2 \log x + \Psi(p) + \Psi(-p-1) \right]. \quad (\text{A}, 4')$$

Speziell für ganzzahliges n erhält man ferner durch einen entsprechenden Grenzübergang die Formel:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty y dy J_0(xy) \left(\frac{y^2}{4}\right)^n \log \frac{y^2}{4} \\ = (-1)^n 2n!^2 x^{-2(n+1)}. \end{aligned} \quad (\text{A}, 4'')$$

4. Der Realteil der logarithmischen Ableitung von $p!$ bei rein imaginärem Argument

$$\Re(\Psi(iy)) \equiv \frac{1}{2} [\Psi(iy) + \Psi(-iy)]$$

wird in Strenge durch die für alle y konvergente Reihe dargestellt:

$$\Re(\Psi(iy)) = -\log \gamma + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n(1+n^2/y^2)}, \quad (\text{A}, 5)$$

wobei $\log \gamma = 0,577\dots$ die Eulersche Konstante bedeutet. Bei kleinem y gilt ferner die Potenzentwicklung:

$$\begin{aligned} \Re(\Psi(iy)) &= -(1+y^2)^{-1} + 0,4228 + 0,2021 y^2 \\ &\quad - 0,03693 y^4 + \dots \end{aligned} \quad (\text{A}, 5')$$

und bei großem y die asymptotische Formel:

$$\Re(\Psi(iy)) \approx \log y + \frac{1}{12y^2}. \quad (\text{A}, 5'')$$

Die hieran anschließende Näherungsdarstellung (8,5) wurde so gewählt, daß $\alpha^2 \Re(\Psi(i\alpha))$ möglichst genau dargestellt wird, und zwar beträgt der maximale Fehler für diese Funktion etwa 0,003 und liegt etwa an der Stelle $\alpha^2 = 0,1$.

Weitere Arbeiten über die Streutheorie und die Theorie der Höhenstrahlung, die im wesentlichen während des Kriegs entstanden sind, sollen folgen. — Hrn. Prof. Dr. W. Heisenberg möchte ich herzlich für das große Interesse danken, mit dem er seinerzeit die Entstehung dieser Arbeiten verfolgt und mit Rat und aktiver Mitarbeit gefördert hat.