

Zur elastischen Streuung langsamer Elektronen im Feld eines Atoms*

angewandt auf die p-Streuung eines Elektrons im Feld des atomaren Wasserstoffs

Von F. B. MALIK

Aus dem Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München

(Z. Naturforschg. **14 a**, 172–193 [1959]; eingegangen am 30. Oktober 1958)

A method has been developed to calculate the scattering of slow electrons. This method along with the wellknown methods of HULTHÉN and KOHN are applied to calculate p-wave scattering in the normal hydrogen field. The new method avoids the ambiguity of HULTHÉN's quadratic equation and gives almost the same result. The interrelation of the three methods is studied and a proposal is being made how one can simultaneously satisfy the conditions $L = \int \Psi (H - E) \Psi \, d\tau = 0$, $\partial L / \partial a = -k$, $a k = -\langle R_l | U | j l^+ \rangle$ appearing in the three methods. The whole theoretical discussion can without difficulties be extended to the modified COULOMB potential, only the regular and singular spherical BESSEL functions are to be substituted by the regular and singular confluent hypergeometric functions of the COULOMB type respectively. The phase shifts and the wave functions calculated without exchange agree well with the numerically solved results of CHANDRASEKHAR and BREEN. The results including exchange terms agree reasonably well with the results of the numerical integration of the HARTREE-FOCK equation, which has been carried out here by E. TREFFTZ.

Die Elektronenstreuung im Feld eines neutralen oder ionisierten Atoms ist in Physik und Astrophysik von großer Bedeutung. Ein wichtiges Beispiel dafür ist in der Sonnenphysik die Elektronenstreuung im Feld des neutralen Wasserstoffs. Der Hauptbeitrag zur kontinuierlichen Absorption im Spektrum der Sonne kann durch Gebunden–frei- und Frei–frei-Übergänge der Elektronen der negativen Wasserstoffionen erklärt werden, wie es zuerst von PANNEKOOK¹ vorgeschlagen wurde und von CHANDRASEKHAR² und CHANDRASEKHAR und BREEN^{3,4} theoretisch untersucht und bestätigt wurde. Für Wellenlängen $\lambda < 16\,000 \text{ \AA}$, wo Gebunden–frei-Übergänge die Hauptrolle spielen, stimmen die berechneten Werte mit den beobachteten Werten von CHALONGE und KOURGANOFF^{5,6} gut überein. Aber für Wellenlängen $\lambda > 16\,000 \text{ \AA}$, d. h. in dem Bereich, wo die Frei–frei-Übergänge den Hauptbeitrag liefern, sind die theoretischen Werte nicht befriedigend. Den Grund dieser Diskrepanz kann man in der nicht sehr genauen Näherung zur Berechnung der Wellenfunktion des freien Zustandes suchen, während für gebundene Zustände die sehr guten

Wellenfunktionen von HENRICH⁷ benutzt worden sind.

Wir werden in dieser Arbeit versuchen, eine analytische Methode zur Lösung dieses Problems zu finden. Die gewöhnliche Näherungsmethode von BORN und BORN–OPPENHEIMER zur Bestimmung der Phasenverschiebung und der Wellenfunktion ist bei niedrigen Energien nicht mehr anwendbar^{8,9}. Daß man in solchen Fällen ein Variationsverfahren ableiten kann, wurde zuerst von HULTHÉN gezeigt^{10,11}.

Später wurde eine modifizierte Methode von HUANG¹² und KOHN¹³ vorgeschlagen. Die beiden Methoden sind mit gutem Erfolg sowohl zur Berechnung der elastischen und inelastischen Streuung des Elektrons in der Atomhülle als auch in der Kernphysik angewendet worden.

MASSEY und MOISEWITSCH¹⁴ und BRANDEN, DALGARNO, JOHN und SEATON¹⁵ (bezeichnet weiter als BDJS) haben die Verfahren von HULTHÉN und KOHN zur Berechnung der elastischen Streuung eines langsamen s-Elektrons unter Berücksichtigung des Austausches und der Korrelation im Feld des atomaren Wasserstoffs benutzt. Ihre Ergebnisse für

* Dissertation, Göttingen 1958.

¹ A. PANNEKOOK, Mon. Not. Roy. Astr. Soc. **91**, 162 [1931].

² S. CHANDRASEKHAR, Astrophys. J. **102**, 223 [1945].

³ S. CHANDRASEKHAR u. F. H. BREEN, Astrophys. J. **103**, 41 [1946].

⁴ S. CHANDRASEKHAR u. F. H. BREEN, Astrophys. J. **104**, 430 [1946].

⁵ D. CHALONGE u. V. KOURGANOFF, Ann. Astrophys. **9**, 69 [1946].

⁶ A. UNSÖLD, Physik der Sternatmosphären, 2. Aufl., Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1955.

⁷ L. R. HENRICH, Astrophys. J. **99**, 59 [1944].

⁸ H. S. W. MASSEY, Handbuch der Physik, Bd. 36.

⁹ H. S. W. MASSEY, Rev. Mod. Phys. **28**, 199 [1956].

¹⁰ L. HULTHÉN, Kgl. Fysikof. Sällk. Lund. Föreläs. **14**, Nr. 21.

¹¹ L. HULTHÉN, Arkiv Meth. Astr. Fys. **35 A** [1948].

¹² S. S. HUANG, Phys. Rev. **76**, 477, 866, 1878 [1949].

¹³ W. KOHN, Phys. Rev. **74**, 1763 [1948].

¹⁴ H. S. W. MASSEY u. B. L. MOISEWITSCH, Proc. Roy. Soc., Lond. A **205**, 483 [1951].

¹⁵ B. BRANDEN, A. DALGARNO, T. JOHN u. M. SEATON, Proc. Phys. Soc., Lond. **71**, 877 [1958].



den Fall ohne Austausch und für antisymmetrische Wellenfunktionen stimmen sehr gut mit den Werten von CHANDRASEKHAR und BREEN (bezeichnet weiter als CB) bzw. MORSE und ALLIS¹⁶ überein, welche die gestreuten s-Wellen in der HARTREE-FOCKSchen Näherung¹⁷ numerisch gelöst haben. Nur für symmetrische Wellenfunktionen existiert für sehr kleine Energien eine bemerkenswerte Abweichung zwischen den Ergebnissen von MASSEY-MOISEWITSCH, BDJS und MORSE-ALLIS. Wie es schon von den Verfassern bemerkt worden ist, dürften die Werte von BDJS in diesem Fall für sehr kleine Energien (in der Nähe von $k^2 \rightarrow 0$) besser sein als die von MASSEY und MOISEWITSCH. Dagegen ist es ziemlich sicher, daß die Werte der letzteren für etwas höhere Energien ($k^2 \sim 0,5-1,0$) besser sind; denn die imaginären Phasenverschiebungen, die BDJS mit dem HULTHÈNSchen Verfahren bekommen haben, können nicht gerechtfertigt werden. In beiden Arbeiten ist die Korrelation durch die Einführung des gegenseitigen Abstands der beiden Elektronen in dem Ansatz für die Wellenfunktion berücksichtigt worden, aber weitere Untersuchungen sind notwendig, um eine sichere Aussage über den Beitrag der Korrelation machen zu können.

Das Variationsverfahren von SCHWINGER¹⁸ lieferte zum gleichen Problem ein schlechteres Resultat¹⁹⁻²¹, abgesehen davon, daß hier ziemlich komplizierte Integrale behandelt werden müssen. DRUKAREV²²⁻²⁴ schlug ein weiteres Verfahren zur Lösung ähnlicher Probleme vor, das OCHKUR und PETROV²⁵ auf das vorliegende Problem angewendet haben. Hier ist die HARTREE-FOCKsche Integrodifferentialgleichung durch zwei VOLTERRAsche Integralgleichungen zweiter Art mit algebraischen Nebenbedingungen angenähert. Die Resultate von OCHKUR und PETROV stimmen sehr gut mit den Ergebnissen von MASSEY und MOISEWITSCH für den antisymmetrischen Fall und ohne Austausch überein. Im symmetrischen Fall hat man bei dieser Methode gute Übereinstimmung mit den Resultaten von MORSE und ALLIS für sehr kleine Energien, nicht dagegen für etwas höhere Energien.

Die p-Streuung ($L = 1$) ist bis jetzt von CHANDRA-

SEKHAR und BREEN³ und BDJS berechnet. In der ersten Arbeit ist die HARTREESche Differentialgleichung (kein Austausch!) numerisch gelöst. Dagegen hat man in der zweiten Arbeit die Variationsmethode von HULTHÈN und KOHN angewendet und den Austausch berücksichtigt. Auch ein Versuch, den Beitrag der Korrelation in der p-Streuung festzustellen, ist in der Arbeit von BDJS gemacht worden, aber die Resultate dürften nur eine Schätzung sein, wie es auch von den Autoren bemerkt worden ist.

Wir haben im folgenden die p-Streuung der langsamen Elektronen nach der HULTHÈNSchen, KOHNschen und einer weiteren hier abgeleiteten Methode behandelt und den Austausch berücksichtigt. Die Resultate stimmen im allgemeinen besser als die Resultate von BDJS mit den numerischen Lösungen der HARTREE-FOCK-Gleichung, die von E. TREFFTZ durchgeführt worden sind, überein. Die drei Variationsmethoden sind gegeneinander abgegrenzt. Es wird ein Vorschlag gemacht, wie man erreicht, daß alle drei Methoden äquivalent werden.

Theorie

I. Daß man eine Variationsmethode zur Berechnung der Phasenverschiebung und kontinuierlichen Wellenfunktion in einem kugelsymmetrischen Feld anwenden kann, war 1944 und 1946 von HULTHÈN vorgeschlagen worden. KOHN¹³ und HUANG¹² formulierten später eine weitere modifizierte Methode. Kurz lauten die Methoden wie folgt:

Den asymptotischen Verlauf einer gestreuten Wellenfunktion kann man schreiben als

$$\Psi_l(r) = \frac{R_l(r)}{r} Y_l^m(\vartheta, \varphi),$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_l(r) \rightarrow \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) + \tan \lambda \cos\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) \quad (1)$$

$Y_l^m(\vartheta, \varphi)$: Normierte Kugelflächenfunktion, k : die Wellenzahl, λ : die Phasenverschiebung der gestreuten Welle in bezug auf die einlaufende Welle.

¹⁶ P. M. MORSE u. W. H. ALLIS, Phys. Rev. **44**, 269 [1933].

¹⁷ Siehe z. B. D. R. HARTREE, Prog. Phys. **11**, 113 [1946].

¹⁸ T. SCHWINGER, unveröffentl. Vorlesungskriptum, Harvard 1947; siehe auch J. M. BLATT u. J. D. JACKSON, Phys. Rev. **76**, 181 [1949].

¹⁹ S. ALTSCHULER, Phys. Rev. **89**, 1278 [1953].

²⁰ H. BOYET u. S. BOROWITSCH, Phys. Rev. **93**, 1225 [1954].

²¹ M. C. NEWSTEIN, M. I. T. Tech. Report No. 4, 1955.

²² G. F. DRUKAREV, J. Exp. Theor. Fis. **25**, 129 [1953].

²³ G. F. DRUKAREV, J. Exp. Theor. Fis. **25**, 139 [1953].

²⁴ G. F. DRUKAREV, J. Exp. Theor. Fis. **31**, 288 [1956] oder engl. Übersetz. J. Exp. Theor. Phys., USSR **4**, 309 [1957].

²⁵ V. I. OCHKUR u. Iu. V. PETROV, J. Exp. Theor. Fis. **31**, 146 [1957] oder engl. Übersetz. J. Exp. Theor. Phys., USSR **4**, 144 [1957].

Bildet man den Mittelwert

$$L = \int \Psi (\mathfrak{H} - E) \Psi \, d\tau, \quad (2)$$

so erhält man nach der Variation

$$\delta L = -k \delta a \quad \text{oder} \quad \delta S = \delta(L + k a) = 0, \quad (3)$$

wobei \mathfrak{H} der HAMILTON-Operator ist. \mathfrak{H} angewandt auf den mit r multiplizierten Radialteil der Wellenfunktion lautet im kugelsymmetrischen Kraftfeld (es werden stets atomare Einheiten benutzt):

$$\mathfrak{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \quad (4)$$

mit der Potentialfunktion $V(r) = \frac{1}{2} \mathfrak{U}(r)$

$$\text{und} \quad a = \text{tg } \lambda. \quad (5)$$

Wählt man nun einen Ansatz für die Wellenfunktion mit den n unabhängigen Parametern c_1, c_2, \dots, c_n , so schlägt HULTHÉN die folgenden Gleichungen vor, um die n unbekannten Parameter und die Phasenverschiebung $\lambda = \text{arc tg } a$ zu bestimmen.

$$L = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial c_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (6)$$

Dagegen benutzen HUANG und KOHN die $(n+1)$ Gleichungen,

$$\left(\frac{\partial L}{\partial a} \right)_{a=a_K} = -k, \quad \frac{\partial L}{\partial c_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (7)$$

um a, c_1, c_2, \dots, c_n zu bestimmen; die Phasenverschiebung λ ist dann

$$\lambda = \text{arc tg} \left(\frac{L_K}{k} + a_K \right). \quad (7a)$$

Der Unterschied in der Wahl der ersten Gleichung bei beiden Verfahren liegt daran, daß eine wahre Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung die beiden Bedingungen $L=0$ und $\partial L/\partial a = -k$ erfüllt. Mit anderen Worten, eine physikalische Feldgröße Ψ , die eine Zustandsfunktion der gestreuten Welle darstellt, erfüllt sowohl $L=0$ als auch $\partial L/\partial a = -k$; bestimmt man umgekehrt aus diesen Gleichungen Ψ , so hat man $(n+2)$ Gleichungen, um $(n+1)$ Unbekannte zu berechnen, und deshalb ist die Lösung überbestimmt.

Es wird jetzt gezeigt, daß man statt $L=0$ und $\partial L/\partial a = -k$ noch eine dritte wohlbekannte Identität (neben den Gleichungen $\partial L/\partial c_i = 0$) benutzen kann, um die unbekannten Parameter, die Phasenverschiebung und darauf die Wellenfunktion zu bestimmen. Diese Identität ist die Beziehung zwischen dem Streupotential und der Phasenverschiebung. Weiterhin wird gezeigt, daß die dritte Gleichung

automatisch befriedigt wird, wenn zwei von diesen drei Gleichungen erfüllt sind.

Die Beziehung zwischen der Phasenverschiebung und dem Streupotential bei den Randbedingungen (1) und $R_l(0) = 0$ ist (siehe Anhang I a):

$$a k = - \langle j_l^+ | \mathfrak{U} | R_l \rangle \quad (8)$$

\mathfrak{U} : Die Potentialfunktion (bzw. -Operator) in \mathfrak{H} [siehe Gl. (4)], $R_l(r)/r$: der Radialteil der Wellenfunktion Ψ [siehe Gl. (1)], $a = \text{tg } \lambda$.

Allgemein ist:

$$\langle m | \mathfrak{U}(r) | n \rangle \equiv \int m(r) \mathfrak{U}(r) n(r) \, dr$$

[in diesem Fall: $m(n) = j_l^+(kr)$; $n(r) = R_l(n)$; $\mathfrak{U}(r) = \mathfrak{U}(r)$].

$$j_l^+(kr) = (\pi r k/2)^{1/2} J_{l+1/2}(kr):$$

Die sphärische BESSEL-Funktion mit positivem Index.

$$j_l^-(kr) = (\pi r k/2)^{1/2} J_{-l-1/2}(kr):$$

Die sphärische BESSEL-Funktion mit negativem Index.

Unter der Annahme, daß das Potential für großes r stärker als $1/r^2$ abnimmt, kann man den Radialteil der Wellenfunktion in der folgenden Form schreiben:

$$R_l(r) = P(r) j_l^+(kr) + Q(r) j_l^-(kr) \quad (9)$$

mit den Nebenbedingungen

$$\lim_{r \rightarrow \infty} P(r) = \text{const}, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} Q(r) = (-1)^l a_l,$$

denn die allgemeine Lösung der Differentialgleichung bei verschwindendem Potential ist

$$j_l^+(kr) + (-1)^l a_l j_l^-(kr).$$

Mit den unbekannten Parametern b und c schreiben wir (9) um:

$$R_l(r) = [1 + c h(r)] j_l^+(kr) + [a f(r) + b g(r)] j_l^-(kr) \quad (10)$$

mit den Nebenbedingungen

$$\lim_{r \rightarrow \infty} f(r) = (-1)^l, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} g(r) = \lim_{r \rightarrow \infty} h(r) = 0. \quad (11)$$

Es läßt sich jetzt zeigen, daß mit einer Wellenfunktion der Art (10), wobei $f(r)$, $g(r)$ und $h(r)$ irgendwelche willkürliche Funktionen sind, und unter der Annahme

$$b(\partial L/\partial b) + c(\partial L/\partial c) = 0 \quad (12)$$

Gl. (8) automatisch folgt, wenn gleichzeitig $L=0$ und $\partial L/\partial a = -k$. Mit einer Wellenfunktion der Art (10) kann man L als eine quadratische Funktion von a, b und c darstellen:

$$L = A_1 a^2 + A_2 b^2 + A_3 c^2 + A_4 a b + A_5 b c + A_6 c a + A_7 a + A_8 b + A_9 c + A_0, \quad (13)$$

wobei

$$\begin{aligned} A_0 &= \langle j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | j_l^+(kr) \rangle, & A_1 &= \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | f(r) j_l^-(kr) \rangle, \\ A_2 &= \langle g(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | g(r) j_l^-(kr) \rangle, & A_3 &= \langle h(r) j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | h(r) j_l^+(kr) \rangle, \\ A_4 &= \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | g(r) j_l^-(kr) \rangle + \langle g(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | f(r) j_l^-(kr) \rangle, \\ A_5 &= \langle g(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | h(r) j_l^+(kr) \rangle + \langle h(r) j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | g(r) j_l^-(kr) \rangle, \\ A_6 &= \langle h(r) j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | f(r) j_l^-(kr) \rangle + \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | h(r) j_l^+(kr) \rangle, \\ A_7 &= \langle j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | f(r) j_l^-(kr) \rangle + \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | j_l^+(kr) \rangle, \\ A_8 &= \langle j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | g(r) j_l^-(kr) \rangle + \langle g(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | j_l^+(kr) \rangle, \\ A_9 &= \langle j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | h(r) j_l^+(kr) \rangle + \langle h(r) j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | j_l^+(kr) \rangle; \end{aligned} \quad (14)$$

$$L = \frac{a}{2} \frac{\partial L}{\partial a} + \frac{b}{2} \frac{\partial L}{\partial b} + \frac{c}{2} \frac{\partial L}{\partial c} + A_7 \frac{a}{2} + A_8 \frac{b}{2} + A_9 \frac{c}{2} + A_0 = \frac{a}{2} \frac{\partial L}{\partial a} + A_7 \frac{a}{2} + A_8 \frac{b}{2} + A_9 \frac{c}{2} + A_0 \quad [\text{gemäß (12)}].$$

Da $\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) j_l^+(kr) = 0$ ist,

erhält man $-\langle R_l | \mathbb{U} | j_l^+(kr) \rangle = \langle R_l | -2\zeta + k^2 | j_l^+(kr) \rangle.$

Partielle Integration liefert $-\langle R_l | \mathbb{U} | j_l^+(kr) \rangle = a k + \langle j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | R_l \rangle$ [siehe Anhang I(b)]
oder

$$\begin{aligned} 2 \langle R_l | \mathbb{U} | j_l^+(kr) \rangle &= a k + \langle j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | R_l \rangle + \langle R_l | -2\zeta + k^2 | j_l^+(kr) \rangle \\ &= a k + C_1 a + C_2 b + C_3 c + C, \end{aligned} \quad (14a)$$

wobei

$$\begin{aligned} C_1 &= \langle j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | f(r) j_l^-(kr) \rangle + \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | j_l^+(kr) \rangle = A_7, \\ C_2 &= \langle j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | g(r) j_l^-(kr) \rangle + \langle g(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | j_l^+(kr) \rangle = A_8, \\ C_3 &= \langle j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | h(r) j_l^+(kr) \rangle + \langle h(r) j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | j_l^+(kr) \rangle = A_9, \\ C &= 2 \langle j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | j_l^+(kr) \rangle = 2 A_0. \end{aligned}$$

Also ist

$$-2 \langle R_l | \mathbb{U} | j_l^+(kr) \rangle = a k + A_7 a + A_8 b + A_9 c + 2 A_0,$$

und es folgt

$$L = \frac{a}{2} \frac{\partial L}{\partial a} - \frac{a k}{2} - \langle R_l | \mathbb{U} | j_l^+(kr) \rangle. \quad (15)$$

Gl. (15) stellt den Zusammenhang zwischen Gl. (8), der HULTHÈNSchen Gleichung $L=0$ und der KOHNschen Gleichung $\partial L / \partial a = -k$ [unter der Bedingung (12)] her. Ferner sieht man jetzt deutlich, daß die dritte Gleichung erfüllt ist, wenn zwei von diesen drei Bedingungen befriedigt sind.

Betrachtet man jetzt Gl. (15) zusammen mit (6) und (7), so lassen sich auch die folgenden Gleichungen zur Bestimmung der n unbekannten Parameter und der Phasenverschiebung wählen

$$-\langle R_l | \mathbb{U} | j_l^+(kr) \rangle = a k, \quad (a) \quad \frac{\partial L}{\partial c_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (b) \quad (16)$$

(16b) schließt die Bedingung (12) ein (mit $b=c_1$ oder 0; $c=c_2$ oder 0). Gl. (16a) ist eine lineare Gleichung in der Phasenverschiebung a , womit die Zweideutigkeit der Lösungen für a , die im HULTHÈNSchen Fall auftritt, vermieden wird. Entsprechend wie in der KOHNschen Methode ergibt sich der Phasenwinkel

$$\lambda_t = \arctg(a_t + L_t/k), \quad (16c)$$

wobei sich der Index t auf die nach Gl. (16) bestimmten Werte bezieht.

Benutzen wir das Gleichungssystem (16), so nimmt L_t eine einfache Gestalt an. Bei Berücksichtigung von Gl. (15) ist

$$L_t = \frac{a}{2} \frac{\partial L}{\partial a} - \frac{a k}{2} + a k = \frac{a}{2} \left(\frac{\partial L}{\partial a} + k \right) \quad \text{und} \quad \frac{\partial L}{\partial a} = 2 A_1 a + A_4 b + A_6 c + A_7, \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial a} = & 2a \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | f(r) j_l^-(kr) \rangle + b \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | g(r) j_l^-(kr) \rangle \\ & + b \langle g(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | f(r) j_l^-(kr) \rangle + c \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | h(r) j_l^+(kr) \rangle \\ & + c \langle h(r) j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | f(r) j_l^-(kr) \rangle + \langle j_l^+(kr) | -2\zeta + k^2 | f(r) j_l^-(kr) \rangle \\ & + \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | j_l^+(kr) \rangle \end{aligned}$$

$$\text{oder} \quad \frac{\partial L}{\partial a} = \langle R_l | -2\zeta + k^2 | f(r) j_l^-(kr) \rangle + \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | R_l \rangle$$

$$= -k + \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | R_l \rangle. \quad [\text{siehe Anhang I(c)}]$$

$$\text{Also ist} \quad L_t = \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\zeta + k^2 | R_l \rangle. \quad (18)$$

Eine implizite Voraussetzung für die Gln. (3) und (7a) ist, daß L_K relativ klein gegen ak ist. Es wird später gezeigt, daß L_t gewöhnlich kleiner als L_K ist [vgl. Gl. (31)]. Die Variationsmethode (16) ist etwas stabiler als die KOHNSche Methode.

Wir leiten jetzt eine allgemeine Beziehung ab, die als gute Kontrolle der numerischen Rechnung benutzt werden kann. (Wie oben bedeutet der Index K die Werte, die mit dem KOHNSchen Verfahren gerechnet sind.)

Aus Gl. (15) folgt

$$\begin{aligned} L_K = & -\frac{a_K k}{2} - \frac{a_K k}{2} - \langle R_l | \mathbb{U} | j_l^+(kr) \rangle \quad \text{oder} \\ L_K + a_K k = & \text{tg } \lambda_K = -\langle R_l | \mathbb{U} | j_l^+(kr) \rangle \quad (19) \\ = & \frac{1}{2}(a k + C_1 a_K + C_2 b_K + C_3 c_K + C). \end{aligned}$$

Falls a_K und L_K numerisch richtig gerechnet sind, muß (19) befriedigt sein.

Gute Kriterien für die Güte der nach HULTHÉN bzw. KOHN oder nach den Gln. (16) gerechneten Werte sind:

a) Inwieweit die Phasenverschiebung berechnet nach HULTHÉN die Gl. (8) befriedigt. Bei guter Übereinstimmung kann man ein gutes Resultat erwarten.

b) Gute Werte im KOHNSchen Verfahren kann man nur erwarten, wenn L_K gegen ak ziemlich klein ist. Es wird später gezeigt werden, daß jedoch λ_K auch für große L_K ein ziemlich gutes Resultat liefern kann.

c) Bleibt L_t sehr klein, so sollte Gl. (16) ein gutes Resultat geben.

Ein Verfahren, welches eine eindeutige Lösung bestimmt, so daß alle drei Bedingungen $L=0$; $\partial L/\partial a = -k$ und $-ak = \langle R_l | \mathbb{U} | j_l^+(kr) \rangle$ erfüllt sind, kann man dadurch gewinnen, daß man irgendeinen festen Parameter x in die willkürlich gewählten Funktionen $f(r)$, $g(r)$ oder $h(r)$ einführt. Diesen festen Parameter bestimmt man nicht durch die

Variationsgleichung $\partial L/\partial x = 0$, sondern so, daß $L_K = L_t = 0$. Dann hat man eine eindeutige Wellenfunktion und Phasenverschiebung als Funktion der Energie k^2 , die alle drei Gln. (6), (7) und (8) erfüllen. Vom physikalischen Standpunkt ist so ein Verfahren sinnvoll, denn die wahre Wellenfunktion und Phasenverschiebung müssen die Gleichungen $L=0$ und (8) befriedigen. Ein so bestimmter Parameter x ist eine Funktion der Energie der gestreuten Welle allein.

Physikalisch gesehen stellt Gl. (8) ein Maß für die Verzerrung der ebenen Welle durch das Potentialfeld dar, ausgedrückt durch die Phasenverschiebung der auslaufenden Welle. Voraussetzung ist, daß das Potential stärker als $1/r^2$ abnimmt, wie z. B. das Potential eines neutralen Atoms oder das YUKAWA-Potential. Aus der Ableitung geht hervor, daß die Methode für beliebig viele Parameter gilt, solange $b(\partial L/\partial b) + c(\partial L/\partial c) = 0$ erfüllt ist.

Die diskutierte Theorie ist auch ohne weiteres im Falle eines modifizierten COULOMB-Potentials anwendbar, d. h. man kann sie für die Streuung am ionisierten Atom gebrauchen. Der Radialteil der Differentialgleichung für das modifizierte COULOMB-Potential im kugelsymmetrischen Fall ist

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 + \frac{z}{r} + U - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l(r) = 0.$$

Wenn die Abweichung U vom COULOMB-Potential stärker als $1/r^2$ abfällt, wie es gewöhnlich der Fall ist, dann hat $f_l(r)$ das asymptotische Verhalten ($r \rightarrow \infty$)

$$f_l(r) = F_l(r) + a_l G_l(r),$$

wobei $F_l(r)$ und $G_l(r)$ reguläre und singuläre konfluente hypergeometrische Funktionen für COULOMB-Potential sind. Sie haben die asymptotische Form

$$\begin{aligned} F_l(r) & \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin \left(k r + 2 k^{-1} \ln 2 k r + \lambda_l - \frac{\pi l}{2} \right), \\ G_l(r) & \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \cos \left(k r + 2 k^{-1} \ln 2 k r + \lambda_l - \frac{\pi l}{2} \right). \end{aligned}$$

Mit diesen asymptotischen Bedingungen kann man Gl. (3) wieder bekommen, und die Gl. (8) liest sich:

$$a k = - \langle F_l | \mathbb{U} | R_l \rangle.$$

Entsprechend muß man (9) umschreiben

$$R_l(r) = P(r) F_l(r) + Q(r) G_l(r)$$

mit denselben Nebenbedingungen für $P(r)$ und $Q(r)$.

So kann man die ganzen Überlegungen ohne weiteres auch in diesem Fall durchführen; nur muß man überall $j_l^+(k r)$ durch $F_l(r)$, und $j_l^-(k r)$ durch $G_l(r)$ ersetzen.

II. Es soll die elastische Streuung eines langsamen Elektrons im Feld des neutralen Wasserstoffatoms untersucht werden. Dies kann man auch als die Bestimmung der Eigenfunktionen des H^- -Kontinuums auffassen. Die Wellenfunktionen können für die Berechnung des optischen Absorptionskoeffizienten im H^- -Kontinuum benutzt werden.

Der HAMILTON-Operator eines Systems mit einem Proton von unendlicher Masse und zwei Elektronen (in atomaren Einheiten) ist

$$\mathfrak{H} = - \left(\frac{1}{2} (A_1 + A_2) + \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} \right), \quad (21)$$

wobei r_1 und r_2 die Abstände des Elektrons (1) bzw. (2) von dem Kern sind und r_{12} den Abstand zwischen den Elektronen (1) und (2) bedeutet. A_1 und A_2 sind die LAPLACE-Operatoren, angewendet auf das Elektron (1) bzw. (2). Für elastische Streuung kann man die Wellenfunktion des ganzen Systems, Ψ , in der ersten Austausch-Näherung schreiben als

$$\Psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_0(r_1) f_0(r_2) \pm \varphi_0(r_2) f_0(r_1)]. \quad (22)$$

Das positive bzw. negative Zeichen entspricht dem symmetrischen bzw. antisymmetrischen Fall. $\varphi_0(r)$ erfüllt die Grundzustandsgleichung des Wasserstoffatoms, nämlich

$$\left(\frac{1}{2} A_1 + E_0 + \frac{1}{r_1} \right) \varphi_0(r_1) = 0,$$

Damit erhält man

$$\begin{aligned} -2L = \int_0^\infty R(r_2) \left[\frac{d^2}{dr_2^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r_2} - U(r_2) \right] R(r_2) dr_2 \\ \pm \int_0^\infty R(r_2) \varphi_0(r_2) dr_2 \int K(r_1, r_2) dr_1. \end{aligned} \quad (23)$$

Hierbei ist

$R(r)/r$ der Radialteil von $f_0(r)$,
 $U(r)$ das auf das gestreute Elektron wirkende Potential des neutralen H-Atoms,

$$U(r) = -2 \left(1 + \frac{1}{r_2} \right) e^{-2r_2}, \quad (23 a)$$

$$\begin{aligned} \int K(r_1, r_2) dr_1 = \frac{8\pi}{2l+1} \left[\int_0^{r_2} R(r_1) \varphi_0(r_1) \left(\frac{r_1}{r_2} \right)^l dr_1 \right. \\ \left. + \int_{r_2}^\infty \varphi_0(r_1) R(r_1) \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^{l+1} dr_1 \right]. \end{aligned} \quad (23 b)$$

Ohne Austausch verschwindet das letzte Glied der Gl. (23).

Berücksichtigt man das Austauschglied, so erweitert sich Formel (8) zu

$$\begin{aligned} a k = - \langle R(r_2) | U | j_l^+(k r_2) \rangle \\ \pm \langle j_l^+(k r_2) | \int K(r_1, r_2) dr_1 | \varphi_0(r_2) \rangle, \end{aligned} \quad (24)$$

wobei

$$\begin{aligned} \langle j_l^+(k r_2) | \int K(r_1, r_2) dr_1 | \varphi_0(r_2) \rangle \\ = \frac{8\pi}{2l+1} \left[\int_0^{r_2} \frac{dr_2}{r_2^l} j_l^+(k r_2) \varphi_0(r_2) \int_0^{r_2} R(r_1) \varphi_0(r_1) r_1^{l+1} dr_1 \right. \\ \left. + \int_0^{r_2} \frac{dr_2}{r_2^l} R(r_2) \varphi_0(r_2) \int_0^{r_2} j_l^+(k r_1) \varphi_0(r_1) r_1^{l+1} dr_1 \right] \end{aligned}$$

Durch das zugefügte Glied in der rechten Seite der Gl. (24) wird die allgemeine Theorie des Teils I nicht geändert, da das Austauschglied entsprechend auch in L auftritt. Man kann die Potentialfunktion \mathbb{U} als Operator auffassen, der das gewöhnliche Potential und das Austauschglied enthält.

III. Die Wahl für den Ansatz einer Wellenfunktion hängt von dem Potentialverlauf und den Randbedingungen ab. Man sieht aus Gl. (23 a), daß das Potential für großes r stärker als $1/r^2$ abnimmt. Also kann man $R_l(r)$ wie in Gl. (9) schreiben

$$R_l(r) = P(r) j_l^+(k r) + (-a)^l Q(r) j_l^-(k r). \quad (9)$$

Die Randbedingungen sind

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} R_l(r) &\rightarrow \sin \left(k r - \frac{\pi l}{2} \right) + \operatorname{tg} \lambda \cos \left(k r - \frac{\pi l}{2} \right), \\ \lim_{r \rightarrow \infty} R_l(r) &\rightarrow r^{l+1}, \quad R_l(0) = 0, \\ \lim_{r \rightarrow \infty} P(r) &\rightarrow 1, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} Q(r) \rightarrow 1. \end{aligned} \quad (26)$$

In der Umgebung von Null verläuft $j_l^+(k r)$ wie r^{l+1} und wird $j_l^-(k r)$ singular wie $1/r^l$. Also müs-

sen sich $P(r)$ und $Q(r)$ dort wie r^0 bzw. r^{2l+1} verhalten. Die Randbedingungen von $P(r)$ und $Q(r)$ sind also:

$$\lim_{r \rightarrow 0} P(r) \rightarrow \text{const}, \quad \lim_{r \rightarrow 0} Q(r) \rightarrow r^{2l+1}.$$

Wir machen den folgenden Ansatz, der alle diese Bedingungen erfüllt.

$$R_l(r) = j_l^+(kr) + (-1)^l (a + b e^{-cr}) (1 - e^{-cr})^{2l+1} j_l^-(kr), \quad (27)$$

(für p -Wellen):

$$R_1(r) = j_1^+(kr) - (a + b e^{-cr}) (1 - e^{-cr})^3 j_1^-(kr). \quad (28)$$

Der Parameter c kann als eine Art Abschirmungsparameter des gebundenen Elektrons im Grundzustand angesehen werden; man erwartet für ihn die Größenordnung 1. $P(r)$ wird gleich 1 und nicht als irgendeine Funktion von r , z. B. $(1 + dc^{-r})$, gesetzt, was durch den Erfolg bei der Berechnung der s -Wellen gerechtfertigt ist¹⁴.

Weiter wurde in unserer Rechnung $\varphi_0 = e^{-r}/\sqrt{\pi}$ gesetzt, d. h. die Verzerrung der Wellenfunktion im Grundzustand durch das zweite Elektron ist vernachlässigt.

IV. Setzt man den Ansatz (28) und $\varphi_0(r) = e^{-r}/\sqrt{\pi}$ in Gl. (23) ein, so erhält man L als eine quadratische Funktion von a und b

$$L = A_1' a^2 + A_2' b^2 + A_3' a b + A_4' a + A_5' b + A_0', \quad (29)$$

wobei $A_i' = A_i'(c)$; $i = 0, \dots, 5$.

Die expliziten Werte der A_i' sind im Anhang II zu finden.

Da die A_i' ziemlich komplizierte Funktionen von c sind, wird die analytische Variation von c schwierig. Dagegen ist es einfach, einen geeigneten Wert von c graphisch zu bestimmen. Die c -Werte werden nach zwei verschiedenen Bedingungen bestimmt, nämlich:

- (i) c wird so gewählt, daß die Variationsgleichung $\partial L / \partial c = 0$ befriedigt ist,
- (ii) c wird so bestimmt, daß alle drei oben diskutierten Methoden äquivalent werden, d. h. $L_K = L_t = 0$.

a) *Graphische Bestimmung von c im KOHNSchen Verfahren:*

i) Um c so zu bestimmen, daß $\partial L_K / \partial c_K = 0$, bemerken wir, daß

$$\begin{aligned} \frac{\partial L_K}{\partial c_K} &= \frac{\partial L_K}{\partial a_K} \cdot \frac{da_K}{dc_K} + \frac{\partial L_K}{\partial b_K} \cdot \frac{db_K}{dc_K} + \frac{\partial L_K}{\partial c_K} \\ &= -k \frac{da_K}{dc_K} + \frac{\partial L_K}{\partial c_K}. \end{aligned}$$

Also $\frac{\partial L_K}{\partial c_K} = 0$, wenn $\frac{d}{dc_K} (L_K/k + a_K) = \frac{d}{dc_K} \lg \lambda_K = 0$. Zeichnet man jetzt $L_K/k + a_K$ in Abhängigkeit von c , so ist im Extremalpunkt $\partial L_K / \partial c_K = 0$.

ii) Trägt man L_K/k gegen c auf, so gibt der Punkt $L_K/k = 0$ die c -Werte, die alle drei Methoden äquivalent machen.

b) *Graphische Bestimmung von c im HULTHENSchen Verfahren:*

i) c wird so bestimmt, daß $\partial L_H / \partial c_H = 0$ ist. Nun ist

$$\frac{dL_H}{dc_H} = \frac{\partial L_H}{\partial a_H} \cdot \frac{da_H}{dc_H} + \frac{\partial L_H}{\partial b_H} \cdot \frac{db_H}{dc_H} + \frac{\partial L_H}{\partial c_H} = 0,$$

denn L_H ist identisch Null gesetzt worden.

Wegen $\frac{\partial L_H}{\partial b_H} = 0$ ist also

$$\frac{\partial L_H}{\partial c_H} = - \frac{\partial L_H}{\partial a_H} \cdot \frac{da_H}{dc_H}.$$

Sowohl aus $\partial L_H / \partial a_H = 0$ als auch aus $da_H / dc_H = 0$ scheint $\partial L_H / \partial c_H = 0$ zu folgen. Aber es läßt sich zeigen, daß bei $\partial L_H / \partial a_H = 0$ gleichzeitig $\partial a_H / \partial c_H$ unendlich wird und das Produkt $\partial L_H / \partial a_H \cdot da_H / dc_H$ einen endlichen Wert ungleich Null annimmt.

Unter Berücksichtigung von $\partial L_H / \partial b_H = 0$ wird L_H eine quadratische Funktion in a [vgl. (29)]:

$$L_H = B_1 a_H^2 + B_2 a_H + B_0 = 0, \quad (29 a)$$

$$\text{wobei } B_1 = A_1' - \frac{A_3'^2}{4 A_2'}; \quad B_2 = A_4' - \frac{A_3' A_5'}{2 A_2'} \quad \text{und} \quad B_0 = A_0' - \frac{A_5'^2}{4 A_2'}.$$

$$\text{Also } a_H = - \frac{B_2}{2 B_1} \pm \frac{\sqrt{B_2^2 - 4 B_1 B_0}}{2 B_1}, \quad \frac{\partial L_H}{\partial a_H} = 2 B_1 a_H + B_2 = \pm \sqrt{B_2^2 - 4 B_1 B_0} = \pm \sqrt{D}.$$

Wenn $\frac{\partial L_H}{\partial a_H} = 0$, folgt $\sqrt{B_2^2 - 4 B_1 B_0} = \sqrt{D} = 0$

$$\text{und } \frac{da_H}{dc_H} = - \frac{1}{2 B_1} \frac{dB_2}{dc_H} + \frac{B_2}{2 B_1^2} \frac{dB_1}{dc_H} \mp \frac{\sqrt{D}}{2 B_1^2} \frac{dB_1}{dc_H} \pm \frac{1}{4 B_1 \sqrt{D}} \frac{dD}{dc_H}. \quad \text{Also } \lim_{D \rightarrow 0} \frac{da_H}{dc_H} = \infty.$$

Aber $\lim_{D \rightarrow 0} \frac{\partial L_H}{\partial a_H} \cdot \frac{da_H}{dc_H}$ existiert und ist

$$\lim_{D \rightarrow 0} \frac{\partial L_H}{\partial a_H} \cdot \frac{da_H}{dc_H} = \lim_{D \rightarrow 0} \pm \sqrt{D} \left[- \frac{1}{2 B_1} \frac{dB_2}{dc_H} + \frac{B_2}{2 B_1^2} \frac{dB_1}{dc_H} \mp \frac{\sqrt{D}}{2 B_1^2} \frac{dB_1}{dc_H} \pm \frac{1}{4 B_1 \sqrt{D}} \frac{dD}{dc_H} \right],$$

$$\lim_{D \rightarrow 0} \frac{\partial L_H}{\partial a_H} \cdot \frac{da_H}{dc_H} = \frac{1}{4 B_1} \frac{dD}{dc_H} = \text{endlich} \neq 0,$$

da im allgemeinen B_1 endlich ist und die Nullstelle von D als Funktion von c einfach ist. Also ist $\partial L_H / \partial c_H$ nur dann Null, wenn $da_H / dc_H = 0$. Trägt man a_H gegen c_H auf, gibt der Extrempunkt $\partial L_H / \partial c_H = 0$.

ii) Will man c so wählen, daß alle drei Verfahren äquivalent werden, so trägt man \sqrt{D} gegen c auf und sucht den c -Wert, der $-\sqrt{D} = -k$ macht. Offenbar soll dann c die gleichen Werte annehmen wie im KOHNSCHEN Fall für $L_K = 0$. Solange die HULTHÉN- und KOHNSCHEN Werte annähernd übereinstimmen, kommt nur das negative Zeichen vor der Wurzel in (29) in Frage, da aus der KOHNSCHEN Methode folgt, daß $\partial L / \partial a$ negativ sein soll. Damit hat man sich der Zweideutigkeit der a_H -Werte entledigt.

c) *Graphische Bestimmung von c aus den Gln. (16)*

i) Beginnt man mit den Gln. (16), so kann man $\partial L_t / \partial c_t = 0$ nicht auf solch einfache Weise bestimmen. Man muß c so wählen, daß

$$-\frac{\partial L_t}{\partial a_t} \frac{da_t}{dc_t} + \frac{dL_t}{dc_t} = 0 \quad \text{ist,}$$

$$\text{denn} \quad \frac{dL_t}{dc_t} = \frac{\partial L_t}{\partial a_t} \frac{da_t}{dc_t} + \frac{\partial L_t}{\partial b_t} \frac{db_t}{dc_t} + \frac{\partial L_t}{\partial c_t}.$$

ii) Der c -Wert, der alle drei Methoden äquivalent macht, folgt wieder aus $L_t = 0$. Er soll derselbe sein wie bei den KOHNSCHEN und HULTHÉNSCHEN Verfahren.

Zum Schluß werden noch zwei weitere Gleichungen angegeben, die man als Kontrolle zur numerischen Rechnung benutzen kann. Man hat (s. Anhang III a)

$$L_K / k = (f^2 - d^2) / 4f, \quad (30)$$

$$\text{wobei} \quad f = a_{H1} + a_{H2} - 2a_K, \quad d = a_{H1} - a_{H2}.$$

Dies dient nur zur Kontrolle der a und nicht der Koeffizienten A' , da (30) aus der quadratischen Form von L in den a folgt.

Ferner kann man mit dem Ansatz (10) und $b(\partial L / \partial b) = 0$, $c(\partial L / \partial c) = 0$ [b und c beziehen sich hier auf die Parameter in Gl. (10)] eine Beziehung zwischen L_K und L_t bekommen

$$L_t = L_K \frac{a_t}{a_{H1} + a_{H2} - a_K}. \quad (31)$$

Dies ist im Anhang III (b) abgeleitet. Falls

$$a_{H1} \gg a_{H2} - a_K$$

(wie es im allgemeinen der Fall ist), gilt

$$L_t \cong L_K \frac{a_t}{a_{H1}}.$$

Wenn a_t und a_{H1} dasselbe Vorzeichen haben, so gilt dies für L_t und L_K und umgekehrt. Oft ist a_{H1} we-

sentlich größer als a_t , dann ist L_t wesentlich kleiner als L_K , und man kann hoffen, daß die Lösung des Systems (16) ein besseres Ergebnis gibt als das KOHNSCHE Verfahren.

Resultat und Diskussion

I. Die Phasenverschiebung

In Tab. 1 a sind die Phasenverschiebungen für verschiedene Energiewerte k^2 , die mit dem Ansatz (28) mit $c=1$ berechnet sind, und die numerischen Lösungen der HARTREESCHEN bzw. HARTREE-FOCKSCHEN Differentialgleichungen aus der Arbeit von CHANDRASEKHAR und BREEN³ bzw. TREFFTZ (noch nicht veröffentlicht) angegeben. Die Werte von BRANDEN, DALGARNO, JOHN und SEATON (BDJS)¹⁵ sind in Tab. 1 b zum Vergleich gegeben. Der Grund für die Wahl von $c=1$ wird in den nachfolgenden Paragraphen in Verbindung mit der Diskussion der Variation von c (vgl. Tab. 2 a–f) erläutert. In Abb. 1 sind die Phasenverschiebungen gegen die Energiewerte k^2 aufgetragen. Die Indices n , H , K und t beziehen sich auf die Werte, die durch numerische Integration nach dem HULTHÉNSCHEN bzw. KOHNSCHEN Verfahren bzw. aus (16c) berechnet worden sind. Bei Vernachlässigung des Austauschgliedes ändern die Phasenverschiebung beträchtlich, obwohl nicht so stark wie bei den s-Wellen ($L=0$). Für kleine k^2 (d. h. $k^2 \rightarrow 0$) läuft die Phasenverschiebung bei p-Wellen gegen Null; dagegen strebt die Phasenverschiebung bei s-Wellen gegen 180° . Im halbklassischen Bild kann man diesen Unterschied so erklären, daß eine p-Welle wegen ihres höheren Drehimpulses nicht so nah an das Streuzentrum kommt wie eine s-Welle. Im symmetrischen Fall ist es überraschend, daß eine negative Phasenverschiebung auftritt. Bei $k^2 = 2,105$ ist die Phasenverschiebung Null. Wir können uns dies nach dem klassischen Bild folgendermaßen vorstellen: Eine negative Phasenverschiebung bedeutet ein positives (d. h. abstoßendes) Potential und umgekehrt. Das Austauschglied kann man als eine Art Potential ansehen (obwohl im strengen quantenmechanischen Sinn der Austausch ein nicht lokaler Effekt ist), das im symmetrischen Fall umgekehrte Vorzeichen wie das normale Potential hat. Für kleine Energien k^2

Phasenverschiebung für $c=1$

k^2 in At. E.	k	ohne Austausch				symmetrisch				antisymmetrisch			
		λ_n	λ_H	λ_K	λ_t	λ_n	λ_H	λ_K	λ_t	λ_n	λ_H	λ_K	λ_t
0,015	0,123	+ 0,00049	+ 0,00049	+ 0,00049	+ 0,00049	—	— 0,0022	— 0,0021	— 0,0020	—	+ 0,0040	+ 0,0040	+ 0,0041
0,03	0,173	00136	00136	00136	00136	— 0,0056	0058	0057	0055	+ 0,0110	0109	0110	+ 0,0109
0,05	0,224	00287	00286	00287	00285	0113	0116	0114	0115	0228	0227	0228	0226
0,07	0,264	0046	0046	0046	0046	0176	0178	0177	0180	—	0363	0364	0361
0,1	0,316	0077	0077	0077	0076	0273	0276	0274	0274	0586	0586	0587	0586
0,25	0,5	0260	0260	0260	0260	0703	0704	0703	0703	1694	1695	1695	1696
0,3	0,548	—	0325	0325	0325	—	0812	0811	0813	—	2002	2003	2001
0,5	0,707	0584	0582	0582	0582	1085	1084	1082	1084	2864	2857	2857	2857
0,6	0,775	0704	0702	0703	0702	—	1141	1138	1140	—	3113	3113	3112
0,7	0,837	0818	0815	0816	0816	—	1159	1154	1159	—	3294	3294	3294
0,8	0,894	0924	0921	0922	0921	1148	1146	1139	1146	3434	3420	3421	3421
0,9	0,949	—	1020	1021	1020	—	1110	1098	1109	—	3509	3512	3508
1,0	1,000	1115	1112	1112	1112	1057	1055	1039	1054	3580	3569	3575	3568
1,25	1,118	1317	1314	1314	1314	—	0865	0838	0865	—	3640	3662	3638
1,5	1,225	1485	1482	1482	1481	0642	0637	0600	0636	3655	3650	3691	3645
1,75	1,323	1587	1621	1622	1621	—	0399	0356	0400	—	3628	3689	3624
2,0	1,414	—	1737	1740	—	—	0168	0124	—	—	3592	3668	—
2,15	1,466	—	1798	1801	—	—	— 0,0036	— 0,0007	—	—	3566	3648	—
2,3	1,517	—	1853	1856	—	—	+ 0,0091	+ 0,0132	—	—	3540	3625	—
2,5	1,581	—	1918	1922	—	—	0249	0287	—	—	3504	3591	—
2,8	1,673	—	2001	2006	—	—	0465	0497	—	—	3449	3535	—
3,0	1,732	—	2048	2053	—	—	0666	0690	—	—	3307	3385	—

Tab. 1 a, b. λ_n : Die Phasenverschiebung nach der numerischen Lösung der Differentialgleichung. λ_H , λ_K und λ_t : Die Phasenverschiebung nach dem HULTHÉN'schen bzw. Kohn'schen Verfahren bzw. nach dem Gleichungssystem (16).

k^2	ohne Austausch			symmetrisch			antisymmetrisch		
	λ_n	λ_H	λ_K	λ_n	λ_H	λ_K	λ_n	λ_H	λ_K
0,25	+ 0,0260	+ 0,0260	+ 0,0260	— 0,0703	— 0,0705	— 0,0704	+ 0,1694	+ 0,1687	+ 0,1688
0,5	0,0584	0,0582	0,0582	0,1085	0,1126	0,1094	0,2864	0,2787	0,2822
0,8	0,0924	0,0923	0,0923	0,1148	0,1174	0,1133	0,3434	0,3430	0,3450
1,0	0,1115	0,1114	0,1114	0,1057	0,1094	0,1030	0,3580	0,3564	0,3601

Tab. 1 b.

* Ansatz: $R_1(r) = j_1^+(k r) - a_1 [1 - \exp(-2 k r)]^3 j_1^-(k r) + b(k r)^2 \exp(-3 k r)$.

k^2	k	ohne Austausch			symmetrisch			antisymmetrisch		
		c_0	λ_n	$\lambda_{H, K, t}$	c_S	λ_n	$\lambda_{H, K, t}$	c_A	λ_n	$\lambda_{H, K, t}$
0,1	0,32	+ 1,085	+ 0,0077	+ 0,0077	+ 0,91	— 0,0273	— 0,0270	+ 0,97	+ 0,0586	+ 0,0591
0,25	0,50	1,130	0,0260	0,0260	0,945	0,0703	0,0699	1,015	0,1694	0,1692
0,5	0,71	1,162	0,0584	0,0586	0,911	0,1085	0,1080	1,028	0,2864	0,2859
0,8	0,89	1,160	0,0924	0,0932	—	0,1148	—	0,930	0,3434	0,3388
1,0	1,00	1,112	0,1115	0,1124	—	0,1057	—	—	0,3580	—

Tab. 2. Phasenverschiebung bei gleichzeitiger Befriedigung der drei Methoden. Die Werte von c sind graphisch bestimmt mit einem Fehler von ± 2 Einheiten der 3. Dezimalen. λ_n : Die Phasenverschiebung nach der exakten Lösung der Differentialgleichung. $\lambda_{H, K, t}$: Die Phasenverschiebung bei gleichzeitiger Befriedigung der drei Methoden.

c	a_K	L_K/k	$a_K + L_K/k$	a_H	a_t	L_t/k	b_K	b_H	b_t	λ_K	λ_H	λ_t^*
<i>ohne Austausch</i>												
0,7	+0,0155	-0,0079	+0,0077	+0,0075	+0,0075	+0,0000	-0,0062	+0,0078	—	+0,0076	+0,0075	+0,0075
0,91	0102	0026	0077	0076	0076	0000	0013	0034	+0,0035	0077	0076	0076
1,0	0088	0011	0077	0077	0076	0000	-0,0003	0018	0018	0077	0077	0076
1,085	0077	-0,0000	0077	0077	0077	0000	+0,0004	+0,0004	0004	0077	0077	0077
1,3	0056	+0,0021	0076	0076	0078	-0,0003	0014	-0,0026	—	0076	0076	0075
1,8	+0,0029	+0,0046	+0,0075	+0,0070	+0,0080	-0,0013	+0,0025	-0,0074	-0,0099	+0,0075	+0,0070	+0,0067
<i>symmetrisch</i>												
0,7	-0,0511	+0,0250	-0,0261	-0,0269	-0,0278	+0,0009	+0,0728	+0,0276	—	-0,0261	-0,0269	-0,0269
0,91	0272	0001	0271	0271	0271	0000	0398	0394	+0,0394	0270	0270	0270
1,0	0219	-0,0055	0274	0276	0268	-0,0006	0329	0441	0426	0274	0276	0274
1,085	0182	0095	0277	0284	0266	0016	0283	0490	0453	0277	0284	0281
1,3	0119	0164	-0,0283	0355	0257	0045	0207	0715	—	0283	0355	0302
1,8	-0,0054	-0,0238	-0,0291	Im.	-0,0253	-0,0184	+0,0129	+0,0488	+0,0644	-0,0291	Im.	-0,0437
<i>antisymmetrisch</i>												
0,7	+0,1264	-0,0637	+0,0627	+0,0585	+0,0543	+0,0035	-1,3320	-0,0226	—	+0,0626	+0,0584	+0,0577
0,97	0595	-0,0004	0591	0591	0590	+0,0003	0507	0501	-0,0499	0591	0591	0592
1,0	0555	+0,0032	0587	0586	0596	-0,0008	0465	0629	0533	0587	0586	0586
1,085	0460	0116	0576	0570	0612	0045	0370	0557	0518	0575	0569	0567
1,3	0299	0250	0549	0507	0683	0237	0222	0601	—	0549	0507	0446
1,8	+0,0132	+0,0373	+0,0506	+0,0356	+0,0749	-0,1380	-0,0087	-0,1491	-0,0596	+0,0505	+0,0356	+0,0630

b) $k^2 = 0,25$;

c	a_K	L_K/k	$a_K + L_K/k$	a_H	a_t	L_t/k	b_K	b_H	b_t	λ_K	λ_H	λ_t^*
<i>ohne Austausch</i>												
0,900	0,0344	-0,0085	0,0259	0,0258	0,0256	0,0002	0,0081	0,0235	0,0239	0,0259	0,0258	0,0258
0,945	0,0326	-0,0066	0,0260	0,0259	0,0258	0,0002	0,0084	0,0204	0,0208	0,0260	0,0259	0,0260
1,000	0,0305	-0,0045	0,0260	0,0260	0,0258	0,0002	0,0086	0,0168	0,0171	0,0260	0,0260	0,0260
1,015	0,0299	-0,0039	0,0260	0,0260	0,0258	0,0002	0,0087	0,0159	0,0162	0,0260	0,0260	0,0260
1,100	0,0270	-0,0010	0,0260	0,0260	0,0259	0,0001	0,0089	0,0107	0,0108	0,0260	0,0260	0,0260
1,130	0,0260	+0,0000	0,0260	0,0260	0,0260	-0,0000	0,0090	0,0090	0,0090	0,0260	0,0260	0,0260
1,200	0,0239	0,0021	0,0260	0,0260	0,0262	-0,0001	0,0092	0,0052	0,0049	0,0260	0,0260	0,0261
<i>symmetrisch</i>												
0,900	-0,0767	0,0069	-0,0698	-0,0698	-0,0703	0,0005	0,3042	0,0908	0,0918	-0,0697	-0,0697	-0,0697
0,945	-0,0698	-0,0002	-0,0700	-0,0700	-0,0700	-0,0000	0,0968	0,0972	0,0972	-0,0699	-0,0699	-0,0699
1,000	-0,0626	-0,0078	-0,0704	-0,0705	-0,0697	-0,0008	0,0893	0,1049	0,1032	-0,0703	-0,0704	-0,0703
1,015	-0,0609	-0,0096	-0,0705	-0,0706	-0,0696	-0,0010	0,0875	0,1070	0,1048	-0,0704	-0,0705	-0,0705
1,100	-0,0520	-0,0190	-0,0710	-0,0719	-0,0690	-0,0026	0,0785	0,1189	0,1131	-0,0709	-0,0718	-0,0714
1,200	-0,0436	-0,0280	-0,0716	-0,0744	-0,0684	-0,0050	0,0702	0,1341	0,1217	-0,0715	-0,0742	-0,0732
<i>antisymmetrisch</i>												
0,900	0,2101	-0,0372	0,1729	0,1716	0,1650	0,0061	0,1289	-0,0672	-0,0566	0,1711	0,1700	0,1694
0,945	0,1938	-0,0215	0,1723	0,1718	0,1673	0,0043	0,1159	-0,0806	-0,0733	0,1706	0,1701	0,1700
1,000	0,1779	-0,0047	0,1712	0,1712	0,1700	0,0011	0,1028	-0,0972	-0,0933	0,1696	0,1696	0,1696
1,015	0,1715	-0,0005	0,1710	0,1710	0,1708	0,0001	-0,0998	-0,0989	-0,0987	0,1693	0,1693	0,1692
1,100	0,1482	+0,0205	0,1688	0,1681	0,1751	-0,0075	-0,0842	-0,1170	-0,1285	0,1672	0,1666	0,1660
1,200	0,1254	0,0404	0,1658	0,1629	0,1803	-0,0208	-0,0699	-0,3333	-0,1629	0,1643	0,1614	0,1582

* $\lambda_t = \arctan(a_t + L_t/k)$; „—“: nicht gerechnet; Im.: imaginär.

c) $k^2 = 0,5$;

c	a_K	L_K/k	$a_K + L_K/k$	a_H	a_t	L_t/k	b_K	b_H	b_t	λ_K	λ_H	λ_t^*
<i>ohne Austausch</i>												
0,80	+0,0819	-0,0246	+0,0573	+0,0571	+0,0567	+0,0004	+0,0576	+0,1048	+0,1055	+0,0572	+0,0571	+0,0571
1,0	0680	0097	0583	0582	0579	0003	0565	0744	0751	0582	0582	0582
1,1	0622	0037	0586	0586	0584	0001	0531	0599	0603	0585	0585	0585
1,15	0596	-0,0009	0586	0586	0586	0000	0513	0530	0531	0586	0586	0586
1,2	0569	+0,0018	0587	0587	0588	-0,0001	0496	0464	0461	0586	0586	0586
1,3	0519	0068	0587	0586	0592	0006	0466	0337	0327	0586	0585	0586
1,4	+0,0472	+0,0114	+0,0586	+0,0584	+0,0596	-0,0013	+0,0441	+0,0221	+0,0198	+0,0585	+0,0583	+0,0582
<i>symmetrisch</i>												
0,80	-0,1379	+0,0298	-0,1081	-0,1084	-0,1092	+0,0008	+0,1677	+0,1077	+0,1095	-0,1077	-0,1079	-0,1079
0,91	1087	+0,0003	1084	1084	1084	0000	1356	1351	1351	1080	1080	1080
1,0	0926	-0,0161	1086	1088	1077	-0,0011	1224	1552	1529	1082	1084	1084
1,1	0789	0300	1090	1098	1069	0027	1132	1762	1703	1085	1094	1092
1,2	0680	0413	1093	1116	1062	0048	1067	1968	1858	1089	1111	1105
1,3	0590	0507	1097	1143	1056	0074	1016	2182	1998	1092	1138	1135
1,4	-0,0514	-0,0586	-0,1101	-0,1184	-0,1050	-0,0105	+0,0971	+0,2419	+0,2129	-0,1096	-0,1178	-0,1189
<i>antisymmetrisch</i>												
0,80	+0,3997	-0,1118	+0,2879	+0,2848	+0,2764	+0,0079	-0,0814	+0,1189	+0,1336	+0,2803	+0,2775	+0,2770
1,0	3044	-0,0107	2938	2937	2918	+0,0018	0165	+0,0010	+0,0043	2857	2857	2857
1,03	2937	+0,0003	2939	2939	2940	0000	0143	-0,0148	-0,0148	2859	2859	2859
1,1	2701	0236	2938	2934	2992	-0,0061	0115	0589	0589	2857	2854	2852
1,2	2397	0525	2921	2899	3066	0185	0105	0931	1206	2843	2822	2803
1,3	2123	0772	2895	2837	3141	0363	0107	1304	1813	2818	2764	2710
1,4	+0,1877	+0,0982	+0,2860	+0,2751	+0,3215	-0,0610	-0,0107	-0,1615	-0,2415	+0,2785	+0,2685	2548

d) $k^2 = 0,8$;

c	a_K	L_K/k	$a_K + L_K/k$	a_H	a_t	L_t/k	b_K	b_H	b_t	λ_K	λ_H	λ_t^*
<i>ohne Austausch</i>												
0,8	+0,1163	-0,0260	+0,0902	+0,0901	+0,0898	+0,0003	+0,1683	+0,2205	+0,2211	+0,0899	+0,0899	+0,0899
0,93	1072	0154	0918	0918	0914	0003	1640	1942	1949	0915	0915	0914
1,0	1030	0105	0925	0924	0921	0003	1587	1790	1796	0922	0922	0921
1,1	0970	-0,0038	0932	0932	0930	0002	1497	1570	1573	0929	0929	0929
1,16	0934	+0,0001	0935	0935	0935	0000	1440	1439	1439	0932	0932	0932
1,2	0910	0026	0936	0936	0938	-0,0001	1403	1353	1350	0933	0933	0934
1,5	+0,0210	+0,0622	+0,0832	+0,0680	+0,0937	-0,0470	+0,0035	+0,0118	+0,0163	+0,0830	+0,0679	+0,0467
<i>symmetrisch</i>												
0,8	-0,0790	-0,0385	-0,1146	-0,1148	-0,1143	-0,0006	+0,0603	+0,1348	+0,1336	-0,1142	-0,1143	-0,1144
0,93	0720	0424	1144	1149	1137	0012	0798	1689	1663	1139	1144	1144
1,0	0672	0472	1144	1151	1133	0018	0858	1850	1812	1139	1146	1146
1,1	0604	0539	1143	1157	1128	0028	0922	2064	2003	1138	1152	1151
1,2	0542	0601	1142	1167	1123	0041	0968	2264	2172	1138	1162	1159
1,5	-0,0058	-0,1101	-0,1159	Im.	-0,1115	-0,0841	-0,0010	-0,0134	+0,0163	-0,1154	Im.	-0,1950
<i>antisymmetrisch</i>												
0,8	+0,3811	-0,0385	+0,3426	+0,3424	+0,3408	+0,0017	+0,2982	+0,3717	+0,3749	+0,3301	+0,3299	+0,3300
0,93	3522	+0,0003	3524	3524	3525	0000	2838	2833	2832	3388	3388	3388
1,0	3366	0195	3562	3560	3583	-0,0023	2697	2356	2316	3422	3421	3421
1,1	3142	0454	3596	3589	3662	0076	2456	1694	1569	3452	3445	3442
1,2	2915	0697	3612	3588	3737	-0,0161	2200	1069	0819	3466	3446	3435

* $\lambda_t = \arctan(a_t + L_t/k)$

e) $k^2 = 1,0$;

c	a_K	L_K/k	$a_K + L_K/k$	a_H	a_t	L_t/k	b_K	b_H	b_t	λ_K	λ_H	λ_t^*
<i>ohne Austausch</i>												
0,85	+0,1237	-0,0142	+0,1095	+0,1095	+0,1093	+0,0002	+0,2647	+0,2933	+0,2936	+0,1091	+0,1091	+0,1091
0,95	1201	0091	1110	1110	1108	0002	2534	2715	2719	1106	1106	1106
1,0	1181	-0,0064	1117	1117	1115	+0,0002	2471	2597	2601	1112	1112	1112
1,125	1122	+0,0008	1130	1130	1130	-0,0000	2303	2288	2287	1125	1125	1125
1,3	1025	0114	1139	1139	1147	0008	2069	1850	1836	1135	1134	1135
1,45	+0,0935	+0,0207	+0,1142	+0,1139	+0,1158	-0,0020	+0,1887	+0,1493	+0,1456	+0,1138	+0,1134	+0,1134
<i>symmetrisch</i>												
0,85	-0,0081	-0,0962	-0,1043	-0,1056	-0,1043	-0,0013	-0,0294	+0,1734	+0,1707	-0,1040	-0,1052	-0,1052
0,95	0226	0818	1043	1057	1040	0017	+0,0222	1961	1924	1040	1053	1053
1,0	0258	0784	1043	1059	1038	0019	0392	2063	2022	1039	1055	1054
1,125	0286	0755	1042	1064	1034	0029	0677	2295	2232	1038	1062	1061
1,3	0271	0769	1039	1078	1027	0046	0901	2589	2482	1036	1074	1069
1,45	-0,0242	-0,0796	-0,1038	-0,1097	-0,1022	-0,0065	+0,1012	+0,2831	+0,2671	-0,1034	-0,1093	-0,1083
<i>antisymmetrisch</i>												
0,85	+0,3057	+0,0568	+0,3626	+0,3622	+0,3646	-0,0024	+0,6077	+0,4985	+0,4938	+0,3478	+0,3475	+0,3475
0,95	3140	0564	3704	3698	3737	0040	5391	4342	4269	3547	3542	3541
1,0	3130	0605	3736	3728	3780	0051	5111	4009	3913	3575	3567	3568
1,125	3025	0770	3795	3776	3879	0108	4496	3167	2986	3627	3611	3606
1,3	2770	1061	3830	3779	4003	0250	3755	2030	1646	3658	3613	3592
1,45	+0,2508	+0,1318	+0,3826	+0,3724	+0,4102	-0,0451	+0,3218	+0,1138	+0,0491	+0,3654	+0,3565	+0,3501

f) $k^2 = 1,5$;

c	a_K	L_K/k	$a_K + L_K/k$	a_H	a_t	L_t/k	b_K	b_H	b_t	γ_K	γ_H	γ_t^*
<i>ohne Austausch</i>												
0,80	+0,1233	+0,0212	+0,1445	+0,1444	+0,1446	-0,0002	+0,5411	+0,5012	+0,5009	+0,1435	+0,1434	+0,1436
1,0	1303	0190	1493	1493	1496	0004	5069	4684	4677	1482	1482	1481
1,1	1321	0191	1512	1512	1517	0006	4842	4455	4444	1501	1500	1500
1,2	1318	0210	1528	1527	1535	0008	4609	4190	4174	1516	1515	1515
1,3	1297	0243	1540	1538	1551	0012	4383	3906	3881	1528	1526	1527
1,4	+0,1262	+0,0286	+0,1549	+0,1545	+0,1564	-0,0019	+0,4167	+0,3611	+0,3574	+0,1536	+0,1533	+0,1533
<i>symmetrisch</i>												
0,80	+0,1858	-0,2450	-0,0593	-0,0637	-0,0625	-0,0011	-0,2086	+0,2685	+0,2663	-0,0592	-0,0638	-0,0636
1,00	1004	1604	0600	0638	0623	0013	-0,0502	2915	2885	0600	0638	0636
1,1	0734	1336	0602	0638	0621	0016	+0,0127	3010	2974	0601	0638	0637
1,2	0559	1161	0602	0640	0619	0019	0570	3090	3047	0601	0639	0638
1,3	0445	1046	0601	0641	0617	0022	0879	3159	3109	0601	0641	0639
1,4	+0,0368	-0,0968	-0,0600	-0,0644	-0,0616	-0,0026	+0,1098	+0,3222	+0,3162	-0,0599	-0,0643	-0,0641
<i>antisymmetrisch</i>												
0,8	+0,0653	+0,3055	+0,3708	+0,3654	+0,3720	-0,0068	+1,3811	+0,8245	+0,8123	+0,3551	+0,3504	+0,3502
1,0	1837	2032	3868	3821	3915	0100	1,1439	7536	7351	3691	3650	3645
1,1	2187	1745	3932	3882	4000	0125	1,0329	7041	6813	3746	3703	3697
1,2	2376	1604	3982	3926	4076	0161	0,9405	6476	6193	3789	3741	3732
1,3	2452	1566	4018	3950	4143	0211	8627	5870	5515	3820	3762	3746
1,4	+0,2453	+0,1588	+0,4041	+0,3955	+0,4204	-0,0280	+0,7949	+0,5246	+0,4798	+0,3841	-0,3767	+0,3740

* $\lambda_t = \arctg(a_t + L_t/k)$ Tab. 2 a—f. Parameter der Wellenfunktion, Energieintegral und Phasenverschiebung als Funktion des Abschirmparameters c .

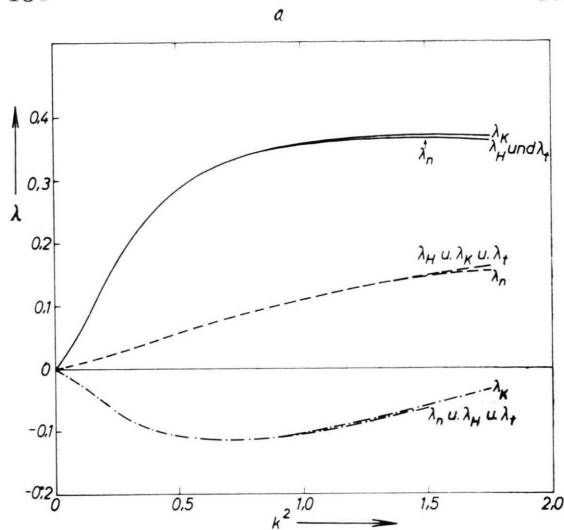


Abb. 1. Die Phasenverschiebung in Radian in Abhängigkeit von der Energie in atomaren Einheiten für $c=1$.
 — für antisymmetrische Wellenfunktion (Triplett-Zustand); - - - - für symmetrische Wellenfunktion (Singulett-Zustand); - · - · ohne Austausch.

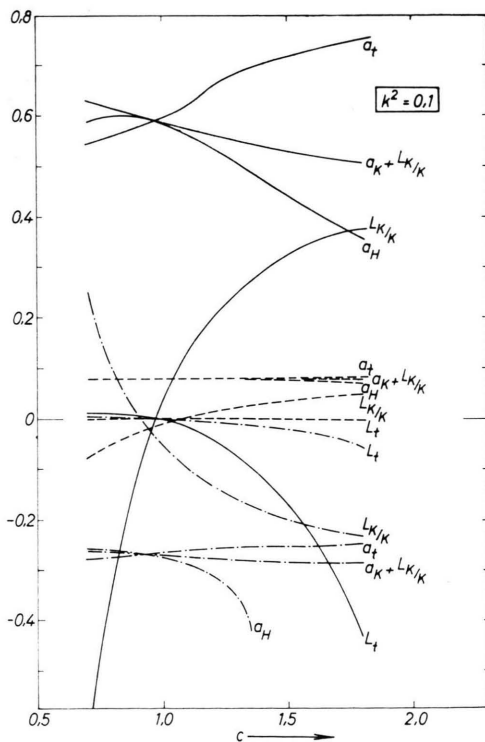


Abb. 2 a. c -Variation für $k^2=0,1$.

Abb. 2 a, 2 b, 2 c, 2 d, 2 e und 2 f. Die Variation des Parameters c im Ansatz für die Wellenfunktion. a_H , a_K , a_t und $a_K + L_K/k$ sind dimensionslose Größen, L_t hat die Dimension (Energie) $^{1/2}$ in atomaren Einheiten.

— für antisymmetrische Wellenfunktion (Triplett-Zustand); - - - - für symmetrische Wellenfunktion (Singulett-Zustand); - · - · ohne Austausch. In den Abb. 2 muß es überall L_K/k statt L_K/K heißen.

überwiegt augenscheinlich das Austauschpotential das normale Potential.

Die nach allen drei Verfahren gerechneten Werte stimmen miteinander im symmetrischen und antisymmetrischen Fall sehr gut überein für kleinere Energien. Die KOHNSCHEN Werte unterscheiden sich etwas für höhere Energien. Das HULTHÉNSCHE Verfahren und die berechneten Werte nach Gl. (16 c) liefern die gleichen Ergebnisse. Es ist erfreulich, daß die Werte nach der letzten Methode mit der exakten Lösung der HARTREE-FOCK-Gleichung von TREFFTZ sehr gut übereinstimmen; die Abweichung ist oft weit unter 1%. Dagegen liefern die KOHNSCHEN Werte für größere Energien eine Abweichung bis zu 6%. Aus Tab. 1 b sieht man, daß die Werte von BDJS bis etwa 4% im symmetrischen Fall und bis 2% im antisymmetrischen Fall von den Werten von TREFFTZ abweichen.

In den Tab. 2 a – f ist der Parameter c für die Fälle $k^2=0,1$; 0,25; 0,5; 0,8; 1,0 und 1,5 variiert. Die entsprechenden Abbildungen sind 2 a – f. Im Fall $k^2=1$ und $c=0,85$ (der symmetrische Fall) liefern $a_K + L_K/k$, $a_t + L_t/k$ und a_H ähnliche Resultate, obwohl L_K/k gegen a_K groß ist. Daß solche

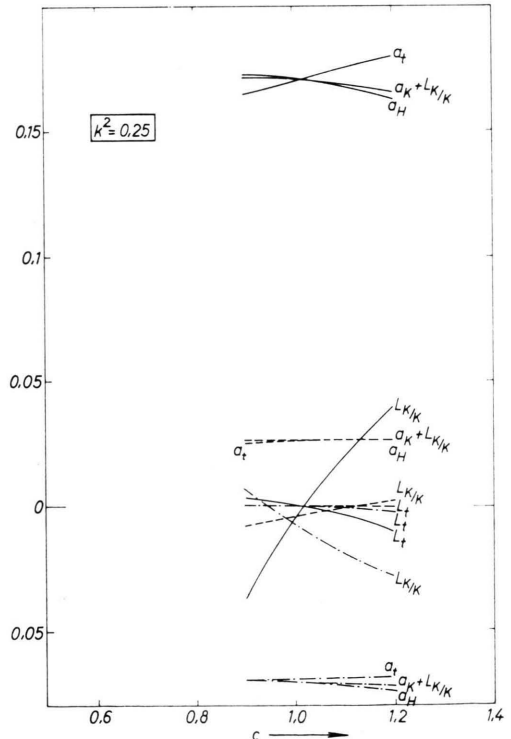
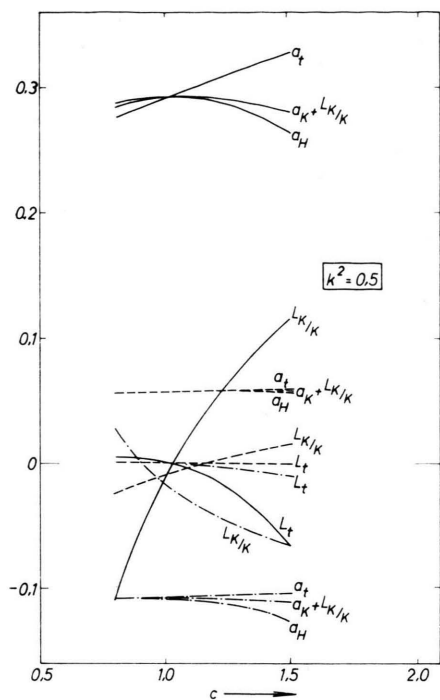
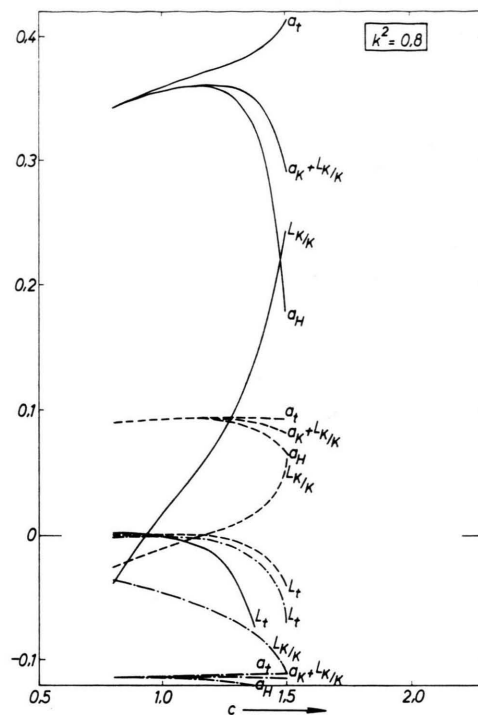
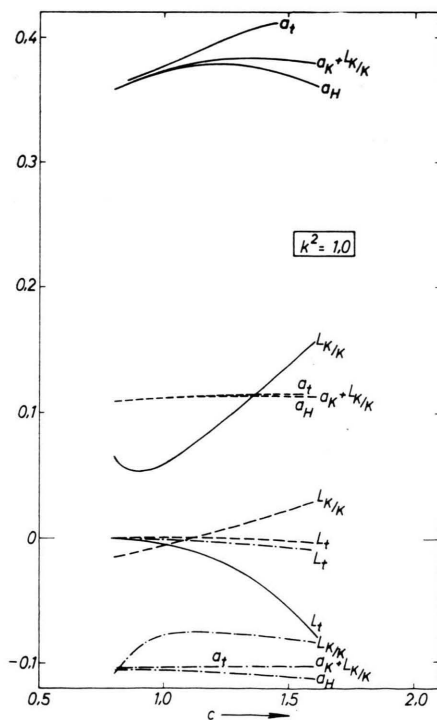
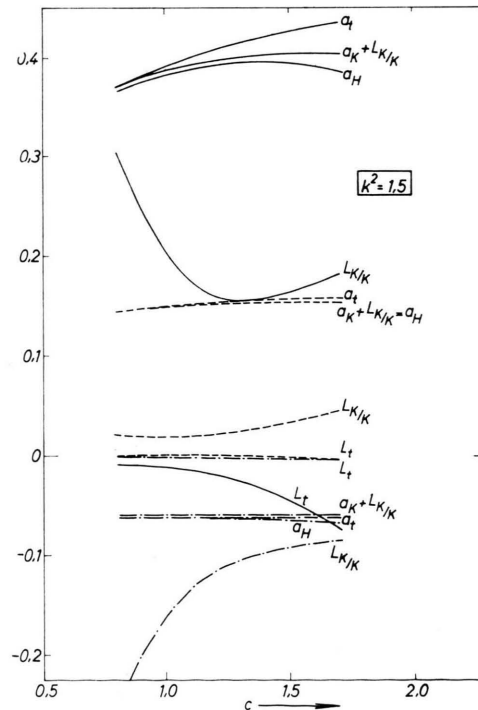


Abb. 2 b. c -Variation für $k^2=0,25$.

Abb. 2 c. c -Variation für $k^2 = 0.5$.Abb. 2 d. c -Variation für $k^2 = 0.8$.Abb. 2 e. c -Variation für $k^2 = 1.0$.Abb. 2 f. c -Variation für $k^2 = 1.5$.

Fälle vorkommen können, kann man folgendermaßen sehen:

Mit dem Ansatz (28) schreibt man Gl. (8) unter Berücksichtigung von $\partial L/\partial b = 0$

$$a_t k = \frac{B_2 + k}{2} a_t + B \quad (\text{s. Anhang III}).$$

Aus (19) hat man

$$\begin{aligned} k(a_K + L_K/k) &= -\langle R_1 | \mathbb{1} | j_1^+ \rangle \\ &= \frac{1}{2} (a k + C_1 a + C_2 b + C) = \frac{B_2 + k}{2} a_K + B. \end{aligned}$$

b ist mit Hilfe von $\partial L/\partial b = 0$ eliminiert worden, und B_2 und B sind dieselben wie in Gl. (29 a). Bildet man die Differenz zwischen diesen beiden Gleichungen, so ergibt sich

$$k(a_K - a_t) + L_K = \frac{B_2 + k}{2} (a_K - a_t)$$

$$\text{oder} \quad L_K = \frac{B_2 - k}{2} \varepsilon,$$

$$\text{wobei} \quad \varepsilon = a_K - a_t.$$

Daraus sieht man, daß L_K für kleine ε groß werden kann, wenn $B_2 - k$ groß ist.

Wählt man in den angeführten Fällen c nach der Bedingung $\partial L/\partial c = 0$, so ergibt die Phasenverschiebung ein wesentlich schlechteres Resultat als für den Fall $c = 1$, im Vergleich mit den numerisch berechneten Werten von CB und TREFFTZ. Aber bestimmt man c nach der Bedingung $L_K = L_t = 0$, so bekommt man in einigen Fällen eine bessere Übereinstimmung mit den numerisch berechneten Werten als bei $c = 1$. Diese c -Werte liegen auch in der Nähe von 1, wie man schon erwartet, wenn man c als eine Art Abschirmungsparameter des gebundenen Elektrons im Grundzustand auffaßt. Deswegen sind die Tab. 1, 3 und 4 mit $c = 1$ berechnet worden (vgl. auch MASSEY-MOISEWITSCH¹⁴).

$k^2 = 1,5$ liefert keinen c -Wert, der $L_t = L_K = 0$ macht. Kein solcher c -Wert existiert bei $k^2 = 1$ im symmetrischen und antisymmetrischen Fall und ebenso nicht bei $k^2 = 0,8$ im symmetrischen Fall. Dies liegt vielleicht daran, daß derselbe Parameter c und nicht zwei verschiedene Parameter c und d , in den beiden Exponential-Funktionen von (28) eingesetzt worden sind.

Tab. 2 stellt die Phasenverschiebung für die besten c -Werte nach der Bedingung $L_t = L_K = 0$ dar, zusammen mit den numerisch erhaltenen Werten von CHANDRASEKHAR-BREEN und TREFFTZ.

k^2 in At. E.	ohne Austausch			symmetrisch			antisymmetrisch		
	a_{II}	$k^{-1}\langle j_1^+ U R_1 \rangle_H$	L_K	a_{II}	$k^{-1}\langle j_1^+ U R_1 \rangle_H$	L_t	a_{II}	$k^{-1}\langle j_1^+ U R_1 \rangle_H$	L_t
0,015	0,0005	0,0005	0,0000	-0,0022	-0,0020	0,0000	0,0041	0,0001	0,0000
0,03	0,014	0,0014	0,0000	0,058	0,055	0,0000	0,113	0,003	-0,0001
0,05	0,029	0,0029	0,0000	0,116	0,110	-0,0001	0,233	0,006	0,0002
0,07	0,046	0,0046	0,0000	0,178	0,172	0,0001	0,371	0,008	0,0003
0,1	0,077	0,0076	0,0000	0,276	0,267	0,0017	0,594	+0,0010	-0,0003
0,25	0,260	0,258	0,0001	0,704	0,696	0,0039	1,703	-0,0023	+0,0006
0,3	0,325	0,323	0,001	0,814	0,805	0,0046	2,015	-0,0042	+0,0010
0,5	0,583	0,579	0,003	1,088	1,076	0,0114	2,937	0,0076	0,0014
0,6	0,703	0,700	0,003	1,146	1,132	0,0185	3,210	-0,0041	+0,0006
0,7	0,817	0,814	0,003	1,164	1,147	0,0287	3,424	+0,0041	-0,0006
0,8	0,924	0,921	0,004	1,151	1,133	0,0422	3,581	0,0175	0,0020
0,9	1,024	1,021	0,002	1,114	1,094	0,0589	3,695	0,0363	0,0037
1,0	1,117	1,115	+0,0002	1,059	1,038	0,0785	3,777	0,0605	0,0053
1,25	1,322	1,323	-0,0001	0,867	0,848	0,1357	3,886	0,1431	0,0092
1,5	1,493	1,496	0,005	0,638	0,623	0,1965	3,913	0,2489	0,0121
1,75	1,635	1,642	0,008	0,400	0,391	0,2500	3,896	0,3626	0,0140

Tab. 3. Energieintegrale zur Kontrolle der verschiedenen Methoden für $c = 1$.

k^2 = 0,015	ohne Austausch				symmetrisch			antisymmetrisch		
	$c=1$				$c=1$			$c=1$		
r	R_n	R_H	R_t	$R_H=R_t$	R_H	R_t	$R_H=R_t$	R_H	R_t	$R_H=R_t$
0,0	0,0000	0,0000	0,0000	Für $c=1$ ist $L_t \equiv 0$; daher sind die Wellenfunktionen R_H und R_t gleich	0,0000	0,0000	Für $c=1$ ist $L_t \approx 0$; die Wellenfunktionen R_H und R_t sind fast gleich	0,0000	0,0000	Für $c=1$ ist $L_t \approx 0$; die Wellenfunktionen R_H und R_t sind fast gleich
0,5	0017	0018	0017		0013	0013		0027	0027	
1,0	0060	0060	0060		0033	0033		0100	0102	
1,5	0126	0125	0125		0077	0079		0191	0194	
2,0	0213	0212	0212		0154	0156		0291	0295	
2,5	0323	0322	0322		0261	0263		0405	0409	
3,0	0457	0456	0456		0395	0397		0537	0541	
3,5	0613	0613	0613		0554	0556		0690	0694	
4,0	0792	0791	0791		0736	0738		0864	0868	
4,5	0992	0992	0992		0940	0942		1060	1064	
5,0	1213	1213	1213		1164	1166		1277	1281	
5,5	1454	1454	1454		1407	1409		1514	1518	
6,0	1713	1713	1713		1669	1671		1770	1773	
6,5	1989	1989	1989		1948	1949		2044	2047	
7,0	2282	2282	2282		2242	2244		2334	2337	
7,5	2589	2589	2589	2551	2553	2640	2642			
$k^2 = 0,05$										
0,0	+0,0000	+0,0000	+0,0000	Für $c=1$ ist $L_t \equiv 0$; daher sind die Wellenfunktionen R_H und R_t gleich	+0,0000	+0,0000	Für $c=1$ ist $L_t \approx 0$; die Wellenfunktionen R_H und R_t sind fast gleich	+0,0000	+0,0000	Für $c=1$ ist $L_t \approx 0$; die Wellenfunktionen R_H und R_t sind fast gleich
0,5	0058	0058	0058		0042	0041		0092	0091	
1,0	0202	0200	0200		0113	0115		0333	0336	
1,5	0418	0414	0414		0263	0267		0632	0639	
2,0	0704	0699	0699		0511	0517		0965	0974	
2,5	1059	1055	1055		0851	0857		1340	1350	
3,0	1481	1478	1478		1271	1277		1765	1775	
3,5	1964	1962	1961		1758	1764		2243	2253	
4,0	2501	2499	2499		2302	2309		2771	2781	
4,5	3085	3084	3083		2894	2900		3344	3353	
5,0	3705	3705	3705		3524	3530		3953	3962	
5,5	4354	4354	4353		4181	4187		4590	4598	
6,0	5020	5020	5020		4856	4862		5243	5251	
6,5	5693	5693	5693		5538	5543		5903	5911	
7,0	6362	6362	6362		6217	6222		6559	6566	
7,5	7016	7016	7016	6881	6886	7199	7206			
$k^2 = 0,1$										
	$c=1$		$c=1,085$ $L_t=L_K=0$		$c=1$	$c=0,91$		$c=1$	$c=0,97$	
0,0	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000
0,5	0116	0117	0117	0120	0080	0079	0077	0189	0189	0186
1,0	0404	0400	0400	0405	0235	0237	0251	0661	0664	0648
1,5	0831	0821	0821	0827	0539	0544	0569	1247	1252	1230
2,0	1387	1376	1376	1382	1019	1026	1053	1902	1909	1886
2,5	2062	2053	2052	2056	1658	1667	1689	2626	2635	2615
3,0	2841	2834	2833	2836	2426	2435	2451	3421	3429	3414
3,5	3701	3696	3695	3698	3291	3301	3311	4275	4284	4271
4,0	4618	4614	4614	4615	4222	4232	4238	5171	5179	5170
4,5	5562	5560	5559	5560	5187	5198	5201	6084	6091	6084
5,0	6504	6502	6502	6503	6156	6167	6168	6986	6992	6987
5,5	7413	7412	7412	7413	7097	7108	7107	7848	7852	7849
6,0	8260	8259	8259	8259	7980	7991	7988	8640	8644	8642
6,5	9014	9014	9014	9014	8775	8786	8783	9335	9337	9337
7,0	9651	9651	9650	0,9651	9456	9465	0,9463	9907	9907	0,9907
7,5	1,0145	—	—	+1,0145	9997	1,0006	+1,0003	1,0331	1,0330	+1,0331

Tab. 4. Die Wellenfunktionen, normiert wie $\sin(kr - \frac{1}{2}\pi l + \lambda_l)$.

Tab. 4 (s. a. Fortsetzung auf den folgenden Seiten).

$k^2 = 0,25$	<i>ohne Austausch</i>				<i>symmetrisch</i>			<i>antisymmetrisch</i>		
	$c=1$		$c=1,13$ $L_t=L_K=0$		$c=1$		$c=0,945$	$c=1$		$c=1,015$
	R_n	R_H	R_t	$R_H=R_t$	R_H	R_t	$R_H=R_t$	R_H	R_t	$R_H=R_t$
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,5	0,0293	0,0278	0,0298	0,0310	0,0189	0,0189	0,0186	0,0485	0,0485	0,0489
1,0	0,1010	0,0939	0,0994	0,1013	0,0631	0,0632	0,0646	0,1559	0,1556	0,1772
1,5	0,2034	0,2002	0,2001	0,2021	0,1402	0,1406	0,1433	0,2895	0,2890	0,2912
2,0	0,3297	0,3263	0,3262	0,3278	0,2703	0,2708	0,2538	0,4363	0,4355	0,4379
2,5	0,4718	0,4691	0,4690	0,4703	0,3854	0,3861	0,3886	0,5871	0,5863	0,5884
3,0	0,6200	0,6181	0,6179	0,6189	0,5344	0,5351	0,5364	0,7328	0,7320	0,7336
3,5	0,7627	0,7616	0,7614	0,7621	0,6847	0,6853	0,6864	0,8634	0,8627	0,8639
4,0	0,8886	0,8879	0,8878	0,8882	0,8233	0,8238	0,8244	0,9912	0,9686	0,9694
4,5	0,9866	0,9863	0,9862	0,9864	0,9382	0,9387	0,9389	1,0409	1,0406	1,0410
5,0	1,0474	1,0473	1,0472	1,0474	1,0190	1,0193	1,0193	1,0714	1,0713	1,0715
5,5	1,0639	1,0639	1,0639	1,0639	1,0573	1,0574	1,0774	1,0554	1,0556	1,0555
6,0	1,0318	1,0318	1,0318	1,0318	1,0476	1,0475	1,0475	0,9056	0,9910	0,9065
6,5	0,9497	0,9480	0,9488	0,9498	0,9874	0,9871	0,9872	0,8776	0,8782	0,8777
7,0	0,8199	0,8199	0,8200	0,8199	0,8775	0,8770	0,8771	0,7202	0,7211	0,7204
7,5	0,6473	0,6474	0,6476	0,6474	0,7219	0,7213	0,7215	0,5254	0,5265	0,5257
$k^2 = 0,5$	$c=1$		$c=1,162$		$c=1$		$c=0,911$	$c=1$		$c=1,028$
0,0	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000
0,5	0589	0599	0599	0635	0382	0382	0376	0911	0911	0929
1,0	1987	1955	1954	2000	1351	1353	1378	2750	2748	2788
1,5	3865	3806	3805	3845	2864	2868	2920	4972	4967	5017
2,0	5954	5900	5898	5928	4773	4780	4837	7207	7200	7246
2,5	7960	7924	7922	7942	6817	6825	6870	0,9097	0,9091	0,9125
3,0	0,9572	0,9555	0,9553	0,9565	0,8672	0,8679	0,8705	1,0339	1,0335	1,0354
3,5	1,0510	1,0506	1,0505	1,0509	1,0012	1,0017	1,0026	1,0711	1,0712	1,0717
4,0	1,0567	1,0569	1,0569	1,0568	1,0569	1,0570	1,0568	1,0098	1,0103	1,0097
4,5	0,9641	0,9646	0,9648	0,9643	1,0172	1,0169	1,0163	0,8499	0,8510	0,8495
5,0	7758	7764	7766	7759	0,8778	0,8772	0,8765	6037	6052	6031
5,5	5070	5075	5078	5070	6476	6467	6463	+0,2942	+0,2960	+0,2936
6,0	+0,1838	+0,1843	+0,1846	+0,1837	3479	3468	3467	-0,0466	-0,0448	-0,0471
6,5	-0,1594	-0,1591	-0,1587	-0,1596	+0,0099	+0,0087	+0,0089	3818	3801	3822
7,0	4847	4844	4841	4849	-0,3293	-0,3304	-0,3301	6738	6725	6741
7,5	-0,7548	-0,7546	-0,7544	-0,7549	-0,6312	-0,6321	-0,6317	-0,8889	-0,8880	-0,8890
$k^2 = 0,8$	$c=1$		$c=1,16$		$c=1$		$c=1$		$c=0,93$	
0,0	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	Werte existieren nicht	+0,0000	+0,0000	+0,0000
0,5	0935	0949	0949	1012	0645	0644		1317	1316	1246
1,0	3078	3038	3038	3108	2268	2271		3876	3876	3757
1,5	5730	5672	5672	5723	4561	4567		6761	6764	6643
2,0	0,8271	0,8231	0,8230	0,8260	7076	7085		0,9201	0,9203	0,9113
2,5	1,0085	1,0071	1,0071	1,0084	0,9235	0,9243		1,0527	1,0526	1,0485
3,0	1,0661	1,0665	1,0666	1,0667	1,0450	1,0453		1,0324	1,0318	1,0325
3,5	0,9705	0,9718	0,9719	0,9712	1,0275	1,0272		0,8491	0,8480	0,8525
4,0	7226	7241	7243	7229	0,8541	0,8532		5256	5239	5307
4,5	+0,3548	+0,3561	+0,3564	+0,3547	5408	5392		+0,1129	+0,1109	+0,1184
5,0	-0,0738	-0,0729	-0,0726	-0,0742	+0,1342	+0,1324		-0,3187	-0,3205	-0,3138
5,5	4891	4885	4883	4896	-0,2966	-0,2984		6923	6937	6888
6,0	8159	8156	8154	8163	6745	6759		-0,9394	-0,9401	-0,9376
6,5	9931	9930	9929	9932	-0,9293	-0,9301		-1,0134	-1,0133	-1,0134
7,0	9863	9864	9865	9862	-1,0124	-1,0123		-0,8992	-0,8982	-0,9007
7,5	-0,7954	-0,7956	-0,7958	-0,7949	-0,9065	-0,9057		-0,6167	-0,6151	-0,6194

$k^2 = 1,0$	ohne Austausch				symmetrisch			antisymmetrisch		
	$c=1$				$c=1$			$c=1$		
r	R_n	R_H	R_t	$R_H=R_t$	R_H	R_t	$R_H=R_t$	R_H	R_t	$R_H=R_t$
0,0	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000	+0,0000		+0,0000	+0,0000	+0,0000
0,5	1159	1172	1172	1159	0834	0834		1547	1544	1231
1,0	3750	3712	3712	3750	2891	2893		4523	4521	3778
1,5	6773	6732	6731	6773	5618	5625		7690	7691	6774
2,0	0,9333	0,9316	0,9315	0,9333	0,8308	0,8312		0,9973	0,9973	0,9335
2,5	1,0621	1,0625	1,0625	1,0621	1,0157	1,0163		1,0567	1,0558	1,0630
3,0	1,0089	1,0106	1,0106	1,0089	1,0467	1,0466		0,9121	0,9098	1,0101
3,5	0,7622	0,7641	0,7642	0,7622	0,8875	0,8866		5801	5766	0,7630
4,0	+0,3592	+0,3608	+0,3610	+0,3592	5502	5486		+0,1251	+0,1208	+0,3595
4,5	-0,1203	-0,1192	-0,1190	-0,1203	+0,0956	+0,0937		-0,3562	-0,3603	-0,1205
5,0	5728	5722	5720	5728	-0,3810	-0,3828		7566	7595	5732
5,5	-0,8959	-0,8956	-0,8955	-0,8959	7728	7741		9841	9852	-0,8962
6,0	-1,0138	-1,0137	-1,0137	-1,0138	9887	9892		9848	9837	-1,0138
6,5	-0,8970	-0,8972	-0,8972	-0,8970	9764	9759		7568	7537	-0,8966
7,0	5709	5712	5713	5709	7366	7352		3518	3475	5702
7,5	-0,1107	-0,1117	-0,1119	-0,1107	-0,3244	-0,3224		+0,1352	+0,1397	+0,1105

Werte existieren nicht

In Tab. 3 ist untersucht worden, inwieweit eine Methode die in ihr nicht berücksichtigte Bedingung erfüllt. Wie schon angedeutet wurde, kann die Güte des HULTHÈNSCHEN Resultats mit Hilfe der Gl. (8) untersucht werden. Ohne Austausch befriedigen die HULTHÈNSCHEN a -Werte (d. h. $a_H = \tan \lambda_H$) die Gl. (8) gut, die größte Abweichung ist nur etwa 0,5%. Schließt man Austausch mit ein, so ist die größte Abweichung etwa 3%, obwohl im allgemeinen die Übereinstimmung befriedigend ist. Dies erklärt die gute Übereinstimmung der numerisch gelösten Werte mit den nach HULTHÈN gerechneten Werten. Beginnt man mit den Gln. (16), so ergibt L_t ein Maß für die Güte. Wiederum ist L_t sehr klein gegen $a_t k$ bei der Rechnung ohne Austausch. Mit Austausch ist L_t für größere Energien nicht mehr sehr klein; obwohl es immer noch nur etwa 2,5% von $a_t k$ beträgt. Dies erklärt auch die guten Resultate bei dieser Methode. Der Vorteil, daß L_t gewöhnlich wesentlich kleiner als L_K ist [wegen der Beziehung (31)], macht diese Methode stabiler als die KOHNSCHE und man hat fast dieselben Ergebnisse wie nach den HULTHÈNSCHEN Verfahren, ohne die quadratische Gleichung lösen zu müssen.

Es ist schwierig, in der gleichen Weise die Richtigkeit der KOHNSCHEN Werte zu beurteilen; aber bei der theoretischen Ableitung dieser Methode ist angenommen worden, daß L_K gegen $a_K k$ klein sein soll. L_K ist deshalb auch tabuliert und ist für größere Energien von gleicher Größenordnung wie $a_K k$.

II. Die Wellenfunktion

Tab. 4 zeigt die berechneten Wellenfunktionen mit und ohne Austausch nach HULTHÈN und den Gln. (16) für $c=1$ und gemäß der Bedingung $L_K = L_t = 0$. Ohne Austausch sind auch die Wellenfunktionen von CB angegeben.

Ohne Austausch ergeben die beiden Variationsverfahren für $c=1$ fast die gleichen Ergebnisse für den ganzen Energiebereich. Die Abweichung von den Werten von CB liegt im allgemeinen in der Größenordnung 1–1,5%, obwohl die größte Abweichung etwa 5% (z. B. bei kleinem r für $k^2=0,25$) ist. Für die Energie $k^2=0,25$ bekommt man fast die gleiche Wellenfunktion wie bei der Rechnung nach BDJS (siehe Tab. 10 der Arbeit von BDJS). Bestimmt man den Parameter c nach der Bedingung $L_K = L_t = 0$, verbessern sich die Wellenfunktionen, verglichen mit den Werten von CB, im ganzen r -Bereich für die Energien $k^2=0,8$ und 1,0. Die Abweichungen sind in diesen Fällen oft weit unter 1%. Dagegen liefert dieses Verfahren bei kleinem r ($r < 1,0$) keine Verbesserung gegenüber der Rechnung mit $c=1$. Bei den Energien $k^2=0,015$ und 0,05 ist L_t für $c=1$ praktisch Null, und ohne Austausch bekommt man in diesen Fällen praktisch die gleichen Werte wie CB.

Die beiden Variationsmethoden liefern für $c=1$ wieder fast die gleiche antisymmetrische Wellenfunktion; die einzige bemerkenswerte Abweichung liegt

k^2	a_{II}	a_K	a_t	a_{II}	a_K	a_t	a_{II}	a_K	a_t
0,015	+0,0005	+0,0005	+0,0005	-0,0022	-0,0014	-0,0020	+0,0040	+0,0033	+0,0041
0,03	0014	0015	0014	0058	0040	0055	0109	0094	0114
0,05	0029	0032	0029	0116	0084	0111	0227	0202	0235
0,07	0046	0053	0046	0178	0135	0172	0363	0333	0374
0,10	0077	0088	0076	0276	0292	0268	0587	0555	0596
0,25	0260	0303	0258	0704	0626	0697	1712	1779	1700
0,30	0325	0382	0323	0814	0729	0806	2029	2107	2011
0,5	0583	0680	0579	1088	0926	1077	2937	3044	2918
0,60	0703	0812	0700	1146	0905	1132	3217	3270	3209
0,70	0817	0929	0814	1164	0816	1148	3418	3369	3425
0,80	0924	1030	0921	1151	0672	1133	3560	3366	3583
0,90	1024	1114	1021	1114	0482	1094	3660	3281	3698
1,00	1117	1181	1115	1059	-0,0258	1038	3728	3131	3780
1,25	1322	1280	1323	0867	+0,0376	0848	3810	2555	3889
1,50	1493	1303	1496	0638	1004	0623	3821	1837	3915
1,75	1635	1280	1642	0400	1533	0391	3796	1125	3898
2,00	1755	1242	1764	0168	1930	0165	3755	0525	3856
2,15	1818	1220	1827	-0,0036	2107	-0,0035	3726	+0,0240	3826
2,50	1942	1184	1953	+0,0249	2372	+0,0245	3654	-0,0199	3748
2,80	+0,2028	+0,1173	+0,2040	+0,0466	+0,2481	+0,0458	+0,3593	-0,0368	+0,3681

k^2	ohne Austausch			symmetrisch			antisymmetrisch		
	b_{II}	b_K	b_t	b_{II}	b_K	b_t	b_{II}	b_K	b_t
0,015	-0,0000	-0,0001	-0,0000	+0,0036	+0,0022	+0,0034	-0,0042	-0,0030	-0,0045
0,03	+0,0000	-0,0002	0,0000	0096	0060	0091	0112	0086	0012
0,05	+0,0002	0004	+0,0003	0190	0127	0181	0224	0182	0237
0,07	0006	0005	0007	0290	0204	0278	0344	0292	0359
0,10	0017	-0,0003	0018	0441	0330	0426	0518	0465	0533
0,25	0168	+0,0086	0171	1049	0892	1032	0972	1028	0933
0,30	0254	+0,0150	0258	1191	1021	1174	-0,0902	1027	-0,0872
0,5	0744	0565	0751	1552	1224	1529	+0,0011	-0,0165	+0,0043
0,60	1061	0858	1068	1663	1172	1635	0728	+0,0640	0742
0,70	1412	1201	1419	1758	1043	1724	1525	1609	1514
0,80	1790	1587	1796	1850	0858	1812	2356	2697	2316
0,90	2187	2012	2192	1950	0635	1908	3191	3873	3122
1,00	2597	2471	2601	2063	+0,0392	2020	4009	5111	3913
1,25	3646	3730	3644	2427	-0,0177	2387	5907	0,8326	5756
1,50	4684	5069	4677	2915	0502	2885	7536	1,1439	7351
1,75	5677	6391	5664	3512	0449	3494	0,8890	1,4146	8691
2,00	6607	7620	6591	4191	-0,0013	4184	1,0002	1,6259	0,9805
2,15	7134	8295	7116	4625	+0,0402	4623	1,0572	1,7222	1,0381
2,50	8272	0,9678	8251	5681	1673	5690	1,1679	1,8685	1,1508
2,80	+0,9155	+1,0671	+0,9134	+0,6603	+0,2949	+0,6617	+1,2439	+1,9286	+1,2289

Tab. 5. Die Werte der Parameter a und b für $c=1$.

bei mittleren r -Werten für $k^2 = 0,8$. Die Bestimmung der Wellenfunktionen mit $L_K = L_t = 0$ ändern die Zahlenwerte für kleines und mittleres r etwa bis 6%. Erfreulich ist, daß die beiden Verfahren auch bei symmetrischen Wellenfunktionen für $c=1$ gleiche Ergebnisse liefern. Sie ändern sich bis etwa 8%, wenn man c nach der Bedingung $L_t = L_K = 0$ bestimmt. In beiden Fällen weichen die hier berechneten Wellenfunktionen von denen nach BDJS in der Nähe des Streuzentrums ab, d. h. bis etwa $r=3,0$. Weiter draußen stimmen sie überein.

Die Parameter a und b für $c=1$ sind in Tab. 5 angegeben.

Alle Rechnungen sind mit der elektronischen Rechenmaschine G 2 ausgeführt worden.

Für klärende Diskussion und Anleitung bin ich Frau-lein Dr. E. TREFFTZ sehr dankbar.

Herrn Professor Dr. L. BIERMANN und Herrn Professor Dr. A. SCHLÜTER danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit und Herrn Professor Dr. W. HEISENBERG für sein Interesse. Ich danke ferner der Rechengruppe des Instituts für die Hilfe bei der Kontrolle der numerischen Rechnungen und bei der Anfertigung der Zeichnungen und Tabellen und Herrn REEH für wertvolle Diskussionen.

Mein Dank gebührt außerdem der Bundesregierung und dem Max-Planck-Institut für Physik für das Stipendium.

Anhang I

a) Wir zeigen, daß

$$a k = -\langle j_l^+ | U | R_l \rangle, \quad \text{wobei} \quad a = \text{tg } \lambda.$$

Im kugelsymmetrischen Feld lautet der Radialteil der SCHRÖDINGER-Gleichung

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

$$\text{wobei} \quad \psi_l(r) = \frac{R_l(r)}{r} Y_l^m(\Theta, \varphi). \quad \text{A I (1)}$$

Die sphärische BESSEL-Funktion $j_l^+(kr)$ erfüllt die

Gleichung

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) j_l^+(kr) = 0; \quad k^2 = 2E. \quad \text{A I (2)}$$

Die Randbedingungen für R_l und $j_l^+(kr)$ sind

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_l(r) \rightarrow \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right) + a \cos \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right),$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} R_l(r) \rightarrow 0,$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} j_l^+(kr) \rightarrow \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right),$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} j_l^+(kr) \rightarrow 0,$$

$$\int_0^\infty j_l^+(kr) \frac{d^2}{dr^2} R_l(r) dr = \left[j_l^+(kr) \frac{dR_l}{dr} \right]_0^\infty - \left[R_l(r) \frac{dj_l^+(kr)}{dr} \right]_0^\infty + \int_0^\infty R_l(r) \frac{d^2 j_l^+(kr)}{dr^2} dr = -ak + \int_0^\infty R_l(r) \frac{d^2 j_l^+(kr)}{dr^2} dr.$$

Wegen der Randbedingung ist

$$\begin{aligned} \int_0^\infty j_l^+ \left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U \right) R_l dr &= -ak + \int_0^\infty R_l \left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U \right] j_l^+(kr) dr \\ &= -ak - \langle R_l(r) | U | j_l^+(kr) \rangle \end{aligned} \quad \text{A I (3)}$$

$$\text{oder} \quad ak = -\langle j_l^+(kr) | U | R_l \rangle,$$

denn R_l befriedigt A I (1).

b) Aus A I (3) folgt

$$\langle j_l^+ | -2\mathfrak{H} + k^2 | R_l(r) \rangle + ak = -\langle R_l | U | j_l^+(kr) \rangle.$$

c) Die Randbedingungen von $f(r) j_l^-(kr)$ sind

$$\lim_{r \rightarrow \infty} f(r) j_l^-(kr) \rightarrow a \cos \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right),$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} f(r) j_l^-(kr) \rightarrow 0,$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty R_l \frac{d^2}{dr^2} (f(r) j_l^-(kr)) dr &= \left[R_l \frac{d}{dr} (f(r) j_l^-(kr)) \right]_0^\infty - \left[f(r) j_l^-(kr) \frac{d^2 R_l}{dr^2} \right]_0^\infty \\ &\quad + \int_0^\infty f(r) j_l^-(kr) \frac{d^2 R_l}{dr^2} dr = -ak + \int_0^\infty f(r) j_l^-(kr) \frac{d^2 R_l}{dr^2} dr. \end{aligned}$$

Da die anderen Größen in \mathfrak{H} vertauschbar sind, folgt

$$\langle R_l | -2\mathfrak{H} + k^2 | f(r) j_l^-(kr) \rangle = -ak + \langle f(r) j_l^-(kr) | -2\mathfrak{H} + k^2 | R_l(r) \rangle.$$

Anhang II

Gl. (29) stellt L , berechnet nach dem Ansatz (28), dar

$$L = A_1' a^2 + A_2' b^2 + A_3' a b + A_4' a + A_5' b + A_0'.$$

Die Werte der A_i' ($i=0, \dots, 5$) als Funktionen der Parameter k und c werden unten angegeben

$$A_i' = A_i^{\text{P.E.}} + A_i^{\text{K.E.}} \pm A_i^{\text{E}},$$

wobei Indizes P.E, K.E und E die Beiträge des Poten-

tials, der kinetischen Energien bzw. des Austauschgliedes bedeuten. Wir haben die folgenden Abkürzungen benutzt:

$$x_\nu = \nu c + 1, \quad y_\nu = \nu c + 2, \quad \lambda_\nu = \nu^2 (\nu^2 + 4k^2),$$

$$\tilde{\lambda}_\nu = y_\nu^2 (y_\nu^2 + 4k^2) = (\nu c + 2)^2 [(\nu c + 2)^2 + 4k^2],$$

$$\mu_\nu = \frac{2k}{\nu c + 2} = \frac{2k}{y_\nu}, \quad K_\nu = \frac{1}{\nu^2 + 4k^2/c^2},$$

$$\tilde{K}_\nu = \frac{c^2}{y_\nu^2 + 4k^2} = \frac{1}{(\nu + 2/c)^2 + 4k^2/c^2};$$

$$\begin{aligned}
A_1^{\text{K.E}} &= + \sum_{\nu=0}^4 (-1)^{\nu+1} \binom{4}{\nu} \left[\frac{9}{2} \frac{c^3}{k^2} \left(\frac{\nu}{2} + 1 \right) \ln \lambda_{\nu+2} + 3 \frac{k^2}{c} \frac{6}{\nu+2} K_{\nu+2} \right], \\
A_2^{\text{K.E}} &= \sum_{\nu=0}^6 (-1)^{\nu+1} \binom{6}{\nu} \left[\frac{c^3}{40 k^2} (\nu+2) (3 \nu^2 + 7 \nu + 10) \ln \lambda_{\nu+2} + \frac{k^2}{c} \frac{3 \nu^2 + 7 \nu + 10}{5(\nu+2)} K_{\nu+2} \right], \\
A_3^{\text{K.E}} &= \sum_{\nu=0}^5 (-1)^{\nu} \binom{5}{\nu} \left[\frac{3 c^3}{10 k^2} (\nu+2) (3 \nu + 5) \ln \lambda_{\nu+2} + \frac{12 k^2}{5 c} \frac{3 \nu + 5}{\nu+2} K_{\nu+2} \right], \\
A_4^{\text{K.E}} &= -k, \quad A_5^{\text{K.E}} = 0, \quad A_0^{\text{K.E}} = 0, \\
A_1^{\text{P.E}} &= \sum_{\nu=0}^5 (-1)^{\nu} \binom{5}{\nu} \left[\frac{3 c^2}{2 k^2} (\nu+1) \ln \tilde{\lambda}_{\nu+1} + \frac{3 c}{k^2} \ln \tilde{\lambda}_{\nu+1} \right] + \sum_{\nu=0}^6 (-1)^{\nu} \binom{6}{\nu} \left[-\frac{1}{2} \ln \tilde{\lambda}_{\nu} + 4 k^2 c \frac{\nu c + 2}{\tilde{\lambda}_{\nu}} \right], \\
A_2^{\text{P.E}} &= \sum_{\nu=0}^6 (-1)^{\nu+1} \binom{6}{\nu} \left[\frac{c^2}{4 k^2} (\nu^2 + 2 \nu + 4) \ln \tilde{\lambda}_{\nu+2} + \frac{c}{k^2} (\nu+1) \ln \tilde{\lambda}_{\nu+2} + \frac{1}{2} \ln \tilde{\lambda}_{\nu+2} - 4 k^2 c \frac{(\nu+2) c + 2}{\tilde{\lambda}_{\nu+2}} \right], \\
A_3^{\text{P.E}} &= \sum_{\nu=0}^6 (-1)^{\nu+1} \binom{6}{\nu} \left[\frac{c^2}{2 k^2} (\nu+1)^2 \ln \tilde{\lambda}_{\nu+1} + \frac{c}{k^2} (\nu+1) \ln \tilde{\lambda}_{\nu+1} + \ln \tilde{\lambda}_{\nu+1} - 8 k^2 c \frac{(\nu+1) c + 2}{\tilde{\lambda}_{\nu+1}} \right], \\
A_4^{\text{P.E}} &= \sum_{\nu=0}^2 (-1)^{\nu+1} \binom{2}{\nu} \left[\frac{3 c^2}{k^2} (\nu+1) \operatorname{arc tg} \mu_{\nu+1} + \frac{6 c}{k^2} \operatorname{arc tg} \mu_{\nu+1} \right] + \sum_{\nu=0}^3 (-1)^{\nu} \binom{3}{\nu} \left[2 \operatorname{arc tg} \mu_{\nu} - \frac{4 k}{c^2} \tilde{K}_{\nu} \right], \\
A_5^{\text{P.E}} &= \sum_{\nu=0}^3 (-1)^{\nu} \binom{3}{\nu} \left[\frac{c^2}{k^2} (\nu+1)^2 \operatorname{arc tg} \mu_{\nu+1} + \frac{2 c}{k^2} (\nu+1) \operatorname{arc tg} \mu_{\nu+1} + 2 \operatorname{arc tg} \mu_{\nu+1} - \frac{4 k}{c^2} \tilde{K}_{\nu+1} \right], \\
A_0^{\text{P.E}} &= -1 + \frac{2+k^2}{2(1+k^2)} + \frac{1}{2} \ln(1+k^2), \\
A_1^{\text{E}} &= \sum_{\nu=0}^3 (-1)^{\nu} \binom{3}{\nu} \sum_{\mu=0}^3 (-1)^{\mu} \binom{3}{\mu} \left\langle \frac{x_{\nu} (3 k^2 - 6 x_{\mu}^2 - x_{\mu}^4 / k^2)}{4 (x_{\mu}^2 + k^2)^3} [\ln \{ (x_{\mu} + x_{\nu})^2 ((x_{\mu} + x_{\nu})^2 + 4 k^2) \} - 2 \ln (x_{\nu}^2 + k^2)] \right. \\
&\quad - \frac{4 k x_{\nu} x_{\mu}}{(x_{\mu}^2 + k^2)^3} \operatorname{arc tg} \frac{2 k}{x_{\nu} + x_{\mu}} - \frac{x_{\mu}}{2 (x_{\mu}^2 + k^2) (x_{\mu} + x_{\nu})^2} - \frac{4 k^2 (8 x_{\mu} + 3 x_{\nu}) + (x_{\mu} + x_{\nu})^2 (5 x_{\mu} + 2 x_{\nu})}{2 (x_{\mu}^2 + k^2) [(x_{\mu} + x_{\nu})^2 + 4 k^2]^2} \\
&\quad \left. + \frac{4 k^2 (k^2 - 2 x_{\mu}^2 - x_{\mu} x_{\nu})}{(x_{\mu}^2 + k^2)^2 (x_{\nu} + x_{\mu}) [(x_{\mu} + x_{\nu})^2 + 4 k^2]} \right\rangle.
\end{aligned}$$

A_2^{E} ist gebaut wie A_1^{E} , nur ist innerhalb der Klammer $\langle \dots \rangle$ μ durch $\mu+1$ und ν durch $\nu+1$ zu ersetzen.

A_3^{E} besteht aus 2 Gliedern, die beide wie A_1^{E} gebaut sind; im 1. Glied ist innerhalb $\langle \dots \rangle$ μ durch $\mu+1$ zu ersetzen (ν bleibt unverändert), im 2. Glied ist innerhalb $\langle \dots \rangle$ ν durch $\nu+1$ zu ersetzen (μ bleibt unverändert).

$$\begin{aligned}
A_4^{\text{E}} &= \sum_{\nu=0}^3 (-1)^{\nu} \binom{3}{\nu} \left\langle \frac{2 k x_{\nu}}{(1+k^2)^3} [-\ln y_{\nu}^2 (y_{\nu}^2 + 4 k^2) + 2 \ln (x_{\nu}^2 + k^2)] + \frac{x_{\nu} (1+6 k^2 - 3 k^4)}{2 k^2 (1+k^2)^3} \operatorname{arc tg} \frac{2 k}{y_{\nu}} - \frac{k}{2 (1+k^2) y_{\nu}^2} \right. \\
&\quad + \frac{1}{(1+k^2) (y_{\nu}^2 + 4 k^2)} \left[-\frac{20 k^3 + 3 y_{\nu}^2 k}{2 (y_{\nu}^2 + 4 k^2)} + \frac{2 k (1-k^2)}{1+k^2} + \frac{y_{\nu} (y_{\nu}^2 + 6 k^2)}{k (y_{\nu}^2 + 4 k^2)} - \frac{8 k^3}{y_{\nu} (1+k^2)} \right] \\
&\quad - \frac{2 k x_{\nu}}{(x_{\nu}^2 + k^2)^3} \ln \frac{y_{\nu}^2 + 4 k^2}{y_{\nu}^2} + \frac{(x_{\nu}^4 + 6 k^2 x_{\nu}^2 - 3 k^4)}{2 k^2 (x_{\nu}^2 + k^2)^3} \left[\operatorname{arc tg} \frac{2 k}{y_{\nu}} - 2 \operatorname{arc tg} k \right] \\
&\quad + \frac{k}{2 (x_{\nu}^2 + k^2) y_{\nu}^2} + \frac{k}{(x_{\nu}^2 + k^2) (y_{\nu}^2 + 4 k^2)} \left[-2 + \frac{y_{\nu}^2 - 4 k^2}{2 (y_{\nu}^2 + 4 k^2)} + \frac{x_{\nu} y_{\nu}}{k^2} + \frac{2 x_{\nu} y_{\nu}}{y_{\nu}^2 + 4 k^2} \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{4 x_{\nu} (y_{\nu}^2 + 2 k^2)}{(x_{\nu}^2 + k^2) y_{\nu}} + \frac{2 (x_{\nu}^2 - k^2)}{x_{\nu}^2 + k^2} \right] \right\rangle.
\end{aligned}$$

A_5^E ist gebaut wie A_4^E , nur ist innerhalb der Klammer $\langle \dots \rangle$ ν durch $\nu+1$ zu ersetzen.

$$A_0^E = \frac{-3k^4 + 6k^2 + 1}{4k^2(1+k^2)^3} \ln(1+k^2) - \frac{4k}{(1+k^2)^3} \arctg k + \frac{3k^4 + 21k^2 - 2}{8(1+k^2)^3}.$$

Anhang III

Mit der Wellenfunktion der Art (10) kann man L (bzw. L_K bzw. L_t) in der Form (13) schreiben. Eliminiert man b und c mit Hilfe der Bedingungen

$$b(\partial L / \partial b) = 0 \quad \text{und} \quad c(\partial L / \partial c) = 0,$$

so erhält man L als eine quadratische Funktion von a (bzw. a_K und a_t).

(a) Also ist $L_K = M_1 a_K^2 + M_2 a_K + M_0$

und $L_H = M_1 a_H^2 + M_2 a_H + M_0 = 0,$

wobei die M Funktionen der A_i sind. Im speziellen Fall (28) hat man $M_i = B_i$ ($i = 0, \dots, 2$), [vgl. Gl. (29) und (29 a)]:

$$\frac{\partial L_K}{\partial a_K} = 2 M_1 a_K + M_2 = -k, \quad a_K = -\frac{M_2 + k}{2 M_1},$$

$$L_H = M_1 a_H^2 + M_2 a_H + M_0,$$

$$a_H = -\frac{M_2}{2 M_1} \pm \frac{\sqrt{M_2^2 - 4 M_0 M_1}}{2 M_1},$$

$$a_{H1} - a_{H2} = \frac{1}{M_1} \sqrt{M_2^2 - 4 M_0 M_1} = d,$$

$$a_{H1} + a_{H2} - 2 a_K = k / M_1 = f.$$

Also

$$L_K = -\frac{M_2^2}{4 M_1} + \frac{k^2}{4 M_1} + M_0 = \frac{-(M_2^2 - 4 M_0 M_1) + k^2}{4 M_1},$$

$$\frac{L_K}{k} = \frac{f^2 - d^2}{4 f}, \quad \text{III a(1)}$$

(b) $a_t k = -\langle R_l | \mathcal{U} | j l^+ \rangle = \langle R_l | -2 H + k^2 | j l^+ \rangle$
 $= \frac{1}{2} \langle R_l | -2 \mathfrak{H} + k^2 | j l^+ \rangle + \frac{1}{2} a_t k + \frac{1}{2} \langle j l^+ | -2 \mathfrak{H} + k^2 | R_l \rangle$
 $= \frac{k + A_7}{2} a_t + \frac{A_8}{2} b_t + \frac{A_9}{2} c_t + A_0$

[vgl. (14) und Anhang I, b_t und c_t sind Parameter der Form (10)]. Nach der Elimination von b_t und c_t mit Hilfe der Gln. $b(\partial L / \partial b) = 0$ und $c(\partial L / \partial c) = 0$ bekommt man

$$a_t k = \frac{M_2 + k}{2} a_t + M_0, \quad a_t = \frac{2 M_0}{k - M_2}.$$

Damit ist

$$L_t = M_1 a_t^2 + M_2 a_t + M_0 = \frac{M_0}{(k - M_2)^2} \cdot [-M_2^2 + 4 M_1 M_0 + k^2].$$

Nach IIIa(1) ist

$$L_K = \frac{-M_2^2 + 4 M_1 M_0 + k^2}{4 M_1},$$

also $L_t = L_K \frac{4 M_0 M_1}{(k - M_2)^2} = L_K a_t \frac{2 M_1}{k - M_2}.$

Nun ist nach IIIa

$$a_K + f = -\frac{k + M_2}{2 M_1} + \frac{k}{M_1} = \frac{k - M_2}{2 M_1},$$

$$L_t = \frac{L_K a_t}{f + a_K} = \frac{L_K a_t}{a_{H1} + a_{H2} - a_K} \cong L_K \frac{a_t}{a_{H1}},$$

wenn

$$a_{H1} \gg a_{H2} - a_K,$$

wie es oft der Fall ist.