

Diffusionstheorie für polarisierte Teilchen*

Von L. WALDMANN

Aus dem Max-Planck-Institut für Chemie (Otto-Hahn-Institut), Mainz
(Z. Naturforsch. 15 a, 19–30 [1960]; eingegangen am 23. Oktober 1959)

The multiple elastic scattering of polarized particles is governed by a generalized BOLTZMANN equation. The properties of the collision brackets connected with this equation—definiteness and invariances—are studied. Then the state near equilibrium, i. e. nearly isotropic distribution of velocities and spins, is considered (diffusion theory). To describe an ensemble of spin $\frac{1}{2}$ -particles one needs in the most simple non-equilibrium approximation two scalars (one pseudo) and four vectors (two pseudo). The scalars are: density of number and helicity. The vectors are: particle stream, density of velocity-spin vector ($\mathbf{v} \times \mathbf{s}$), stream of helicity and density of transverse spin. These scalars and vectors are connected by linear differential equations (diffusion-relaxation-equations). The entropy and the ONSAGER-CASIMIR relations are discussed. The theory, supplemented by boundary conditions, is applied on the multiple scattering of spin $\frac{1}{2}$ -particles by a thick foil.

Polarisierte Teilchen werden in der heutigen Kernphysik ausgiebig untersucht. Meistens geht es um die Messung geringer Intensitäten, so daß man dicke Präparat- oder Streuschichten verwenden möchte. Damit ist das Problem der Vielfachstreuung polarisierter Teilchen akut.

Die Ausbreitung eines mehr oder weniger diffusen Strahls polarisierter Teilchen durch ein Medium von Streuzentren, welche ihrerseits gerichtet sein können, stellt zugleich ein Grundproblem der kinetischen Theorie von Partikeln mit inneren Rotationsfreiheitsgraden dar und beansprucht auch von dieser Seite gesehen das Interesse.

Der Theorie ist eine durch Einbeziehung des Spins verallgemeinerte BOLTZMANN-Gleichung zugrunde zu legen¹. Davon ausgehend haben MÜHLSCHLEGEL und KOPPE² sowie MÜHLSCHLEGEL³ die Vielfachstreuung polarisierter Elektronen an COULOMBSCHEN Streuzentren behandelt. Sie haben sich dabei speziell an MOLIÈRES Theorie⁴ angeschlossen und den Parallelfall betrachtet, in welchem die kollimiert auf die Streufolie auftreffenden Teilchen stets achsennah bleiben sollen.

Der entgegengesetzte Grenzfall, der eines fast völlig diffusen (isotropen) Strahls, bildet den Gegenstand der vorliegenden Arbeit. Seine Behandlung gibt Aufschluß über das Verhalten von Teilchen beim Durchqueren dicker Schichten und läuft auf

die Aufstellung einer Diffusionstheorie unter Einbeziehung des Spins hinaus. Man kann auch sagen, daß es sich um die Untersuchung des Verhaltens nahe beim thermischen Gleichgewicht handelt, wenigstens was die Orientierung anbelangt (Energieaustausch mit den Streuern werden wir nicht ins Auge fassen). Dies ist im Rahmen der kinetischen Theorie — „hydrodynamische Näherung“ — von Interesse und gibt zugleich Anlaß, die allgemeinen Eigenschaften des Stoßoperators in der BOLTZMANN-Gleichung für Spinteilchen zu studieren. Insbesondere bietet die Kinetik der Spinteilchen ein durchsichtiges Beispiel für das Zustandekommen der ONSAGER-CASIMIRSCHEN Symmetriebeziehungen.

Die Diffusionstheorie für Teilchen ohne Spin ist mit den Namen BOTHE⁵ sowie BETHE, ROSE und SMITH⁶ verknüpft. Als Kugelfunktionsmethode ist die Näherung neuerdings viel weiter getrieben worden⁷. Wir werden uns bei den Spinteilchen mit der einfachsten Näherung begnügen — Entwicklung nur bis zu Vektoren —, aber Unabhängigkeit von der Geometrie der Anordnung wahren. Generell sei betont, daß für die meisten Anwendungen die Diffusionsnäherung nur ein qualitatives Bild gibt, weil sie die Übergangseffekte, die bei der Vielfachstreuung gewöhnlich eine wichtige Rolle spielen, nur ganz grob, durch mehr oder weniger willkürliche Randbedingungen, erfaßt⁸.

* Vorgetragen auf der Physikertagung in Berlin, Sept. 1959; s. a. Nuovo Cimento 14, 898 [1959].

¹ L. WALDMANN, Z. Naturforsch. 12 a, 660 [1957]; 13 a, 609 [1958].

² B. MÜHLSCHLEGEL u. H. KOPPE, Z. Phys. 150, 474 [1958].

³ B. MÜHLSCHLEGEL, Z. Phys. 155, 69 [1959].

⁴ G. MOLIÈRE, Z. Naturforsch. 3 a, 78 [1948].

⁵ W. BOTHE, Z. Phys. 54, 161 [1929].

⁶ H. A. BETHE, M. E. ROSE u. L. P. SMITH, Proc. Amer. Phil. Soc. 78, 573 [1938].

⁷ z. B.: B. CARLSON, Neutron Diffusion — Spherical Harmonics Theory MDDC 236 [1946]. — C. MARK, The Spherical Harmonics Method CRT 340 [1957].

⁸ Nach Beendigung dieser Arbeit erschien die englische Übersetzung der Abhandlung von I. N. TOPTYGIN, Sov. Phys. 36, 340 [1959] (J. Exp. Theor. Phys., USSR 36, 488 [1959]), in welcher die Streuung polarisierter Teilchen durch Entwicklung nach skalaren und vektoriellen Kugelfunktionen berechnet wird.



I. Allgemeines

§ 1. Boltzmann-Gleichung

Es sei angenommen, daß die Teilchen, deren Streuung an festen ruhenden Zentren wir untersuchen, so schnell sind, daß wir sie – außer während des Stoßes – klassisch durch Ort \mathbf{r} und Geschwindigkeit \mathbf{v} beschreiben dürfen. Der Geschwindigkeitsbetrag v sei für alle Teilchen gleich, so daß, äquivalent mit \mathbf{v} , auch der Einheitsvektor $\mathbf{e} = \mathbf{v}/v$ zur Beschreibung ausreicht. Dazu kommt, als quantenmechanische Variable, der vektorielle Spinoperator \mathbf{s} der Teilchen, mit seinen drei nicht-kommutativen Komponenten:

$$\begin{aligned} s_x s_y - s_y s_x &= i s_z, \quad \text{zyklisch,} \\ s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 &= S(S+1). \end{aligned} \quad (1.1)$$

Eine Gesamtheit solcher Teilchen wird durch eine hermitesche Verteilungsmatrix $f_{MN}(t, \mathbf{r}, \mathbf{e})$ charakterisiert – M und N sind Spinindizes – oder, was dasselbe ist, durch einen hermiteschen Verteilungsoperator $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{e}, \mathbf{s})$. Letzterer ist ein Polynom in den Komponenten des Spinoperators, höchstens vom Grad $2S$ bei Teilchen von Spin S . Wir werden uns im folgenden der Operatorschreibweise bedienen.

Die physikalische Bedeutung des Verteilungsoperators ergibt sich aus der v. NEUMANNschen Mittelwertformel. Diese liefert zunächst als zeit- und ortsabhängige Teilchendichte⁹

$$n^{(1)} = \text{Sp} \int f \, d\mathbf{e},$$

wo Sp die Spurbildung über die Spinindizes und $d\mathbf{e}$ das Raumwinkelement der Geschwindigkeitsrichtung meint. Weiter gilt für den zeit- und ortsabhängigen Mittelwert $\bar{\Psi}$ eines beliebigen, auf die Spinindizes wirkenden Operators $\Psi(\mathbf{e}, \mathbf{s})$

$$n^{(1)} \bar{\Psi} = \text{Sp} \int \Psi f \, d\mathbf{e}.$$

Speziell die Spindichte selbst ist also durch

$$n^{(1)} \bar{\mathbf{s}} = \text{Sp} \int \mathbf{s} f \, d\mathbf{e}$$

dargestellt. Zwecks kürzerer Schreibweise definieren

wir das innere Produkt zweier beliebiger Operatoren $\Psi(\mathbf{e}, \mathbf{s})$, $\Phi(\mathbf{e}, \mathbf{s})$ durch

$$(\Psi, \Phi) = \text{Sp} \int \Psi \Phi \, d\mathbf{e}. \quad (1.2)$$

Die Operatoren können außerdem von Zeit und Ort abhängen, was dann auch von ihrem inneren Produkt gilt. Man hat hiermit

$$n^{(1)} = (1, f); \quad n^{(1)} \bar{\Psi} = (\Psi, f) \quad (1.3)$$

als Kurzschreibweise für die Teilchendichte und den allgemeinen lokalen Mittelwert.

Der Stoß mit einem Streuzentrum werde durch den dimensionslosen Streuoperator $a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s})$ beschrieben. Es sei ein Teilchen gegeben, welches als ungestörte ebene Welle mit der Wellenzahl k in Richtung \mathbf{e} und mit der Spinfunktion χ einfällt. Der Ortsvektor sei mit $\mathbf{r}' = \mathbf{r}' \mathbf{e}'$ bezeichnet. Unter dem Einfluß des im Ursprung befindlichen Streuzentrums bildet sich – asymptotisch – die Gesamtwelle aus

$$\psi \approx \left[\exp(i k \mathbf{r}' \mathbf{e} \mathbf{e}') + \frac{e^{i k \mathbf{r}'}}{k \mathbf{r}'} a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s}) \right] \chi.$$

Der Spin des Teilchens ändert sich beim Stoß entsprechend der Spinabhängigkeit des Streuoperators; ein mit der Spinamplitude χ in Richtung \mathbf{e} einfallendes Teilchen verläßt den Streuer in der Richtung \mathbf{e}' mit der Spinamplitude $a\chi$. Für die adjungierte Wellenfunktion (Zeilenvektor) schreiben wir

$$\psi^\dagger \approx \chi^\dagger \left[\exp(-i k \mathbf{r}' \mathbf{e} \mathbf{e}') + a^\dagger(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{s}) \frac{e^{-i k \mathbf{r}'}}{k \mathbf{r}'} \right].$$

Dabei wurde, als formal vorteilhaft, ein adjungierter Streuoperator a^\dagger durch die Festsetzung

$$a^\dagger(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{s}) = a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s})^\dagger$$

eingeführt.

Die Veränderung des Verteilungsoperators durch die Bewegung der Teilchen und durch die Stöße mit den statistisch verteilten Streuzentren – n_s pro Volumeinheit – ist nun durch die folgende BOLTZMANN-Gleichung¹ gegeben:

$$\frac{\partial f(\mathbf{e}, \mathbf{s})}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f(\mathbf{e}, \mathbf{s})}{\partial \mathbf{r}} = -I(f) \quad (1.4)$$

mit dem Stoßoperator

$$I(f) = -\omega \left[\int a(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{s}) f(\mathbf{e}', \mathbf{s}) a^\dagger(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s}) \, d\mathbf{e}' - \frac{2\pi}{i} (a(\mathbf{e}, \mathbf{e}, \mathbf{s}) f(\mathbf{e}, \mathbf{s}) - f(\mathbf{e}, \mathbf{s}) a^\dagger(\mathbf{e}, \mathbf{e}, \mathbf{s})) \right]. \quad (1.5)$$

Darin bedeutet $\omega = n_s v/k^2$ eine reziproke Zeit. Die Abhängigkeit der Verteilung f von t und \mathbf{r} ist nicht explizit angedeutet. Kugelsymmetrie der Streuer ist

⁹ Wir schreiben $n^{(1)}$ statt n im Hinblick auf später (§ 4).

nicht notwendig vorausgesetzt; im Streuoperator könnte z. B. ein weiterer Vektor vorkommen, welcher eine ausgezeichnete Richtung der Streuzentren angibt. Es gilt aber jedenfalls das Schattentheorem:

$$\int a(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{s}) a^\dagger(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s}) d\mathbf{e}' = \int a^\dagger(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{s}) a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s}) d\mathbf{e}' = \frac{2\pi}{i} (a(\mathbf{e}, \mathbf{e}, \mathbf{s}) - a^\dagger(\mathbf{e}, \mathbf{e}, \mathbf{s})). \quad (1.6)$$

Die obige BOLTZMANN-Gleichung gewährleistet, zusammen mit dem Schattentheorem, die Teilchen-erhaltung und – nach STÜCKELBERG–PAULI¹⁰ – die Gültigkeit des H-Theorems.

§ 2. Stoßklammern. Defintheit und Invarianzen

An der Definition (1.5) des Stoßoperators liest man die Relation

$$I(f)^\dagger = I(f^\dagger) \quad (2.1)$$

ab. Angewandt auf hermitesches $f = f^\dagger$ besagt diese, daß

$$I(f)^\dagger = I(f).$$

Somit ist nach der BOLTZMANN-Gleichung der Verteilungsoperator hermitesch, wenn er zur Zeit $t=0$ diese Eigenschaft besitzt. Dann sind die nach (1.3) gebildeten Mittelwerte reell.

$$K(f) = -\omega \left[\int a^\dagger(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{s}) f(\mathbf{e}', \mathbf{s}) a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s}) d\mathbf{e}' + \frac{2\pi}{i} (a^\dagger(\mathbf{e}, \mathbf{e}, \mathbf{s}) f(\mathbf{e}, \mathbf{s}) - f(\mathbf{e}, \mathbf{s}) a(\mathbf{e}, \mathbf{e}, \mathbf{s})) \right]. \quad (2.4)$$

Explizites Anschreiben der entsprechenden Stoßklammern zeigt, daß die Relation gilt

$$(\Psi, I(\Phi)) = (\Phi, K(\Psi)). \quad (2.5)$$

Im Gegensatz dazu sind bekanntlich die bilinearen CHAPMAN–ENSKOGSchen Stoßklammern der Theorie der einatomigen Gase invariant gegen Vertauschung der beiden Funktionen Ψ, Φ . Der zugeordnete Operator K ist dort mit I identisch.

Als Nächstes sei gezeigt, daß die Stoßklammer eines hermiteschen Operators mit sich selbst ($\Phi = \Psi$) positiv-semidefinit ist. Dazu schreibe man diese Stoßklammer explizit auf und forme sie mittels des Schattentheorems (1.5) um. Man erhält sogleich

$$(\Psi, I(\Psi)) = \omega \operatorname{Sp} \int \int [-\Psi a \Psi' a^\dagger + \Psi a a^\dagger \Psi'] d\mathbf{e} d\mathbf{e}'.$$

Dabei sind die Argumente des Streuoperators so wie im ersten Glied rechts in (1.5) zu nehmen und Ψ' steht als Abkürzung für $\Psi(\mathbf{e}', \mathbf{s})$. Durch Umbenennung von \mathbf{e}, \mathbf{e}' in \mathbf{e}', \mathbf{e} erkennt man, daß man dafür schreiben kann

$$(\Psi, I(\Psi)) = \frac{1}{2} \omega \int \int \operatorname{Sp} [A(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{s}) A^\dagger(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s})] d\mathbf{e} d\mathbf{e}',$$

Als Stoßklammer bezeichnen wir die bilineare aus irgendwelchen Operatoren Ψ, Φ hergeleitete gewöhnliche Zeit – Ortsfunktion

$$(\Psi, I(\Phi)) = \operatorname{Sp} \int \Psi I(\Phi) d\mathbf{e}. \quad (2.2)$$

Für das konjugiert Komplexe hat man, weil allgemein $(\Psi, \Phi)^* = (\Psi^\dagger, \Phi^\dagger)$ ist, nach (2.1)

$$(\Psi, I(\Phi))^* = (\Psi^\dagger, I(\Phi^\dagger)). \quad (2.3)$$

HERMITESCHE Operatoren Ψ, Φ ergeben also einen reellen Wert für die Stoßklammer.

Um den Einfluß der Vertauschung von Ψ und Φ auf die Stoßklammer zu erkennen, führen wir den I zugeordneten Operator K ein, welcher sich aus ersterem – (1.5) – durch die Vertauschung von a mit a^\dagger und Vorzeichenumkehr bei der imaginären Einheit ergibt:

wobei

$$\begin{aligned} A(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{s}) &= \Psi(\mathbf{e}, \mathbf{s}) a(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{s}) - a(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{s}) \Psi(\mathbf{e}', \mathbf{s}), \\ A^\dagger(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s}) &= a^\dagger(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s}) \Psi(\mathbf{e}, \mathbf{s}) - \Psi(\mathbf{e}', \mathbf{s}) a^\dagger(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s}). \end{aligned}$$

Der Integrand $\operatorname{Sp}[A A^\dagger]$ ist stets positiv außer für $A=0$, und letzteres ist nur der Fall für $\Psi \propto 1$. Also gilt stets

$$(\Psi, I(\Psi)) \geq 0, \quad (2.6)$$

wobei das Gleichheitszeichen nur angenommen wird, wenn Ψ weder von der Geschwindigkeitsrichtung noch vom Spin abhängt. Diese Defintheit der Stoßklammern sorgt für die Gültigkeit des H-Theorems, s. a. § 5.

Nun zu den Symmetrien der Stoßklammern. Solche ergeben sich, wenn man spezielle Invarianzeigenschaften des Streuoperators voraussetzt.

Es sei zunächst die Spiegelungsinvarianz angenommen:

$$a(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{s}) = a(-\mathbf{e}, -\mathbf{e}', \mathbf{s}). \quad (2.7)$$

¹⁰ vgl. L. WALDMANN, Transporterscheinungen in Gasen von mittlerem Druck, FLÜGGES Handbuch der Physik **12**, 1958 (Ziff. 93).

Wir definieren einen Ψ durch Spiegelung zugeordneten Operator Ψ_P gemäß

$$\Psi_P(\mathbf{e}, \mathbf{s}) = \Psi(-\mathbf{e}, \mathbf{s}). \quad (2.8)$$

Dann gilt, wie man leicht durch explizites Anschreiben der Stoßklammer, Umbenennung von \mathbf{e}, \mathbf{e}' in $-\mathbf{e}, -\mathbf{e}'$ und Benutzung der Spiegelungsinvarianz von a erkennt, die Invarianz

$$(\Psi, I(\Phi)) = (\Psi_P, I(\Phi_P)). \quad (2.9)$$

Aus ihr folgt insbesondere das Verschwinden der Stoßklammer für zwei Operatoren verschiedener Parität, wenn also $\Psi_P = \Psi$, $\Phi_P = -\Phi$ ist oder umgekehrt. Beispiele finden sich in § 5.

Ferner sei die Auswirkung der Zeitumkehrinvarianz des Streuoperators untersucht. Diese Invarianz besagt, daß

$$a(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \vec{s}) = a(-\mathbf{e}', -\mathbf{e}, -\vec{s}), \quad (2.10)$$

wegen einer Erläuterung s. Anhang A. Wir definieren einen Operator Ψ_T , welcher $\Psi(\mathbf{e}, \vec{s})$ durch Zeitumkehr zugeordnet ist, durch

$$\begin{aligned} (\Psi, I(\Phi)) = \omega \operatorname{Sp} \int & \left[- \int a^\dagger(\mathbf{e}', \mathbf{e}, -\vec{s}) \Phi(\mathbf{e}', -\vec{s}) a(\mathbf{e}, \mathbf{e}', -\vec{s}) \Psi(\mathbf{e}, -\vec{s}) d\mathbf{e}' \right. \\ & \left. + \frac{2\pi}{i} (\Phi(\mathbf{e}, -\vec{s}) a(\mathbf{e}, \mathbf{e}, -\vec{s}) \Psi(\mathbf{e}, -\vec{s}) - a^\dagger(\mathbf{e}, \mathbf{e}, -\vec{s}) \Phi(\mathbf{e}, -\vec{s}) \Psi(\mathbf{e}, -\vec{s})) \right] d\mathbf{e}. \end{aligned}$$

Durch die Umbenennung von \mathbf{e}, \mathbf{e}' in $-\mathbf{e}', -\mathbf{e}$ und Benutzung der Zeitumkehrinvarianz (2.10) des Streuoperators entsteht dann sogleich die folgende Invarianz der Stoßklammer:

$$(\Psi, I(\Phi)) = (\Phi_T, I(\Psi_T)). \quad (2.14)$$

Diese Beziehung ist spezieller als die Relation (2.5), da zu ihrer Herleitung eine Annahme über den Streuoperator gemacht wurde. Sie wird in § 5 die ONSAGER-CASIMIRSchen Symmetrierelationen der phänomenologischen Koeffizienten liefern.

Die Drehinvarianz des Streuoperators a schließlich hat zur Folge, daß der Stoßoperator I , angewandt auf einen irreduziblen Tensor l -ter Stufe, wieder einen solchen herstellt. Davon wird im nächsten Abschnitt Gebrauch gemacht.

II. Die Diffusionsnäherung für Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen

§ 3. Irreduzible Tensoren

Im thermischen Gleichgewicht hängt der Verteilungsoperator nicht von der Geschwindigkeitsrichtung und dem Spinvektor ab, sondern ist einfach

$$\Psi_T(\mathbf{e}, \vec{s}) = \Psi(-\mathbf{e}, -\vec{s}). \quad (2.11)$$

Der Spinvektor-Operator wurde hier beidemale durch einen Pfeil bezeichnet, und zwar bedeutet der nach links gerichtete Pfeil, daß man in allen Produkten von nichtkommutativen Größen (Spinkomponenten) die Faktoren in der umgekehrten Reihenfolge nehmen soll wie in der ursprünglichen Funktion (Polynom) $a(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \vec{s})$ bzw. $\Psi(\mathbf{e}, \vec{s})$. Für die Operation der Zeitumkehr gilt also

$$(\Psi \Phi)_T = \Phi_T \Psi_T. \quad (2.12)$$

Ferner notieren wir die Identität

$$\operatorname{Sp} F(\vec{s}) = \operatorname{Sp} F(-\vec{s}). \quad (2.13)$$

Diese ergibt sich sofort aus der Bemerkung, daß die Beziehungen (1.1) richtig bleiben, wenn man \mathbf{s} durch $-\mathbf{s}$ ersetzt und Produkte von hinten herein liest. Da letzten Endes alle Spuren auf Grund von (1.1) berechnet werden, ist damit (2.13) klar. Unter Benutzung von (2.13) schreiben wir nun die Stoßklammer explizit an

eine Konstante. Dem Gleichgewicht benachbarte Zustände, die uns hier interessieren, wird man also durch eine Entwicklung nach \mathbf{e} und \mathbf{s} approximieren. Wir wählen als Basis hierfür die irreduziblen Tensoren, die man aus \mathbf{e} und \mathbf{s} aufbauen kann. Dabei spezialisieren wir auf den Spin $\frac{1}{2}$, so daß nur lineare Ausdrücke in \mathbf{s} vorkommen. Wir bedienen uns der cartesischen Schreibweise; μ, ν oder $\lambda = 1, 2, 3$ bezeichnen die drei Raumrichtungen, über doppelte Indizes ist zu summieren. Die cartesischen Koordinaten haben gegenüber Polarkoordinaten den Vorteil, keine Raumrichtung auszuzeichnen. Die höheren cartesianischen Tensoren sind allerdings schwerfällig. Da wir jedoch bereits bei den Vektoren (Tensoren 1. Stufe) abbrechen, entfällt dieser Nachteil.

Offenbar gibt es die beiden Skalare

$$\Psi^{(1)} = 1; \quad \Psi^{(3)} = 2 e_\mu s_\mu, \quad (3.1)$$

die vier Vektoren¹¹

¹¹ Man hat zunächst \mathbf{e}, \mathbf{s} und $\mathbf{e} \times \mathbf{s}$ als drei linear unabhängige Vektoren. Durch Multiplikation mit $\Psi^{(3)}$ entstehen daraus drei weitere Vektoren, von denen aber nur einer, $\bar{\Psi}^{(3)}$, neu ist, weil bei Spin $\frac{1}{2}$ in \mathbf{s} quadratische Ausdrücke sich auf lineare reduzieren.

$$\begin{aligned}\Psi_\mu^{(1)} &= e_\mu, \quad \Psi_\mu^{(2)} = \sqrt{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} e_\nu s_\lambda; \\ \Psi_\mu^{(3)} &= 2 e_\mu e_\lambda s_\lambda, \quad \Psi_\mu^{(4)} = \sqrt{2} (s_\mu - e_\mu e_\lambda s_\lambda)\end{aligned}\quad (3.2)$$

und allgemein auch vier irreduzible Tensoren l -ter Stufe für $l \geq 2$, auf deren Angabe wir verzichten. $\varepsilon_{\mu\nu\lambda}$ bezeichnet den vollständig antisymmetrischen Tensor 3. Stufe:

$$\varepsilon_{\mu\nu\lambda} = \begin{cases} \pm 1 & \text{für } \mu, \nu, \lambda = 1, 2, 3 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad \text{zyklisch.} \quad (3.3)$$

Es ist also auch

$$\vec{\Psi}^{(2)} = \sqrt{2} \mathbf{e} \times \mathbf{s}. \quad (3.2a)$$

Wie man leicht beweist (s. Anhang B), gilt die Orthonormierung

$$\begin{aligned}(\Psi^{(i)}, \Psi^{(k)}) &= 8\pi \delta^{(ik)}, \\ (\Psi^{(i)}, \Psi_\mu^{(k)}) &= (\Psi_\mu^{(k)}, \Psi^{(i)}) = 0, \\ (\Psi_\mu^{(i)}, \Psi_\mu^{(k)}) &= \frac{8\pi}{3} \delta_{\mu\mu'} \delta^{(ik)}.\end{aligned}\quad (3.4)$$

Darin bedeutet δ das KRONECKERSche Symbol.

Der Transformationscharakter von (3.1) und (3.2) bei Drehung ist direkt ersichtlich. Durch Benutzung von Polarkoordinaten für \mathbf{e} , \mathbf{s} und Zusammensetzung der entsprechenden irreduziblen Tensoren mittels CLEBSCH-GORDAN-Koeffizienten erhält man dasselbe bis auf $\Psi_\mu^{(3)}$, $\Psi_\mu^{(4)}$, die in anderer Linearkombination erscheinen. Diese würden auch andere Diffusionsgleichungen liefern. Wir gehen darauf nicht weiter ein.

§ 4. Entwicklung nach irreduziblen Tensoren. Diffusions-Relaxationsgleichungen für Spinteilchen

Der Verteilungsoperator werde nun durch die in (3.1) und (3.2) aufgeführten irreduziblen Größen approximiert:

$$f \approx \frac{1}{8\pi} \left(\Psi^{(1)} n^{(1)} + \Psi^{(3)} n^{(3)} + \frac{3}{v} \sum_1^4 \vec{\Psi}^{(i)} \mathbf{j}^{(i)} \right). \quad (4.1)$$

Die Entwicklungskoeffizienten n , \mathbf{j} sind gewöhnliche Funktionen der Zeit und des Ortes. Ihre physikalische Bedeutung ergibt sich aus der Mittelwertformel (1.3) unter Benutzung der Orthonormierung (3.4). Danach ist

$$n^{(i)} = (\Psi^{(i)}, f), \quad \mathbf{j}^{(i)} = v (\vec{\Psi}^{(i)}, f)$$

oder ausführlich

¹² bis auf konstanten Faktor.

$$\begin{aligned}n^{(1)} &= (1, f) \text{ Teilchendichte,} \\ n^{(3)} &= 2(\mathbf{e} \mathbf{s}, f) \text{ Helizitätsdichte,} \\ \mathbf{j}^{(1)} &= (\mathbf{v}, f) \text{ Teilchenstrom,} \\ \mathbf{j}^{(2)} &= \sqrt{2}(\mathbf{v} \times \mathbf{s}, f) \mathbf{v} \times \mathbf{s} \text{-Dichte}^{12}, \\ \mathbf{j}^{(3)} &= 2(\mathbf{v}(\mathbf{e} \mathbf{s}), f) \text{ Helizitätsstrom,} \\ \mathbf{j}^{(4)} &= \sqrt{2} v (\mathbf{s} - \mathbf{e}(\mathbf{e} \mathbf{s}), f) \text{ Transversalspindichte}^{12}.\end{aligned}\quad (4.2)$$

Die Spindichte selbst beträgt demnach

$$n^{(1)} \bar{\mathbf{s}} = \frac{1}{v} \left(\frac{1}{2} \mathbf{j}^{(3)} + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{j}^{(4)} \right). \quad (4.2a)$$

Die Bezeichnung Helizität ist als Abkürzung für „doppelte Longitudinalkomponente des Spins“ gebraucht. Wie die zugeordneten Ψ , sind $n^{(3)}$, $\mathbf{j}^{(3)}$ und $\mathbf{j}^{(4)}$ pseudoskalar bzw. Axialvektoren. Der Sinn des polaren Vektors $\mathbf{j}^{(2)}$ wird später erläutert. Er beschreibt den MORRISCHEN Polarisierungseffekt, s. § 9.

Das Ziel ist, die BOLTZMANN-Gleichung für den Verteilungsoperator f näherungsweise zu ersetzen durch partielle Differentialgleichungen für die Entwicklungskoeffizienten n , \mathbf{j} . Dazu hat man (4.1) in (1.4) einzutragen, nach Skalaren $\Psi^{(i)}$, Vektoren $\vec{\Psi}^{(i)}$ zu ordnen und schließlich deren Koeffizienten auf beiden Seiten von (1.4) gleichzusetzen.

Dabei werde nun Kugelsymmetrie der Streuzentren vorausgesetzt, so daß der Stoßoperator I rechts in (1.4) die irreduziblen Tensoren gleicher Stufe in sich transformiert. Wir können somit allgemein schreiben

$$\begin{aligned}I(\Psi^{(1)}) &= 0, \quad I(\Psi^{(3)}) = \Psi^{(3)} \omega_0, \\ I(\Psi_\mu^{(k)}) &= \sum_i \Psi_\mu^{(i)} \omega_1^{(ik)}.\end{aligned}\quad (4.3)$$

Nach (3.4) gilt dann auch

$$\begin{aligned}(\Psi^{(3)}, I(\Psi^{(3)})) &= 8\pi \omega_0, \\ (\Psi_\mu^{(i)}, I(\Psi_\mu^{(k)})) &= 8\pi \omega_1^{(ik)}.\end{aligned}\quad (4.4)$$

Die Konstanten $\omega_{0,1}$ – reziproke Zeiten – sind durch den Stoßoperator bestimmt. Sie werden später noch genauer untersucht. Im Augenblick bedarf nur die zweite Gl. (4.3) einer Erläuterung. Man würde zunächst

$$I(\Psi^{(3)}) = \Psi^{(1)} \omega_0^{(13)} + \Psi^{(3)} \omega_0^{(33)}$$

erwarten. Es ist aber, s. (2.5),

$$\omega_0^{(13)} \propto (\Psi^{(1)}, I(\Psi^{(3)})) = (\Psi^{(3)}, K(\Psi^{(1)})) = 0,$$

weil $K(\Psi^{(1)}) = 0$ nach (2.4) und (1.6). Für $\omega_0^{(33)}$ wurde kurz ω_0 geschrieben.

Auf der linken Seite von (1.4) hat das zweite Glied Produktform und ist für den beabsichtigten Koeffizientenvergleich in ein Linearaggregat von irreduziblen Tensoren umzuschreiben. Dazu notieren wir zunächst die Zerlegung eines beliebigen cartesianischen Tensors 2. Stufe $a_r b_\nu$ in seine irreduziblen Bestandteile. Sie lautet

$$a_r b_\nu = \frac{1}{3} \mathbf{a} \mathbf{b} \delta_{r\nu} + \frac{1}{2} \varepsilon_{r\nu\sigma} (\mathbf{a} \times \mathbf{b})_\sigma + \overline{a_r b_\nu}.$$

Darin bedeutet der letzte Term rechts

$$\overline{a_r b_\nu} = \frac{1}{2} (a_r b_\nu + a_\nu b_r) - \frac{1}{3} a_\sigma b_\sigma \delta_{r\nu}$$

den irreduziblen Tensor 2. Stufe; der mittlere Term rechts kann auch so geschrieben werden

$$\frac{1}{2} \varepsilon_{r\nu\sigma} (\mathbf{a} \times \mathbf{b})_\sigma = \frac{1}{2} (a_r b_\nu - a_\nu b_r),$$

womit die Zerlegung evident ist. Aus ihr entnimmt man nun sogleich die Beziehungen

$$\left. \begin{aligned} e_\mu \Psi^{(i)} &= \Psi_\mu^{(i)}, \\ e_r \Psi_\nu^{(i)} &= \Psi_\nu^{(i)} \cdot \frac{1}{3} \delta_{r\nu} + \dots, \\ e_r \Psi_\nu^{(2)} &= \Psi_\nu^{(4)} \cdot \left(-\frac{1}{2} \varepsilon_{\mu r \nu}\right) + \dots, \\ e_r \Psi_\nu^{(4)} &= \Psi_\nu^{(4)} \cdot \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu r \nu} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (4.5)$$

Durch die Punkte sind irreduzible Tensoren 2. Stufe in \mathbf{e} , \mathbf{s} angedeutet.

Durch Koeffizientenvergleich erhält man schließlich aus der BOLTZMANN-Gleichung unter Benutzung von (4.3) und (4.5) das folgende System:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial n^{(1)}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}^{(1)} &= 0, \\ \frac{\partial n^{(3)}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}^{(3)} &= -\omega_0 n^{(3)}, \\ \frac{\partial \mathbf{j}^{(i)}}{\partial t} + \frac{1}{3} v^2 \operatorname{grad} n^{(i)} &= -\mathbf{g}^{(i)}, \quad i=1, 3, \\ \frac{\partial \mathbf{j}^{(2)}}{\partial t} + \frac{1}{2} v \operatorname{rot} \mathbf{j}^{(4)} &= -\mathbf{g}^{(2)}, \\ \frac{\partial \mathbf{j}^{(4)}}{\partial t} - \frac{1}{2} v \operatorname{rot} \mathbf{j}^{(2)} &= -\mathbf{g}^{(4)}. \end{aligned} \right\} \quad (4.6)$$

Dabei ist abgekürzt:

$$\mathbf{g}^{(i)} = \sum_{k=1}^4 \omega_1^{(ik)} \mathbf{j}^{(k)}. \quad (4.7)$$

Dies sind die gewünschten Diffusions-Relaxationsgleichungen für Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen.

§ 5. Diskussion der Diffusions-Relaxationsgleichungen. Entropie. Onsager-Casimir-Relationen

Für einen räumlich homogenen Zustand besagt (4.6) mit (4.7), daß

$$\begin{aligned} \frac{\partial n^{(1)}}{\partial t} &= 0, \quad \frac{\partial n^{(3)}}{\partial t} = -\omega_0 n^{(3)}, \\ \frac{\partial \mathbf{j}^{(i)}}{\partial t} &= -\sum_k \omega_1^{(ik)} \mathbf{j}^{(k)}. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Außer $n^{(1)}$ klingen demnach alle Dichten und Ströme auf Null ab, denn ω_0 ist positiv und die Matrix $\omega_1^{(ik)}$ positiv-definit. Für ω_0 ist die Behauptung nach (4.4) und (2.6) klar; für $\omega_1^{(ik)}$ folgt sie, indem man gemäß (4.4) für eine beliebige Linearkombination $\Psi_\mu = \sum_i \Psi_\mu^{(i)} \alpha^{(i)}$ die Stoßklammer umformt

$$(\Psi_\mu, I(\Psi_\mu)) = 8\pi \sum_{i,k} \alpha^{(i)} \omega_1^{(ik)} \alpha^{(k)}$$

und wieder (2.6) beachtet.

Es ist nützlich an dieser Stelle nach der Entropie zu fragen. Man erhält aus der allgemeinen Definition der Entropiedichte¹⁰

$$S = -k \operatorname{Sp} \int f \log f \, d\mathbf{e}$$

durch Einsetzen der Diffusionsnäherung (4.1) für f und der konsequenten Entwicklung

$$\log f \approx \log \frac{n^{(1)}}{8\pi} + \varepsilon - \frac{1}{2} \varepsilon^2,$$

$$\text{wo} \quad \varepsilon = \frac{1}{n^{(1)}} \left(\Psi^{(3)} n^{(3)} + \frac{3}{v} \sum_i \tilde{\Psi}^{(i)} \mathbf{j}^{(i)} \right),$$

mittels der Orthonormierung (3.4) sofort

$$S \approx -k \left[n^{(1)} \log \frac{n^{(1)}}{8\pi} + \frac{1}{2 n^{(1)}} \left(n^{(3)2} + \frac{3}{v^2} \sum_i \mathbf{j}^{(i)2} \right) \right]. \quad (5.2)$$

Für die Änderung der Entropiedichte eines räumlich homogenen Systems ergibt sich daraus nach (5.1)

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{k}{n^{(1)}} \left(\omega_0 n^{(3)2} + \frac{3}{v^2} \sum_{i,k} \mathbf{j}^{(i)} \omega_1^{(ik)} \mathbf{j}^{(k)} \right). \quad (5.3)$$

Nach dem über die Definitheit der $\omega_{0,1}$ Gesagten ist diese Änderung stets positiv (Entropieerzeugung; 2. Hauptsatz). Außerdem zeigt (5.3), daß die in (4.7) eingeführten Vektoren $\mathbf{g}^{(i)}$ als die den Strömen $\mathbf{j}^{(i)}$ zugeordneten Kräfte bezeichnet werden können, ähnlich wie in der Thermodynamik irreversibler Prozesse. Der Entropieausdruck (5.2) geht aber über den Rahmen der thermodynamischen Behandlung hinaus.

Als Nächstes sei die Auswirkung der Spiegelungs- sowie der Zeitumkehrinvarianz des Streuoperators auf die ω_1 untersucht. Aus der Form (3.2) der $\tilde{\Psi}^{(i)}$ und den Definitionen (2.8) und (2.11) der zugeord-

neten Operatoren entnimmt man

$$\begin{aligned}\vec{\Psi}_P^{(i)} &= \mp \vec{\Psi}^{(i)} & \text{für } i = \begin{cases} 1, 2 \\ 3, 4 \end{cases} \\ \vec{\Psi}_T^{(i)} &= \mp \vec{\Psi}^{(i)} & \text{für } i = \begin{cases} 1, 3, 4 \\ 2. \end{cases}\end{aligned}$$

Somit gilt bei Bestehen von Spiegelungsinvarianz nach (2.9) und (4.4)

$$\omega_1^{(ik)} = 0 \text{ für } i = 1, 2; \quad k = 3, 4 \text{ und umgekehrt,} \quad (5.4)$$

und bei Bestehen von Zeitumkehrinvarianz nach (2.14) und (4.4)

$$\omega_1^{(12)} = -\omega_1^{(21)}, \quad \omega_1^{(34)} = \omega_1^{(43)}. \quad (5.5)$$

Letzteres sind ONSAGER-CASIMIRSche Relationen¹³ für die Relaxationskoeffizienten bei Spin-Teilchen. Wir haben sie aus der Mikro-Reversibilität entnommen. Trotzdem ist die Zeitumkehrinvarianz der Wechselwirkung für die Gültigkeit von (5.5) entbehrlich. In unserem Fall, Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen und kugelsymmetrische Streuer, folgt nämlich die Eigenschaft (2.10) des Streuoperators bereits von selbst aus der Dreh- und Spiegelungsinvarianz, wie man an der expliziten Form (6.1) sieht¹⁴.

Schließlich betrachten wir den quasi-stationären Fall der Spindiffusion. Wir setzen alle Zeitableitungen bis auf die von $n^{(1)}$ gleich Null und entnehmen zunächst aus (4.6)

$$\left. \begin{aligned} \text{rot } \mathbf{g}^{(i)} &= 0 \text{ für } i = 1, 3, \\ \text{div } \mathbf{g}^{(i)} &= 0 \text{ für } i = 2, 4. \end{aligned} \right\} \quad (5.6)$$

Als Umkehrung von (4.7) notieren wir unter Einführung der Weglängen-Matrix $l_1^{(ik)}$, welche bis auf einen Faktor v die Reziproke zu $\omega_1^{(ik)}$ ist,

$$\mathbf{j}^{(i)} = \frac{1}{v} \sum_{k=1}^4 l_1^{(ik)} \mathbf{g}^{(k)}. \quad (5.7)$$

Ferner benutzen wir später statt ω_0 auch die Weglänge

$$l_0 = v/\omega_0. \quad (5.7a)$$

Jetzt setzen wir (5.4) und (5.5) voraus, was analoge Beziehungen für die l_1 zur Folge hat, und erhalten unter Benutzung von (5.6) aus (4.6) die Gleichungen

chungen

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\partial n^{(1)}}{\partial t} + \frac{1}{3} v l_1^{(11)} \Delta n^{(1)} &= 0 \\ \frac{1}{3} v l_1^{(33)} \Delta n^{(3)} &= \omega_0 n^{(3)} \\ -\frac{1}{2} l_1^{(44)} \text{rot } \mathbf{g}^{(4)} &= \mathbf{g}^{(2)} \\ \frac{1}{2} l_1^{(22)} \text{rot } \mathbf{g}^{(2)} &= \mathbf{g}^{(4)}. \end{aligned} \right\} \quad (5.8)$$

Um das System komplett zu machen, hat man noch

$$\mathbf{g}^{(i)} = -\frac{1}{3} v^2 \text{grad } n^{(i)}, \quad i = 1, 3, \quad (5.9)$$

zu notieren.

Die Diagonalglieder der l_1 -Matrix sind wie diejenigen der ω_1 -Matrix positiv. Daraus folgt unmittelbar, daß im stationären Fall alle Größen außer $n^{(1)}$ von der Oberfläche eines Körpers nach dem Inneren hin abnehmen.

§ 6. Zusammenhang der Relaxationskoeffizienten mit dem Streuoperator

Der Streuoperator für Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen hat bei kugelsymmetrischen Streuzentren und einer spiegelungsinvarianten Wechselwirkung bekanntlich die Form¹⁵

$$\begin{aligned} a(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{s}) &= a_0(\chi) + 2i a_1(\chi) \mathbf{n} \mathbf{s}, \\ a^\dagger(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s}) &= a_0^*(\chi) - 2i a_1^*(\chi) \mathbf{n} \mathbf{s}. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Hierin bedeutet $\chi = \angle(\mathbf{e}, \mathbf{e}')$ den Streuwinkel und $\mathbf{n} = \mathbf{e} \times \mathbf{e}' / \sin \chi$ einen zur Streuebene senkrechten Einheitsvektor. Die Invarianz (2.10) ist durch (6.1) erfüllt, gleichgültig ob die Wechselwirkung reversibel ist oder nicht.

Zur Vorbereitung notieren wir uns einige Spurformeln, zu deren Ableitung auf Anhang C verwiesen sei:

$$\left. \begin{aligned} \text{Sp}(a a^\dagger) &= 2J, \\ \text{Sp}(s_\mu a a^\dagger) &= \text{Sp}(a s_\mu a^\dagger) = -D n_\mu, \\ \text{Sp}(s_\mu a s_\nu a^\dagger) &= \frac{1}{2} [(J - G) \delta_{\mu\nu} + F \varepsilon_{\mu\nu\varrho} n_\varrho \\ &\quad + G n_\mu n_\nu]. \end{aligned} \right\} \quad (6.2)$$

Die Argumente der a, a^\dagger sind wie in (6.1) zu nehmen

¹³ L. ONSAGER, Phys. Rev. **37**, 405 [1931]; **38**, 2265 [1931]. — H. B. G. CASIMIR, Rev. Mod. Phys. **17**, 343 [1945].

¹⁴ Solche Beispiele gibt es mehr. Der Zusammenhang von Thermodiffusion und Diffusionsthermik bei einatomigen Gasgemischen, eine ONSAGER-Relation, folgt gaskinetisch

aus der Existenz nur vom Ablenkungswinkel abhängiger differentieller Streuquerschnitte für die verschiedenen Partner. Die Wechselwirkung braucht dazu nur drehinvariant, aber nicht unbedingt zeitumkehr-invariant zu sein.

¹⁵ vgl. H. A. TOLHOEK, Rev. Mod. Phys. **28**, 277 [1956].

men. Dabei bedeuten

$$\begin{aligned} J &= |a_0|^2 + |a_1|^2, & D &= i(a_0 a_1^* - a_0^* a_1), \\ F &= a_0 a_1^* + a_0^* a_1, & G &= 2 |a_1|^2. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Streu winkelfunktionen, welche mit den gleichbenannten Größen bei TOLHOEK¹⁵ identisch sind, wenn man letztere mit k^2 (Wellenzahl) multipliziert¹⁶. Ferner notieren wir, unter Benutzung von $a_1(0) = 0$ sowie von (1.5) und (1.6), die explizite Gestalt der Stoßklammer (2.2)

$$\begin{aligned} (\Psi, I(\Phi)) &= \omega \iint [-\text{Sp}(\Psi a \Phi' a^\dagger) \\ &\quad + \text{Sp}(\Psi \Phi) \cdot J] d\mathbf{e} d\mathbf{e}'. \end{aligned}$$

Statt dessen kann man auch schreiben

$$\begin{aligned} (\Psi, I(\Phi)) &= \omega \cdot 8 \pi^2 \int_0^\pi [-\text{Sp}(\Psi a \Phi' a^\dagger) \\ &\quad + \text{Sp}(\Psi \Phi) \cdot J] \sin \chi d\chi. \end{aligned} \quad (6.4)$$

falls, wie bei den folgenden Anwendungen, der Integrand nur vom Streuwinkel abhängt.

Nun kann man ω_0 und die $\omega_1^{(ik)}$ gemäß (4.4) ohne Schwierigkeit berechnen. Als Beispiel sei ω_0 betrachtet. Nach (3.1), (6.2) und (6.3) ist

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\Psi^{(3)} a \Psi^{(3)'} a^\dagger) &= 4 e_\mu e_\nu' \text{Sp}(s_\mu a s_\nu a^\dagger) \\ &= 2[(J - G) \cos \chi + F \sin \chi]. \end{aligned}$$

Dabei wurde $e_\mu e_\nu' \varepsilon_{\mu\nu\sigma} = \sin \chi n_\sigma$ benutzt. Zugleich entnimmt man daraus, indem man $a = 1$, $\chi = 0$ wählt,

$$\text{Sp}(\Psi^{(3)} \Psi^{(3)}) = 2$$

und hat nun den Integranden von (6.4). Eine kurze Umformung und Rückgängigmachen der Abkürzungen (6.3) liefert sodann gemäß (4.4) den in (6.5) angegebenen Ausdruck für ω_0 . Ähnlich geht die Rechnung in den anderen Fällen mit dem Ergebnis:

$$\left. \begin{aligned} \omega_0 &= \omega \cdot 4 \pi \int_0^\pi \left| a_0 \sin \frac{\chi}{2} - a_1 \cos \frac{\chi}{2} \right|^2 \sin \chi d\chi, \\ \omega_1^{(11)} &= \omega \cdot 4 \pi \int_0^\pi (|a_0|^2 + |a_1|^2) \sin^2 \frac{\chi}{2} \sin \chi d\chi, \\ \omega_1^{(22)} &= \frac{1}{2}(\omega_0 + \omega_1^{(11)}), \\ \omega_1^{(33)} &= \omega \cdot 2 \pi \int_0^\pi (|a_1|^2 + |a_0 \sin \chi - a_1 \cos \chi|^2) \sin \chi d\chi, \\ \omega_1^{(44)} &= \frac{1}{2} \omega_1^{(33)}, \\ \omega_1^{(12)} &= \omega \cdot \sqrt{2} \pi \int_0^\pi i(a_0 a_1^* - a_0^* a_1) \sin^2 \chi d\chi, \\ \omega_1^{(34)} &= \omega \cdot \sqrt{2} \pi \int_0^\pi (|a_1|^2 - |a_0 \sin \chi - a_1 \cos \chi|^2) \sin \chi d\chi. \end{aligned} \right\} \quad (6.5)$$

Die nicht aufgeführten Koeffizienten sind mittels (5.4) und (5.5) zu entnehmen. Damit ist der gesuchte Zusammenhang der Relaxationskoeffizienten mit dem Streuoperator hergestellt.

III. Die Randbedingungen der Diffusionsnäherung

§ 7. Aufstellung von Randbedingungen

Die exakte Randbedingung im stationären Fall besteht in der Kenntnis des Verteilungsoperators in jedem Punkt der Oberfläche eines ans Vakuum grenzenden Körpers für die dort einfallenden Teilchen. Sei \mathbf{u} der ins Vakuum weisende Einheitsvektor, normal zur Oberfläche in einem beliebigen Oberflächenpunkt, so ist also

$$f_{\mathbf{u} \cdot \mathbf{e} < 0, \text{ Oberfläche}} = F \quad (7.1)$$

exakt gegeben. In der Diffusionsnäherung rechnet man mit dem verkürzten Verteilungsoperator (4.1). Um Randbedingungen zu gewinnen, sehen wir zu, welche Werte sich aus (4.1) für $n^{(i)}$, $\mathbf{j}^{(i)}$ ergeben, d. s. die Dichten und Ströme aus (4.2), jedoch genommen nur für die einfallenden Teilchen $\mathbf{u} \cdot \mathbf{e} < 0$, und setzen dann diese, soweit es möglich ist, den Größen $N^{(i)}$, $\mathbf{J}^{(i)}$ gleich, welche man für die einfallenden Partikel aus deren exakter Verteilung F berechnet.

Wir benötigen also zunächst Ausdrücke für

$$n_\pm^{(i)} = (\Psi^{(i)}, f)_\pm, \quad \mathbf{j}_\pm^{(i)} = v(\vec{\Psi}^{(i)}, f)_\pm, \quad (7.2)$$

wo der Index \pm bedeutet, daß die Integration in (1.2) jetzt nur über $\mathbf{u} \cdot \mathbf{e} \geq 0$ geht. Die n_+ , \mathbf{j}_+ werden benötigt, wenn man nach den Dichten und Strö-

¹⁶ Weil der Streuoperator in der vorliegenden Arbeit dimensionslos gewählt ist, s. § 1.

men der austretenden Partikel fragt. Setzen wir in (7.2) f gemäß (4.1) ein, so treten die halbseitigen inneren Produkte

$$(\Psi^{(i)}, \Psi^{(k)})_{\pm}, \quad (\Psi^{(i)}, \Psi_{\mu}^{(k)})_{\pm}, \quad (\Psi_{\mu}^{(i)}, \Psi_{\nu}^{(k)})_{\pm}$$

auf. Diese sind symmetrisch, es ist z. B.

$$(\Psi_{\mu}^{(i)}, \Psi_{\nu}^{(k)})_{\pm} = (\Psi_{\nu}^{(k)}, \Psi_{\mu}^{(i)})_{\pm},$$

und können, falls beide Operatoren gerade oder beide ungerade in \mathbf{e} sind, sofort mittels der Orthornormierung (3.4) angegeben werden, z. B.

$$\left. \begin{aligned} (\Psi^{(i)}, \Psi^{(i)})_{\pm} &= \frac{1}{2} (\Psi^{(i)}, \Psi^{(i)}) = 4\pi, \\ (\Psi_{\mu}^{(i)}, \Psi_{\nu}^{(i)})_{\pm} &= \frac{1}{2} (\Psi_{\mu}^{(i)}, \Psi_{\nu}^{(i)}) = \frac{4\pi}{3} \delta_{\mu\nu}. \end{aligned} \right\} \quad (7.3)$$

Im übrigen benötigt man nur noch die Beziehung

$$\int_{\pm} \mathbf{e}_{\mu} d\mathbf{e} = \pm \pi \mathbf{u}_{\mu}.$$

Damit findet man

$$\left. \begin{aligned} (\Psi^{(i)}, \Psi_{\mu}^{(i)})_{\pm} &= \pm 2\pi \mathbf{u}_{\mu}, \\ (\Psi_{\mu}^{(2)}, \Psi_{\nu}^{(4)})_{\pm} &= \mp \pi \varepsilon_{\mu\nu\rho} \mathbf{u}_{\rho}. \end{aligned} \right\} \quad (7.4)$$

Alle nicht in (7.3) und (7.4) aufgeführten halbseitigen inneren Produkte verschwinden. Durch Anwendung in (7.2) ergibt sich

$$\left. \begin{aligned} n_{\pm}^{(i)} &= \frac{1}{2} n^{(i)} \pm \frac{3}{4v} \mathbf{j}^{(i)} \mathbf{u}, \\ \mathbf{j}_{\pm}^{(i)} &= \frac{1}{2} \mathbf{j}^{(i)} \pm \frac{1}{4} n^{(i)} v \mathbf{u}, \\ \mathbf{j}_{\pm}^{(2)} &= \frac{1}{2} \mathbf{j}^{(2)} \mp \frac{3}{8} \mathbf{j}^{(4)} \times \mathbf{u}, \\ \mathbf{j}_{\pm}^{(4)} &= \frac{1}{2} \mathbf{j}^{(4)} \pm \frac{3}{8} \mathbf{j}^{(2)} \times \mathbf{u} \end{aligned} \right\} \quad i=1, 3 \quad (7.5)$$

für die halbseitigen Dichten und Ströme. Durch Linearkombination der beiden letzten Zeilen entsteht auch

$$(\mathbf{j}_{-}^{(2)} + \mathbf{j}_{-}^{(4)} \times \mathbf{u})_{\text{tang}} = \frac{7}{8} (\mathbf{j}^{(2)} + \mathbf{j}^{(4)} \times \mathbf{u})_{\text{tang}} \quad (7.6)$$

oder damit äquivalent

$$(\mathbf{j}_{-}^{(4)} - \mathbf{j}_{-}^{(2)} \times \mathbf{u})_{\text{tang}} = \frac{7}{8} (\mathbf{j}^{(4)} - \mathbf{j}^{(2)} \times \mathbf{u})_{\text{tang}}. \quad (7.7)$$

Nun kann man den stationären Diffusionsgleichungen keineswegs alle einfallenden Dichten und Ströme als Randbedingung vorschreiben. Es sind vielmehr auf der Oberfläche nur zwei Skalare und die Tangentialkomponenten eines Vektors frei verfügbar (s. § 8). Die Gesamtlösung hängt von der Wahl der

Randbedingungen natürlich ab und man wird diese verschieden vornehmen, je nachdem ob die Lösung die Dichten oder die Ströme möglichst gut wiedergeben soll.

Wir treffen folgende Wahl. Als skalare Randbedingungen schreiben wir die Normalkomponenten der beiden halbseitigen Ströme $\mathbf{j}_{-}^{(1)}, \mathbf{j}_{-}^{(3)}$

$$\frac{1}{2} \mathbf{j}^{(i)} \mathbf{u} - \frac{1}{4} n^{(i)} v = \mathbf{J}^{(i)} \mathbf{u}, \quad i=1, 3 \quad (7.8)$$

vor; für die vektorielle Randbedingung gehen wir, um keinen der Vektoren $\mathbf{j}_{-}^{(2,4)}$ auszuzeichnen, von (7.6) oder – was dasselbe wäre – von (7.7) aus und verlangen

$$\frac{7}{8} (\mathbf{j}^{(2)} + \mathbf{j}^{(4)} \times \mathbf{u})_{\text{tang}} = (\mathbf{J}^{(2)} + \mathbf{J}^{(4)} \times \mathbf{u})_{\text{tang}}. \quad (7.9)$$

Dabei bedeuten, um es zu wiederholen, die $\mathbf{J}^{(i)}$ die Ströme und Vektordichten der einfallenden Partikel, die man aus deren exakter Verteilung F berechnet.

§ 8. Eindeutigkeit der Lösung

Es sei zunächst die stationäre BOLTZMANN-Gleichung selbst und die exakte Randbedingung (7.1) betrachtet. Angenommen, es gäbe zwei Lösungen $f_{\text{I}}, f_{\text{II}}$ mit denselben Randwerten $F_{\text{I}} = F_{\text{II}}$ für die einfallenden Partikel. Für die Differenz $f = f_{\text{I}} - f_{\text{II}}$ ist dann die einfallende Randverteilung $F = 0$. Gezeigt soll werden, daß daraus $f = 0$ folgt. Dies geht wie folgt: Für die Differenz f gilt ebenfalls die BOLTZMANN-Gleichung (1.4), aus der wir entnehmen

$$\text{div} \int \mathbf{v} \text{Sp } f^2 d\mathbf{e} = - (f, I(f)) = -Q \leq 0,$$

letzteres nach (2.6). Durch Integration über das Körperinnere sowie Benutzung des GAUSSschen Satzes und von $F = 0$ folgt daraus

$$\int_{+} [\int \mathbf{u} \mathbf{v} \text{Sp } f^2 d\mathbf{e}]_0 dO = - \int Q dV. \quad (8.1)$$

Hierin bezeichnet dO das Flächenelement, dV das Volumelement des Körpers und der Index 0 weist auf die Oberflächenwerte hin. Die linke Seite von (8.1) ist nicht-negativ, die rechte nicht-positiv. Gleichheit kann nur bestehen, wenn f verschwindet.

Ganz ähnlich geht der Schluß in der stationären Diffusionsnäherung. Wir multiplizieren, unter Weglassen der Zeitableitungen, die Gln. (4.6) bzw. mit

$$\frac{1}{8\pi} n^{(i)}, \quad \frac{3}{8\pi v^2} \mathbf{j}^{(i)}, \quad \text{addieren und erhalten}$$

$$\frac{1}{8\pi} \operatorname{div} \left((\mathbf{j}^{(1)} n^{(1)} + \mathbf{j}^{(3)} n^{(3)}) + \frac{3}{2v} \mathbf{j}^{(4)} \times \mathbf{j}^{(2)} \right) = -\frac{1}{8\pi} \left(\omega_0 n^{(3)2} + \frac{3}{v^2} \sum_{i,k} \mathbf{j}^{(i)} \omega_1^{(ik)} \mathbf{j}^{(k)} \right) = -Q \leq 0,$$

wegen letzterem s. bei (5.3). Durch Integration folgt daraus

$$\frac{1}{8\pi} \int \mathbf{u} \left(\mathbf{j}^{(1)} n^{(1)} + \mathbf{j}^{(3)} n^{(3)} + \frac{3}{2v} \mathbf{j}^{(4)} \times \mathbf{j}^{(2)} \right) dO = - \int Q dV.$$

Die Randbedingungen (7.8) und (7.9) geben mit $\mathbf{J}^{(i)} = 0$ (weil wir wie vorher die Differenz zweier Lösungen zur selben Randbedingung betrachten)

$$\mathbf{u} \mathbf{j}^{(i)} = \frac{v}{2} n^{(i)}, \quad i = 1, 3,$$

$$\mathbf{u} (\mathbf{j}^{(4)} \times \mathbf{j}^{(2)}) = \mathbf{j}_{\text{tang}}^{(2)2},$$

so daß auch

$$\frac{v}{16\pi} \int \left(n^{(1)2} + n^{(3)2} + \frac{3}{v^2} \mathbf{j}_{\text{tang}}^{(2)2} \right) dO = - \int Q dV. \quad (8.2)$$

Daraus schließt man wieder auf das Verschwinden aller Dichten und Ströme, und damit auf die Eindeutigkeit.

IV. Einige Anwendungen

§ 9. Streuung durch eine dicke Folie

Wir betrachten die stationäre Vielfachstreuung eines breiten, senkrecht auf eine dicke Folie fallenden Strahls. Die Begrenzungsflächen der Folie seien bei $x=0$ und $x=d$. Die Primärteilchen sollen in der positiven x -Richtung – Einheitsvektor \mathbf{e}_0 – fliegen. Ihre Teilchenkonzentration sei N , ihr mittlerer Longitudinal- bzw. Transversalspin sei S_x bzw. S_y . Demnach ist der Verteilungsoperator der einfallenden Teilchen

$$j_x^{(1)} = \frac{1}{d^*+1} N v;$$

$$j_x^{(2)} = (l_1^{(21)}/l_1^{(11)}) j_x^{(1)};$$

$$j_x^{(3)} = \frac{4 K_1(x)}{H_1(0) + K_1(0)} \cdot N v S_x;$$

$$j_x^{(4)} = (l_1^{(43)}/l_1^{(33)}) j_x^{(3)};$$

$$F = \frac{1}{2} N \delta(\mathbf{e} - \mathbf{e}_0) (1 + 4 S_x s_x + 4 S_y s_y) \quad \text{für } x=0, \\ F=0 \quad \text{für } x=d.$$

δ bezeichnet die Zackenfunktion; $\int \delta(\mathbf{e}) d\mathbf{e} = 1$. Als Ströme und Vektordichten der einfallenden Teilchen entnimmt man daraus für $x=0$ ($u_x = -1$)

$$J_x^{(1)} = N v; \quad J_z^{(2)} = N v \cdot \sqrt{2} S_y;$$

$$J_x^{(3)} = N v \cdot 2 S_x; \quad J_y^{(4)} = J_z^{(2)}$$

– nichtaufgeführte Komponenten verschwinden – und für $x=d$ ($u_x = 1$)

$$\mathbf{J}^{(i)} = 0, \quad i = 1, \dots, 4.$$

Die Lösung der Diffusionsgleichungen (5.8) mit den Randbedingungen (7.8) und (7.9) ist einfach. Wir geben gleich das Resultat. Für die Skalare gilt:

$$n^{(1)} = \frac{2}{d^*+1} \left[1 + 2 d^* \left(1 - \frac{x}{d} \right) \right] N, \quad (9.1)$$

$$n^{(3)} = \frac{8 H_1(x)}{H_1(0) + K_1(0)} \cdot N S_x \quad (9.2)$$

mit

$$\left. \begin{aligned} d^* &= 3 d/4 l_1^{(11)}, \\ H_1(x) &= \cosh \alpha_1 (d-x) + \alpha_1 \sinh \alpha_1 (d-x), \\ K_1(x) &= \cosh \alpha_1 (d-x) + \frac{1}{\alpha_1} \sinh \alpha_1 (d-x), \\ \alpha_1 &= \sqrt{3/l_0 l_1^{(33)}}, \quad \alpha_1 = \sqrt{3 l_0/4 l_1^{(33)}}. \end{aligned} \right\} \quad (9.3)$$

Für die Vektoren gilt – nichtaufgeführte Komponenten verschwinden –

$$j_z^{(1)} = -\frac{1}{2} l_1^{(12)} \frac{dj_y^{(4)}}{dx}; \quad (9.4)$$

$$j_z^{(2)} = -\frac{1}{2} l_1^{(22)} \frac{dj_y^{(4)}}{dx}; \quad (9.5)$$

$$j_y^{(3)} = (l_1^{(34)}/l_1^{(44)}) j_y^{(4)}; \quad (9.6)$$

$$j_y^{(4)} = \frac{(16 \sqrt{2/7}) K_t(x)}{H_t(0) + K_t(0)} \cdot N v S_y. \quad (9.7)$$

Dabei sind die Funktionen H_t , K_t analog (9.3) zu bilden mit

$$\alpha_t = \sqrt{4/l_1^{(22)} l_1^{(44)}}, \quad \alpha_t = \sqrt{l_1^{(22)}/l_1^{(44)}} \quad (9.8)$$

an Stelle von α_1 , α_1 .

Der lineare Verlauf der Teilchendichte (9.1) mit der Eindringtiefe x und der Wert (9.4) für $j_x^{(1)}$, den durchtretenden Teilchenstrom, sind bekannte Dinge⁶.

Das weitere Augenmerk richten wir zunächst auf

die Komponente $j_x^{(2)}$ der $\mathbf{v} \times \mathbf{s}$ -Dichte. Sie besagt das Auftreten der Mott-Polarisation. Um das zu sehen, setzen wir $S_x = S_y = 0$ und notieren in etwas anderer Form den Verteilungsoperator (4.1)

$$f \approx \frac{1}{8\pi} \left[n^{(1)} + \frac{3}{v} \left(\mathbf{e} \mathbf{j}^{(1)} + \sqrt{2} (\mathbf{j}^{(2)} \times \mathbf{e}) \mathbf{s} \right) \right].$$

Dies bedeutet, daß die in der Richtung \mathbf{e} fliegenden Teilchen partiell transversal polarisiert sind in der Richtung von $\mathbf{j}^{(2)} \times \mathbf{e}$ oder $\mathbf{j}^{(1)} \times \mathbf{e}$, also senkrecht zu Einfall- und Beobachtungsrichtung. $l_1^{(21)}$ ist nach (9.5) der entscheidende Koeffizient. Zugleich zeigen (9.4) und (9.5), daß für $d^* \gg 1$ die Mott-Polarisation im Rückgestreuten relativ schwach, im Durchtretenden relativ stark ist.

Um rasch einen Anhaltspunkt vom Verhalten der Helizitätsdichte beim Durchdringen der Folie zu haben, notieren wir uns für dicke Schichten ($\kappa_1 d \gg 1$)¹⁷

$$H_1(0) \approx \frac{1}{2} (1 + \alpha_1) e^{\kappa_1 d}, \quad K_1(0) \approx \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\alpha_1} \right) e^{\kappa_1 d}.$$

Wegen $H_1(d) = K_1(d) = 1$ ergibt sich somit für dicke Schichten

$$n^{(3)}(d) \approx \frac{16 \alpha_1}{(1 + \alpha_1)^2} e^{-\kappa_1 d} \cdot N S_x;$$

$$j_x^{(3)}(d) = \frac{1}{2} n^{(3)}(d) v.$$

Das bedeutet eine exponentielle Abnahme mit zunehmender Schichtdicke; κ_1 ist die maßgebende Abfallskonstante. Das Auftreten von $j_x^{(4)}$, s. (9.7), besagt, daß bei der Streuung auch eine Transversal-polarisation des Einzelteilchens erscheint, welche im Mittel nach Maßgabe des Koeffizienten $l_1^{(43)}$ eine Komponente in der Strahlrichtung liefert.

Wie die Helizitätsdichte, so nimmt auch die Transversalspindichte exponentiell mit zunehmender Schichtdicke ab. Aus (9.7) folgt nämlich für $\kappa_t d \gg 1$

$$j_y^{(4)}(d) \approx \frac{(32 \sqrt{2}/7) \alpha_t}{(1 + \alpha_t)^2} e^{-\kappa_t d} \cdot N v S_y.$$

In derselben Weise fällt auch $j_y^{(3)}$ ab, s. (9.6), und somit nach (4.2a) auch die y -Komponente der Spindichte selbst; κ_t ist die maßgebende Abfallskonstante. Zu $j_z^{(2)}$ aus (9.5) ist nichts weiter zu bemerken; das Auftreten dieses Vektors im Gefolge einer mittleren Transversal-polarisation ist natürlich. Die Kompo-

nente $j_z^{(1)}$ aus (9.4) schließlich besagt, daß die in der y -Richtung transversal polarisiert einfallenden Teilchen nicht geradeaus weiterlaufen, sondern gewissermaßen seitwärts (in der z -Richtung) abrollen nach Maßgabe des Koeffizienten $l_1^{(12)}$; diese Seitwärtsbewegung klingt exponentiell ab bei dicker Schicht.

V. Anhang

A. Zur Zeitumkehr

Wir erläutern (2.10) an Hand der expliziten Darstellung des Streuoperators¹⁸, die wir durch partielle Integration gleich umformen

$$a(\mathbf{e}, \mathbf{e}', \vec{s}) = -\frac{m k}{2 \pi \hbar^2} \int e^{-i k \mathbf{e} \cdot \mathbf{r}} T^{(+)}(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) e^{i k \mathbf{e}' \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

$$= -\frac{m k}{2 \pi \hbar^2} \int e^{i k \mathbf{e}' \cdot \mathbf{r}} T^{(+)}(\vec{r}, -\vec{p}, \vec{s}) e^{-i k \mathbf{e} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}.$$

Dabei ist

$$T^{(+)} = V + V \frac{1}{E - H_0 - V + i \varepsilon} V, \quad \varepsilon \rightarrow +0,$$

wobei E die Energie, $H_0 = p^2/2m$ den Operator der kinetischen Energie, $V = V(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s})$ den der Wechselwirkung bezeichnet. Nun sei die (Zeitumkehr-)Invarianz angenommen¹⁹

$$V(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) = V(\vec{r}, -\vec{p}, -\vec{s}).$$

Für H_0 gilt das Entsprechende eo ipso und daher ist auch

$$T^{(+)}(\vec{r}, -\vec{p}, \vec{s}) = T^{(+)}(\vec{r}, \vec{p}, -\vec{s}).$$

Dies verwendet man in der obigen Integraldarstellung von a und hat dann sogleich (2.10).

B. Zur Orthonormierung

Zum Beweis von (3.4) sei zunächst bemerkt, daß natürlich Skalare zu Vektoren orthogonal sind und ebenso Größen, die gerade in \mathbf{e} sind, zu solchen, die ungerade. Die noch fehlenden Orthogonalitäten ergeben sich aus

$$\vec{\psi}^{(1)} \vec{\psi}^{(2)} = \vec{\psi}^{(3)} \vec{\psi}^{(4)} = 0,$$

was man sogleich aus (3.2) entnimmt. Für die Normierung sei notiert

$$\mathbf{s}^2 = \frac{3}{4}; \quad (\mathbf{e} \mathbf{s})^2 = \frac{1}{4}.$$

¹⁷ Wenn keine Spinbahn-Kopplung vorhanden ist ($\alpha_1 = 0$), gehen $l_1^{(ik)} \rightarrow \infty$ für $i, k = 3, 4$, wie man aus (6.5) entnimmt. Dann ist hinsichtlich des Spins jede Schicht dünn und die Diffusionsnäherung kann keine guten Resultate geben.

¹⁸ G. F. CHEW u. M. L. GOLDBERGER, Phys. Rev. **87**, 778 [1952].

¹⁹ Daß bei Zeitumkehr die Faktorenreihenfolge in allen Operatorprodukten — Potenzreihe! — umzukehren ist (was bei uns durch die Stellung der Pfeile angedeutet wird), ist auch aus der Quantenfeldtheorie geläufig; s. J. SCHWINGER, Phys. Rev. **82**, 914 [1951]; W. PAULI, NIELS BOHR and the Development of Physics, London 1955, S. 30. Für den Hinweis auf diese Arbeiten danke ich Herrn Dr. H. KÜMMEL.

Damit findet man aus (3.1) und (3.2)

$$\psi^{(i)2} = \vec{\psi}^{(i)2} = 1$$

und hat, Sp 1 = 2 benutzend, dann gleich die Normierungsrelationen von (3.4).

C. Einige Spur-Formeln

Zum bequemen Nachrechnen notieren wir die Spuren von Spin-Produkten bis zum 4. Grad. Ausgangspunkt sind dabei die Vertauschungsrelationen

$$s_\mu s_\nu - s_\nu s_\mu = i \varepsilon_{\mu\nu\varrho} s_\varrho$$

und die den Spinwert kennzeichnenden Beziehungen

$$s_\mu s_\mu = S(S+1); \quad \text{Sp } 1 = 2S+1.$$

Man schließt daraus mittels einfacher Algebra, unter Benutzung der Forminvarianz bei Drehung, speziell für $S = \frac{1}{2}$

$$\text{Sp } 1 = 2,$$

$$\text{Sp}(s_\mu) = 0,$$

$$\text{Sp}(s_\mu s_\nu) = \frac{1}{2} \delta_{\mu\nu},$$

$$\text{Sp}(s_\mu s_\nu s_\lambda) = \frac{i}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda},$$

$$\text{Sp}(s_\mu s_\nu s_\lambda s_\kappa) = \frac{1}{8} (\delta_{\mu\nu} \delta_{\lambda\kappa} - \delta_{\mu\lambda} \delta_{\nu\kappa} + \delta_{\mu\kappa} \delta_{\nu\lambda}).$$

An Hand dieser Formeln ist es leicht, (6.2) zu verifizieren.

Dynamische Elektron-Gitter-Kopplung in gestörten Ionenkristallen

VON HARALD STUMPF und MAX WAGNER

Aus dem Institut für theoretische und angewandte Physik der Technischen Hochschule Stuttgart
(Z. Naturforschg. 15 a, 30—46 [1960]; eingegangen am 1. September 1959)

Wie früher gezeigt wurde, muß man bei der Elektron-Gitter-Wechselwirkung in Realkristallen die statische und dynamische Wechselwirkung unterscheiden. Statisch bildet sich zunächst eine Kristallkonfiguration unter Mitwirkung der Elektronen bei einer Gittertemperatur $T=0$ aus. Diesem statischen Gitterzustand überlagern sich sodann Eigenschwingungen des Gitters, welche ebenfalls von der Mitwirkung der Elektronen abhängig sind, was als dynamische Elektron-Gitter-Kopplung bezeichnet wird. Hier werden zunächst die allgemeinen Bedingungen für diese dynamische Kopplung formuliert, welche aus der Minimalforderung an die Elektronenenergie unter Annahme einer adiabatischen Elektron-Gitter-Wechselwirkung entstehen. Für die Elektronenwellenfunktionen wird dabei ein Variationsansatz verwendet. Die allgemeinen Ergebnisse werden danach auf einen Modellfall übertragen, bei dem man voraussetzt, daß das Schwingungsspektrum des Realkristalls näherungsweise aus einem Spektrum des Idealkristalls, sowie zusätzlichen Störschwingungen aufgebaut ist, und nur wenige, an den Gitterstörungen lokalisierte Elektronen explizit quantenmechanisch beschrieben werden müssen, wogegen alle übrigen Elektronen kollektiv mit den Gitterkernen zu Ionen zusammengefaßt sind. Es werden für diesen Fall die Kopplungskonstanten der dynamischen Elektron-Gitter-Kopplung in den Wellenfunktionen und der Energie berechnet, und am Beispiel eines Polarons, und eines F -Zentren-Elektrons explizit mitsamt den Wellenfunktionen angegeben.

Wie in einer Reihe vorangehender Arbeiten¹ gezeigt wurde, kann man auf die explizite Einführung der Elektron-Gitter-Kopplung bei der Berechnung von Störstellenprozessen in Ionenkristallen nicht verzichten. Der HAMILTON-Operator des dem Kristall zugeordneten quantenmechanischen Systems enthält dann neben den Koordinaten aller Elektronen die noch beliebig variablen Koordinaten der Atomkerne des Gitters. Auf diese Weise wird nicht nur die Dynamik des Kristalls in die Theorie einbezogen, sondern der Gleichgewichtszustand des Kristalls selbst wird zu einem quantenmechanischen Problem. Dieses Problem muß streng theoretisch das Zusammenwirken sämtlicher Elektronen und sämtlicher Gitter-

kerne einschließen. Da es sich aber im vorliegenden Fall speziell um die von Störstellen abhängigen Reaktionen des Kristalls handelt, bei denen nur eine begrenzte Anzahl von Elektronen auf die Beobachtungseingriffe reagiert, kann man in guter Näherung einen Großteil der übrigen Kristallelektronen kollektiv mit den Atomkernen des Gitters zu Ionen zusammenfassen und damit aus der expliziten quantenmechanischen Beschreibung eliminieren. Zurück bleibt ein System von wenigen quantenmechanisch explizit beschriebenen Elektronen, welches mit den Ionen der Störstelle und der übrigen Gitterumgebung in Wechselwirkung steht.

Dieses Problem wird zunächst durch den Ansatz

¹ E. FUES u. H. STUMPF, Z. Naturforschg. 10 a, 136 [1955]; H. STUMPF, Z. Naturforschg. 10 a, 971 [1955]; E. FUES, H. STUMPF u. F. WAHL, Z. Naturforschg. 13 a, 962 [1955];

H. GROSS u. F. WAHL, Z. Naturforschg. 14 a, 285 [1959]; E. FUES u. H. STUMPF, Z. Naturforschg. 14 a, 142 [1959].