

$$n = \frac{\varphi(s_1, \tau) - \varphi(s_0, \tau)}{2\pi} = \frac{\omega(s_1) - \omega(s_0)}{2\pi a v'} \quad (4, 13)$$

$$\approx \frac{\omega' S \cdot}{2\pi a v'} \approx \frac{1}{2\pi a}.$$

Natürlich ist diese Abschätzung sehr roh. Empirisch liegt n meist zwischen $1/2$ und 1 . Für den Andromeda-Nebel mag $n=1$ richtig sein, also $\beta \approx 1/40$. Es ergibt sich für v_s nun folgende Tabelle:

s	$6'$	$20'$	$50'$	$100'$	
v_s	-35	$+5$	-2	$+3$	km/sec.

(4, 14)

Die Werte für die drei inneren Punkte geben vielleicht in Wahrheit nur an, wie groß die Geschwindigkeit sein müßte, welche der Druckgradient in der umgekehrten Richtung erzeugen würde, wenn er nicht gegen die Wirkung der Reibung gerade kompensiert würde. Der Wert für $100'$ hingegen ist die wahre Geschwindigkeit des Abströmens. Eine Strecke von $100'$ oder $2 \cdot 10^{22}$ cm wird mit dieser Geschwindigkeit in $6 \cdot 10^{16}$ sec oder

$2 \cdot 10^9$ a zurückgelegt. Also ist das Alter, das der Nebel bei diesem Tempo der Auflösung erreichen kann, vergleichbar dem Alter der Welt, wie schon in 1 [K] nach einer ungenauer begründeten Formel geschlossen wurde.

Zum Abschluß sei eine Frage an die Erfahrung aufgeworfen: In 1 [K] wurde die Überlegung von W. Heisenberg und dem Verfasser dargestellt, nach der die Spiralstruktur die Folge einer Verzerrung von stets neu gebildeten Wolken durch die differentielle Rotation des Spiralnebels ist. Wenn diese Überlegung richtig ist, so müßte aus dem Babcock'schen Rotationsgesetz des Andromeda-Nebels folgen, daß auf der Innenseite des Rings, wo die wirkliche Geschwindigkeit nach außen zunimmt, die Spiralstruktur den umgekehrten Drehsinn zeigt wie außen. Es ist mir auf den mir zugänglichen Bildern des Nebels nicht gelungen, die Struktur in dieser inneren Region so deutlich zu sehen, daß diese Frage mit Ja oder Nein hätte beantwortet werden können. Es wäre lohnend, sie mit den besten verfügbaren Hilfsmitteln nachzuprüfen.

Zur Deutung der Interferenzen langsamer Elektronen

Von ERWIN FUES

Aus dem Institut für theoretische und angewandte Physik der Techn. Hochschule Stuttgart
(Z. Naturforschg. 3 a, 539—543 [1948]; eingegangen am 14. August 1948)

Für die von Davisson und Germer¹ mitgeteilten Anomalien der Braggschen Reflexion langsamer Elektronen am Nickel-Einkristall war nach einer unvollständigen Theorie von Morse² anzunehmen, daß sie als dynamische Beugungswirkung mehrerer verkoppelter Strahlen zu deuten seien. Da die zugrunde liegenden Vielstrahlprobleme eine vollständige Durchrechnung auf Grund der dynamischen Beugungstheorie nicht erlauben, so wird wenigstens gezeigt, daß die Reflexe gut in demjenigen Bereich liegen, in welchem sie nach einer genäherten Abschätzung zu erwarten sind. Am (444)-Reflex wird berechnet, daß die dynamische Kopplung mit (335) den theoretisch zu erwartenden Charakter hat.

In den ersten Jahren nach Davissons und Germers Entdeckung der Elektroneninterferenzen wurden ziemlich viele Beugungsversuche mit langsamen Elektronen (im Bereich einiger hundert e-Volt) angestellt. Insbesondere haben Davisson und Germer¹ selbst Elektronen mit einer Energie E zwischen 60 und 600 e-Volt in Braggscher Anordnung parallel zur (110)-Ebene an der (111)-Oberfläche eines Nickel-Einkristalls

in verschiedenen Ordnungen n reflektieren lassen und dabei die Braggsche Beziehung

$$n \lambda_i = 2 d \cos \Theta_i \quad (1)$$

geprüft. Dabei konnte versuchsweise die Brechung beim Ein- und Austritt in den Kristall durch

$$\lambda_a = \mu \lambda_i, \quad \sin \Theta_a = \mu \sin \Theta_i$$

(Θ_a, Θ_i die Winkel gegen das Lot auf der Grenzfläche),

$$\mu = \sqrt{1 - \bar{U}/E} > 1$$

¹ C. J. Davisson u. L. H. Germer, Proc. Nat. Acad. Sci. USA 14, 624 [1928].

² P. M. Morse, Physic. Rev. 35, 1310 [1930].



(= mittlerer Brechungsindex des Kristalls entspr. der mittleren potentiellen Energie $\bar{U} < 0$ der Elektronen im Kristall) berücksichtigt werden, so daß

$$\lambda_a = \mu \frac{2d}{n} \sqrt{1 - \frac{1}{\mu^2} \sin^2 \Theta_a} \quad (2)$$

$$\cong \mu \frac{2d}{n} \cos \Theta_a \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\mu^2 - 1}{\mu^2} \sin^2 \Theta_a + \dots \right)$$

zu erwarten war. Von dieser annähernd linearen Abhängigkeit der Größe λ_a von $\cos \Theta_a$ weichen nun die in Abb. 1 wiedergegebenen Beobachtungen

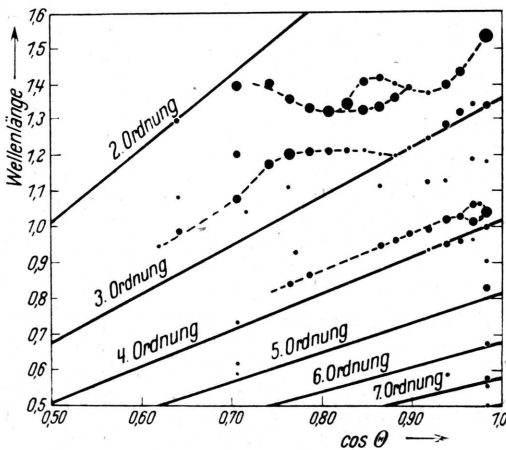


Abb. 1. Darstellung der von Davisson und Germer bei regulärer Reflexion an Ni(111) beobachteten Interferenzen, verglichen mit der Erwartung nach dem Bragg'schen Gesetz. Die Fläche der Punkte entspricht der Intensität der Interferenz.

stellenweise erheblich ab, wie die Meßpunkte zeigen, die über den theoretischen Geraden für $\mu = 1$ eingetragen sind.

Obwohl eine Arbeit von P. M. Morse² gezeigt hat, daß eine dynamische Theorie der Elektronenbeugung ähnliche Störungen der Bragg-Beziehung vorhersehen läßt (vgl. seine Fig. 7, S. 1322, sowie³), sobald neben der (111)-Ebene noch mindestens eine weitere Netzebenenschar in Reflexionsstellung kommt, also ein 3- oder Mehrstrahlproblem vorliegt, ist diese Erscheinung doch weder theoretisch noch experimentell weiter verfolgt worden. Der Morsesche Versuch konnte nicht befriedigen, denn er war mit einem willkürlich vereinfachten und unzulänglichen Ansatz für das periodische Gitterpotential $U(\mathbf{r})$ im Kristall unternommen.

³ Handb. d. Experimentalphysik, Ergänzungsbd. 2, S. 98.

Dementsprechend sind seine theoretischen Kurven zwar etwa in denselben Bereichen wie die Abb. 1 „gestört“, doch stimmen sie in den Einzelheiten keineswegs mit den Beobachtungen überein. Außerdem sind einzelne Folgerungen über den Strahlengang der kohärenten Streuung wenig glaubhaft, z. B. die auf S. 1323 aus dem speziellen Modell gefolgerte Rückwärtsstreuung in die umgekehrte Primärriechtung. Experimentell sind Beugungsversuche mit langsamen Elektronen einerseits, wegen der hartnäckigen Verunreinigung der Oberflächen, mit großen Schwierigkeiten verknüpft, und andererseits so lange unbefriedigend, als die auffälligen Abweichungen vom Bragg'schen Gesetz nicht sinnvoll gedeutet sind. Es ist deshalb über solche Arbeiten seit Jahren recht still geworden. Und doch wären sie, wie hier gezeigt werden soll, geeignet, interessante Aufschlüsse über die Energiefläche $E(\mathbf{f})$ der Elektronenzustände im Kristall zu geben. Aus ihr leitet die Elektronentheorie der Gitter bekanntlich alle wesentlichen Aussagen über deren physikalische Eigenschaften ab, freilich im Bereich kleiner negativer Energien der Valenzelektronen. Die experimentelle Ausmessung der Energiefläche dort wäre demgemäß von allergrößtem Wert. Demgegenüber ist die hier angebotene Auskunft in einem Energiebereich, der um einige hundert Volt höher liegt, zunächst von geringem praktischem Nutzen. Wenn man aber daran gelernt hat, Energieverläufe im Kopplungsbereich mehrerer Strahlen richtig zu sehen, so kann das auch für das Gebiet der chemischen Bindung von Nutzen sein.

Es soll nun gezeigt werden: erstens, daß die Kurven der Abb. 1 in gewissem Sinn direkte Umriss der Energiefläche zu erkennen erlauben, und zweitens, daß der bekannte erste Näherungsschritt der dynamischen Beugungstheorie ausreicht, um diese Umriss in einfachen Fällen zu verstehen.

1. Die Beugungsfigur als Projektion der Energiefläche. Frühere Arbeiten des Verf. haben darauf hingewiesen, daß die Energiefläche $E = E(\mathbf{f})$ sich anschmiegt an die Hyperparaboloide

$$(\mathbf{f} - \mathbf{g})^2 = E - \bar{U}, \quad (3)$$

wobei unter $\mathbf{g}, \mathbf{h}, \dots$ Gittervektoren des 2π -fach vergrößerten reziproken Gitters zu verstehen sind. Sie weicht allerdings der Durchdringung je zweier von ihnen aus, derart, daß die Durch-

dringungskante abgerundet erscheint. Dadurch entsteht eine vielschalige Hyperfläche, deren verschiedene Zweige sich (in der Gegend der Kanten) einander nähern, aber niemals vereinigen. Man erhält aber eine in nullter Näherung ausreichende Vorstellung von ihr, wenn man einfach den Hyperparaboloiden³ folgt.

Im Fall der Beugungsaufnahmen von Davisson und Germer ist dies ohne weiteres anschaulich zu machen, weil alle einfallenden Strahlen in derselben Ebene (110) liegen, so daß es nur auf den Verlauf $E(\mathbf{f})$ über dieser \mathbf{f} -Ebene ankommt, der dreidimensional dargestellt werden kann. Wir können z. B. die Einfallsebene als $k_x k_y$ -Ebene eines cartesischen Koordinatensystems einführen und die Darstellung der Energiefläche auf ihren Schnitt $k_z = 0$ beschränken. In der „ \mathbf{f} -Kurve“ der Abb. 2 ist für eine bestimmte Energie E der einfallenden Elektronen angedeutet, wie etwa ein Stück dieses Schnitts aussehen kann. Drei der Paraboloid-Durchdringungskanten erzeugen in der Zeichenebene $k_z = 0$ die Spurpunkte A, B und C. In ihrer Umgebung sind mögliche Abrundungen der \mathbf{f} -Kurve angedeutet.

Totalreflexion im Braggsehen Sinn an der Kristalloberfläche findet dann statt, wenn die Randbedingung gleicher Tangentialkomponente k_x außen und innen zu einem komplexen \mathbf{f} im Innern des Kristalls führt, d. h. wenn das Lot von der Pfeilspitze \mathbf{f}_a senkrecht zur Kristalloberfläche in eine Lücke der \mathbf{f} -Kurve im Innern fällt. Es gibt im Fall der Kanten A und B daher einen Bereich $\Delta k_x = 1, 2$ bzw. $3, 4$ der Tangentialkomponenten (und eine entsprechende endliche Breite des „Glanzwinkels“ bzw. ein $\Delta\theta_a$ des Einfallswinkels), innerhalb deren die Oberflächenreflexion anspricht. Anders bei C, wo die entsprechenden Verhältnisse für den Laue-Fall angedeutet sind, was in Abb. 2 dadurch zum Ausdruck kommt, daß man in Richtung des Einfallslots nicht in die Lücke der Energiefläche hineinsehen kann.

Denkt man sich nun solche Schnitte $E = \text{const}$ für eine Folge diskreter E -Werte übereinandergeschichtet, so entsteht — immer im Schnitt $k_z = 0$ — aus Höhenkurven die Energiefläche $E(k_x, k_y)$. Betrachtet man sie in der Blickrichtung der Achse k_y , so entsteht eine Umrißfigur, in welcher zwischen den Zweigen der Fläche die Totalreflexionsbereiche als schmale Schlitz sichtbar werden. Sie folgen, allgemein gesprochen, der Projektion solcher Schnittparabeln zweier Flächen (3) für $k_z = 0$

auf die k_x - E -Ebene, in deren Lücken man von der negativen k_y -Achse her hineinsehen kann. Doch haben sie erstens eine endliche Breite um diese Linien herum und erfahren zweitens bei gegenseitiger Durchdringung weitere Deformationen, die sich grundsätzlich aus der bekannten ersten Näherung der dynamischen Beugungstheorie bei Koppelung mehrerer Strahlen berechnen lassen.

In Abb. 3 sind nun zunächst die Beobachtungen Davissons und Germers aus der $\lambda_a \cos \Theta_a$ -Darstellung in die Koordinaten $E = \hbar^2/2m \lambda_a^2$, $k_x = k_{ax} = k_a \cos \Theta_a = \cos \Theta_a / \lambda_a$ übertragen, und zweitens diejenigen Projektionen von Schnittparabeln ein-

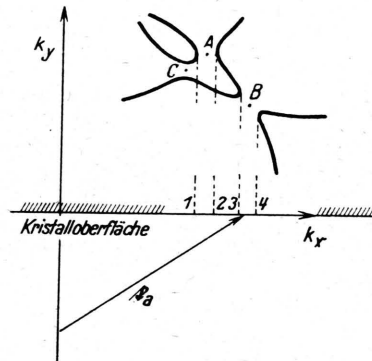


Abb. 2. Schnitt $E = \text{const}$, $k_z = \text{const}$ durch die Energiefläche, schematisch.

getragen, längs welcher sich Totalreflexionsbereiche erstrecken. (Dabei ist abweichend von Bethe⁴ ein mittleres Gitterpotential $U \cong 18$ eV zugrunde gelegt.) Die Schnittparabeln zweier Flächen (3) für die Indizes g und h mit $k_z = 0$ sind nebenbei durch $(g_1 g_2 g_3) \times (h_1 h_2 h_3)$ kenntlich gemacht. Stark hervorgehoben sind die beiden Parabeln, welche mit $g = (000)$ und $h = (333)$ bzw. (444) den Reflex 3. und 4. Ordnung an der (111)-Oberfläche führen. Sie werden von den Totalreflexionsbereichen dieser Interferenzen umhüllt, und tatsächlich folgen ihnen die Meßpunkte zum großen Teil recht gut. Doch sind darüber hinaus Stücke weiterer Parabeln eingezeichnet, welche die ersten an den Stellen von Mehrfachbeugung schneiden und längs welcher die Totalreflexionsbereiche anderer Netzebenenscharen sich erstrecken. In der Umgebung des Schnittpunkts kann der Oberflächenreflex auch ihnen folgen, wie das z. B. bei der (444)-Interferenz an der Grenze kleiner Einfallswinkel geschieht. Er kommt dabei,

⁴ H. Bethe, Ann. Physik 87, 123 [1928].

weil gleichzeitig mehrere Netzebenenscharen ins Spiel treten, auf dem Umweg über die Interferenz (335) zustande, die nachträglich an der Netzebene (111) in die Richtung (444) gespiegelt wird. Die

tive Ausrechnung ist im Fall der Kopplung vieler Strahlen so mühsam, daß der notwendige Rechenaufwand sich kaum rechtfertigen läßt.

Im Hauptstörungsbereich CD des (333)-Reflexes

sind die Totalreflexionsbereiche sämtlicher Nebeninterferenzen (durch ihre Leitparabeln) eingetragen. Man erkennt, daß die beobachteten Reflexe nicht beliebig streuen, sondern, mit einer gewissen Auswahl und Unschärfe, ihrer Führung folgen. Man erkennt aber nicht, nach welchen Gesichtspunkten die Auswahl stattfindet. Die große Zahl projizierter Parabeln — (es sind nur die gezeichnet, in deren Lücke man hineinsehen kann!) — läßt deutlich die Menge der Störreflexe hervortreten; tatsächlich liegen neben zahlreichen Kopplungsfällen geringerer Vielfachheit ein Achtstrahlfall und eine Kopplung von neun Strahlen auf diesem kurzen Stück. Rechnerisch ist dem nicht beizukommen. Experimentell ließen sich aber die Verhältnisse leicht einfacher gestalten, wenn die Einfallsebene aus ihrer hochsymmetrischen Lage herausgedreht würde. Man kann erwarten, daß die große Zahl schwacher Störungen dann kaum zu bemerken ist, während wenige starke Kopplungen in der Form von Dreistrahlsystemen auftreten, welche der Rechnung noch zugänglich sind.

Am auffallendsten vom Standpunkt eines rohen theoretischen Verständnisses ist der Zweig von Beobachtungspunkten, der zur Stelle A der Abb.3 führt. Sie

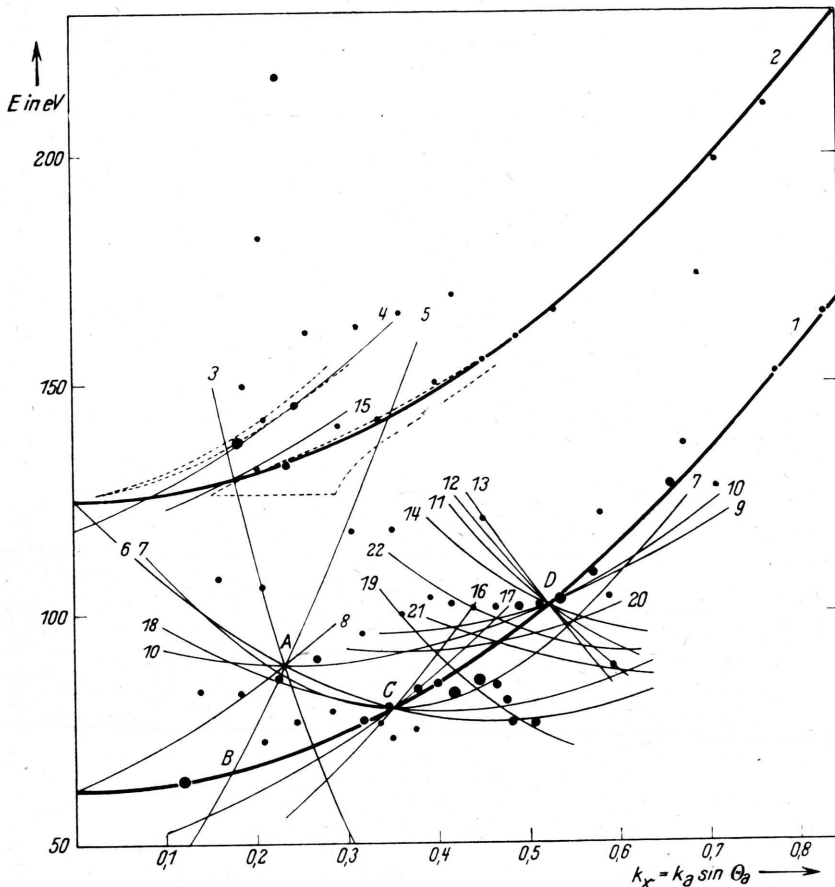


Abb. 3. Umgezeichnete Darstellung der Interferenzen aus Abb. 1 im Vergleich mit den projizierten Umrissen der Energiefläche in nullter Näherung. Andeutung der ersten Näherung für den Reflex (444). Die eingezeichneten Parabeln sind die projizierten Schnitte der folgenden Hyperparaboloide vom Typus (3):

1 000×333	7 400×313	333 $\times 511$	18 400×333
2 000×444	8 000×224	12 333×442	19 422×333
3 000×222	9 000×511	13 333×442	20 000×531
4 000×335	10 000×442	14 000×511	202 $\times 333$
5 000×002	11 000×442	15 111×444	21 202×531
6 000×440	333 $\times 333$	16 000×113	22 000×531
400 $\times 440$	333 $\times 511$	17 000×133	

starke Beugungskopplung der dynamischen Theorie erklärt mühelos, daß dies noch in einem beträchtlichen Abstand vom Schnitt beider Parabeln geschieht. Sie versteht auch qualitativ, daß beträchtliche Abweichungen von den Parabelverläufen zustande kommen können. Aber die quantita-

entspricht, wie man schon aus der Schar dorthin zielender Parabeln erkennt, wiederum einer Vielstrahlkopplung, bei welcher aber nicht unmittelbar der Reflex (333) zustande kommen sollte. Daß er es dennoch tut, mag darauf beruhen, daß die von (333) herkommenden Parabeln ihre

Kopplung an die Interferenz (333) soweit noch mit sich führen; eine Übersichtsrechnung läßt dies durchaus als möglich erscheinen. Im ganzen zeigt Abb. 3, daß Reflexe in der Nachbarschaft von Vielstrahlkopplungen bevorzugt werden, d. h. mit besonders großer Intensität auftreten. Es wäre zu wünschen, daß durch neue systematische Versuche Unterlagen für eine mögliche Berechnung geschaffen, dabei auch die Glanzwinkelbreite und -höhe gemessen und die bei Kopplung mehrerer Strahlen auftretenden Nebeninterferenzen mitgemessen würden.

2. Der einfache Verlauf der Verzweigungsstelle des Reflexes (444) legt die Vermutung nahe, daß, praktisch gesprochen, hier ein Dreistrahlfall vorliegt, obwohl theoretisch viele Nebeninterferenzen in dem betreffenden Gebiet ins Spiel treten. Die genaue Nachprüfung zeigt auch, daß sie alle schwach angekoppelt (und deshalb in der Zeichnung weggelassen) sind, mit Ausnahme der Interferenz (335), welche durch die starke Strukturamplitude $S_{11\bar{1}}$ mit (444) in Wechselwirkung tritt. Nach H. Bethes Abschätzung⁵ legen wir der Rechnung die Strukturamplituden zugrunde

$$S_{444} = 0,59 \text{ \AA}^{-2}, \quad S_{335} = 0,66 \text{ \AA}^{-2}, \quad S_{11\bar{1}} = 35,7 \text{ \AA}^{-2}. \quad (4)$$

(Dabei bedeutet $S_{\bar{g}} = S_{-g}$ die reelle Fourier-Amplitude des Streuvermögens $S(\tilde{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2} U(\tilde{r}) = +\frac{2me}{\hbar^2} V(\tilde{r})$ des zentralsymmetrischen, kubisch flächenzentrierten Ni-Gitters, in welchem das dreifach periodische elektrische Potential $V(\tilde{r})$ herrscht.)

Im Bereich der Wechselwirkung dieser drei Strahlen wird die Energiefläche nach früheren Arbeiten des Verf.⁵ näherungsweise, d. h. unter Vernachlässigung aller Kopplungen, mit den unendlich vielen schwachen Teilnehmern des Wellenfelds bestimmt durch die Gleichung:

$$\begin{vmatrix} \xi_1 & A & B \\ A & \xi_2 & C \\ B & C & \xi_3 \end{vmatrix} = 0, \quad \text{mit folgender Bedeutung der eingeführten Symbole} \quad (5)$$

$$\xi_1 = k^2 - f^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - \bar{U}) - f^2 \quad A = S_{444},$$

$$\xi_2 = k^2 - f_g^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - \bar{U}) - (f + g)^2 \quad B = S_{335}, \quad (6)$$

$$\xi_3 = k^2 - f_g^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - \bar{U}) - (f + h)^2 \quad C = S_{11\bar{1}}.$$

g und h sind die Gittervektoren $g = \frac{2\pi}{a}(4, 4, 4)$,

$h = \frac{2\pi}{a}(3, 3, 5)$ des nach den Würfelkanten orientierten reziproken Gitters. Sie liegen beide in der (110)-Ebene, in welcher wir die Grundvektoren

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{6}}(1, 1, 2), \quad \eta = \frac{1}{\sqrt{3}}(1, 1, 1)$$

festlegen. η steht senkrecht zur (111)-Kristalloberfläche, enthält also die Projektionsrichtung, in welcher die Lücken der Fläche (5) sichtbar werden. Berechnet man ihr k_x für eine Reihe von E -Werten, so findet man den in Abb. 3 angemarkten Bereich. Er vertritt wirksame Kopplung der Strahlen (444) und (335) etwa im beobachteten Umfang. Die Lage der Reflexe (444) weicht im Mittel theoretisch etwas stärker von der Parabel ab, als es die Beobachtungspunkte tun. Ob dies an der künstlichen Vereinfachung des Problems liegt und der Verlauf von den schwach angekoppelten Nebenreflexen doch beeinflusst ist, läßt sich nicht entscheiden. Das Maß der Abweichung hängt auch noch von der in gewissem Umfang willkürlichen Annahme über das mittlere Gitterpotential ab, das wir so gewählt haben, daß im Ganzen der Abb. möglichst gute Übereinstimmung mit den Parabelverläufen herrscht.

Wenn diese Überlegungen auch nicht ausreichen, die Beobachtungen in allen Einzelheiten zu begründen, so zeigen sie doch im Rahmen der benutzten Abschätzung keinerlei Widerspruch zwischen Experiment und theoretischer Erwartung auf Grund der dynamischen Beugungstheorie.

⁵ Z. B. E. Fues, Ann. Phys. (V) 43, 538 [1943].