

Berechnung des Durchgangs schneller Elektronen durch Materie durch eine Kombination von analytischen und stochastischen Methoden

Von GÜNTHER MEISSNER *

Laboratorium für Technische Physik der Technischen Hochschule München **

(Z. Naturforsch. 19 a, 269—283 [1964]; eingegangen am 16. November 1963)

Um den Durchgang schneller Elektronen durch Materie unter dem Einfluß von COULOMB-Streuung, Anregung und Ionisation zu berechnen, wurde ein aus analytischen und stochastischen Lösungsmethoden kombiniertes Monte-Carlo-Verfahren entwickelt. Große Energie- und Impulsänderungen der Elektronen wurden stochastisch, kleine Änderungen analytisch behandelt. Für senkrecht auf Aluminiumfolien auffallende monoenergetische Elektronen von $2 m c^2$ wurden die folgenden Berechnungen auf der IBM-7090 durchgeführt und mit dem Experiment verglichen: die Energieverteilungen nach Transmission von $157,5 \text{ mg/cm}^2$ und 210 mg/cm^2 dicken Schichten, die Dosisverteilungen als Funktion der Eindringtiefe in Folien von 210 mg/cm^2 , 420 mg/cm^2 sowie im halbunendlich ausgedehnten Medium und schließlich die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten zu den entsprechenden Dicken.

Der Transport schneller Elektronen durch Materie, der für eine Vielzahl physikalischer und auch biologischer Fragen von Bedeutung ist, wird im 1 MeV-Bereich durch die Vielfachstreuung (*multiple scattering*) im COULOMB-Feld der Absorberatome und durch die statistischen Schwankungen der Energieverluste (*straggling*) bei Ionisations- und Anregungsstößen charakterisiert; wenn die entsprechenden Wirkungsquerschnitte bekannt sind, läßt er sich durch eine BOLTZMANNsche Transportgleichung beschreiben. Bei deren Lösung stößt man im allgemeinen Fall allerdings auf zwei nicht unerhebliche Schwierigkeiten: a) die Berücksichtigung der Großwinkelstöße, d. h. große Änderungen von Impuls oder Energie, b) die Berücksichtigung von Randbedingungen für begrenzte Streumedien.

In Absorberfolien, die dünn im Vergleich zur mittleren Reichweite der einfallenden Elektronen sind, kann man Vielfachstreuung und Energieverlust in guter Näherung getrennt und daher analytisch behandeln. Die berechneten Winkelverteilungen¹⁻³ und Energieverteilungen⁴⁻⁷ stehen in befriedigender Übereinstimmung mit dem Experiment.

Für dicke Absorberfolien oder komplizierte Geometrien, d. h. immer dann, wenn die komplizierte Winkel- und Energieabhängigkeit des Stoßprozesses

voll berücksichtigt werden muß, wird eine geschlossene analytische Behandlung praktisch unmöglich. Für solche Fälle erweist sich die Monte-Carlo-Methode⁸⁻¹⁰ als zweckmäßig, weil diese Rechnungen weder durch eine Vermehrung der Zahl der Variablen noch durch Einführung komplizierter Wirkungsquerschnitte merklich erschwert werden. Da nun aber schnelle Elektronen von 1 MeV im Mittel etwa 10^2 bis 10^3 mehr Stöße pro Längeneinheit erfahren als z. B. Spaltneutronen, würde die Rekonstruktion des Zufallsweges eines Elektrons von Stoß zu Stoß zu große Rechenzeiten erfordern.

Das Prinzip des bei uns verwendeten Verfahrens besteht nun darin, daß wir den Zufallsweg eines Elektrons von Großwinkelstoß zu Großwinkelstoß verfolgen. Die Großwinkelstöße seien dadurch definiert, daß entweder die Winkelablenkung des einfallenden Elektrons im COULOMB-Feld des Kernes groß genug ist, um die abschirmende Wirkung der Hüllenelektronen vernachlässigen zu können, oder daß der Energieverlust bei der Streuung an der Hülle so groß ist, daß das streuende Elektron als frei betrachtet werden kann. Den „wahren Weg“ zwischen zwei Großwinkelstößen zerlegen wir weiter in eine relativ geringe Zahl von kurzen Unterabschnitten („Vielfachstreichritte“), in denen die gesamte mittlere

* Auszug aus der von der Fakultät für Allgemeine Wissenschaften der Technischen Hochschule München genehmigten Dissertation, 1963.

** Jetzt: Institut für Theoretische Physik der Universität Marburg/Lahn.

¹ G. MOLIÈRE, Z. Naturforsch. 3 a, 78 [1948].

² H. S. SNYDER u. W. T. SCOTT, Phys. Rev. 76, 220 [1949].

³ H. A. BETHE, Phys. Rev. 89, 1256 [1953].

⁴ L. LANDAU, J. Phys. USSR 8, 201 [1944].

⁵ O. BLUNCK u. S. LEISEGANG, Z. Phys. 128, 500 [1950].

⁶ W. SCHULTZ, Z. Phys. 129, 530 [1951].

⁷ U. FANO, Phys. Rev. 92, 328 [1953].

⁸ H. A. MEYER, Symp. on Monte-Carlo-Methods, John Wiley, New York 1956.

⁹ G. GOERTZEL u. M. H. KALOS, Prog. Nucl. Eng. Ser. 2, Phys.-Math., 315 [1958].

¹⁰ I. SPANIER, WAPD-195 [1959].



Winkelablenkung ebenso wie der gesamte mittlere Energieverlust klein sind.

Um Zufallswege von Elektronen in Materie nach dem „kombinierten Verfahren“ konstruieren zu können, ist zweierlei erforderlich. Einmal benötigen wir: a) den „Transportkern für Großwinkelstöße“, d. h. die Wahrscheinlichkeit $G_g(T, l)$ dafür, daß ein Elektron der kinetischen Anfangsenergie T längs des wahren Weges l keinen und zwischen l und $l + dl$ gerade einen Großwinkelstoß erfährt, wenn längs l Kleinwinkelstöße – und dadurch bedingte Energieverluste – zugelassen sind; b) die „Verteilungsdichte“ $\Delta f_k(\mathbf{x}, \tilde{T}, \tilde{\Omega}, s)$ von Energien \tilde{T} , Orten \mathbf{x} und Flugrichtungen $\tilde{\Omega}$ durch Kleinwinkelstöße längs eines der Unterabschnitte $s = \Delta l$ zwischen zwei Großwinkelstößen. Zum anderen benötigen wir die differentielle Stoßwahrscheinlichkeit für Großwinkelstöße („Stoßkern“) $C_g(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega)$, d. h. die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Elektron der kinetischen Energie \tilde{T} und der Flugrichtung $\tilde{\Omega}$ bei einem Großwinkelstoß auf eine kinetische Energie zwischen T und $T + dT$ absinkt und von der Flugrichtung $\tilde{\Omega}$ in eine Richtung Ω des Raumwinkel-elementes $d\Omega$ abgelenkt wird.

Unser „kombiniertes Verfahren“ stellt somit eine konsistente Verallgemeinerung von Monte-Carlo-Berechnungen des Elektronentransportes dar, wie sie von HEBBARD und WILSON¹¹, LEISS, PENNER und ROBINSON¹², MACCALLUM¹³ und in jüngster Zeit von PERKINS¹⁴ durchgeführt wurden. Alle diese Autoren fassen bereits eine größere Zahl von Einzelablenkungen nach der MOLIÈRESCHEN Theorie¹ der Kleinwinkelstreuung zu Vielfachstreuerschritten zusammen. Der Einfluß einzelner großer Ablenkungen wird durch die Anpassung der Verteilungen für große Winkelablenkungen an das Einzelstreuungsgesetz berücksichtigt. Diese asymptotisch erfaßten Großwinkelstöße liegen nicht – wie bei uns – am Ende eines Vielfachstreuerschrittes und verursachen dadurch zusätzliche Wegverlängerungen, die unberücksichtigt bleiben. In unserem Verfahren werden auch große Energieänderungen streng erfaßt. Da sie ebenfalls stets an das Ende eines Vielfachstreuerschrittes zu liegen kommen, wird z. B. die Energieabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte wie die Energieänderung über-

haupt genauer berücksichtigt, was bei Energien unterhalb 0,5 MeV und besonders bezüglich der Sekundärelektronen bedeutsam ist.

Als erste Anwendung wurde ein Fortran-Programm für die IBM-7090 geschrieben, das zur Be-rechnung des Durchganges von Elektronen von $2 \text{ m} c^2$ ¹⁵ durch homogene Aluminiumfolien variabler Dicke diente.

Für senkrecht einfallende Elektronen wurden berechnet: a) die Energieverteilungen der unter dem Einfluß von COULOMB-Streuung und Anregungs- sowie Ionisationsverlusten transmittierten Elektronen nach $157,5 \text{ mg/cm}^2$ und 210 mg/cm^2 , b) die mittlere pro Längeneinheit absorbierte Energie als Funktion der Eindringtiefe (= Dosisverteilung) für Streu-folien von 210 mg/cm^2 , 420 mg/cm^2 sowie für das halbunendlich ausgedehnte Medium und schließlich c) Transmissions- und Reflexionskoeffizienten.

Im folgenden Abschnitt 1 werden wir das benutzte physikalische Modell und die daraus resultierende BOLTZMANN-Gleichung erläutern.

Im Abschnitt 2 werden wir die Wirkungsquerschnitte der BOLTZMANN-Gleichung diskutieren. Im Abschnitt 3 werden wir die Gleichungen zusammenstellen, die sich für den Stoßkern $C_g(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega)$, für die Verteilungsdichte $\Delta f_k(\mathbf{x}, \tilde{T}, \tilde{\Omega}, s)$ und für den Transportkern $G_g(T, l)$ ergeben. Im Abschnitt 4 wollen wir die Simulation von Elektronenschicksalen nach der kombinierten Methode in planparallelen Platten und die benutzten Näherungen beschreiben und im Abschnitt 5 die numerischen Ergebnisse diskutieren.

1. Die Boltzmann-Gleichung des Modells

Im Hinblick auf unser Verfahren führen wir anstatt der Zeit t die wahre Weglänge s ein, die ein Elektron nach der Zeit t zurückgelegt hat. Die zu untersuchenden Elektronen treten mit den Atomen des Mediums, das sie durchdringen, in Wechselwirkung. Die Wechselwirkung der einfallenden Elektronen untereinander und der streuenden Atome untereinander vernachlässigen wir.

Wegen des Massenverhältnisses von einfallenden Elektronen zu gestoßenen Atomen werden wir auch die Energieänderungen durch Rückstoß stets vernach-

¹¹ D. F. HEBBARD u. P. R. WILSON, Australian J. Phys. **8**, 90 [1955].

¹² J. L. LEISS, S. PENNER u. C. S. ROBINSON, Phys. Rev. **107**, 1544 [1957].

¹³ C. MACCALLUM, Bull. Amer. Phys. Soc. **5**, 379 [1960].

¹⁴ J. F. PERKINS, Phys. Rev. **126**, 1781 [1962].

¹⁵ $m c^2$ sei die Ruheenergie eines Elektrons (0,5108 MeV).

lässigen. Wenn wir daher annehmen, daß die Atome des Streumediums statistisch verteilt sind und im Laborsystem ruhen, wird ihre stationäre Verteilungsdichte

$$f_a(\mathbf{x}, T, \Omega) = (1/4\pi) N_a \delta(T)$$

durch die mittlere Anzahl von Atomen pro Volumeneinheit N_a hinreichend bestimmt. Um für die Wahrscheinlichkeitsdichte $f_e(\mathbf{x}, T, \Omega, s)$ eines Elektrons am Orte \mathbf{x} mit der Energie T und der Flugrichtung Ω nach einer wahren Weglänge s eine Transportgleichung aufzustellen zu können, benötigen wir noch den zweifach differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\partial^2 \sigma / \partial \Omega \partial Q \equiv \xi(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) \quad (1.1)$$

für die Streuung eines unpolarisierten Elektrons der kinetischen Energie \tilde{T} und der Flugrichtung $\tilde{\Omega}$ an einem Atom im Grundzustand. Die übertragene Energie bezeichnen wir mit

$$Q = \tilde{T} - T,$$

wenn T die kinetische Energie des Elektrons nach dem Stoß bedeutet. Die Richtungsänderung ist gegeben durch

$$\cos \Theta = \tilde{\Omega} \cdot \Omega,$$

wenn Ω die Flugrichtung nach dem Stoß ist. Die totale Stoßwahrscheinlichkeit pro Längeneinheit

$$\Sigma(\tilde{T}) = (N_a / \varrho) \int d\Omega \int dT \xi(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) \quad (1.2)$$

folgt ebenso wie die differentielle Stoßwahrscheinlichkeit

$$C_0(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) = \frac{N_a}{\varrho \Sigma(\tilde{T})} \xi(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) \quad (1.3)$$

aus dem zweifach differentiellen Wirkungsquerschnitt (1.1) ¹⁶.

Die Transportgleichung

$$f_e(\mathbf{x}, T, \Omega, s) = \int_0^s ds' e^{-\Sigma(T) s'} \quad (1.4)$$

$$\cdot \left\{ \int d\tilde{T} \int d\tilde{\Omega} f_e(\mathbf{x} - s' \Omega, \tilde{T}, \tilde{\Omega}, s - s') \Sigma(\tilde{T}) \right.$$

$$\left. \cdot C_0(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) + S(\mathbf{x} - s' \Omega, T, \Omega, s - s') \right\}$$

verknüpft die Wahrscheinlichkeitsdichte $f_e(\mathbf{x}, T, \Omega, s)$ mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $f_e(\mathbf{x}, \tilde{T}, \tilde{\Omega}, s)$ unmittelbar vor dem letzten Stoß am Orte $\mathbf{x} = \mathbf{x} - s' \Omega$, mit der zugehörigen Weglänge $\tilde{s} = s - s'$, wenn s' der

¹⁶ ϱ ist die Dichte des Streumediums in g/cm³. Alle Längen werden daher in g/cm² angegeben.

Abstand des letzten Stoßes von dem betrachteten Aufpunkt ist. $S(\mathbf{x}, T, \Omega, s)$ ist die Quelldichte. Wendet man auf (1.4) den Operator: $[\partial / \partial s + \Omega \cdot \partial / \partial \mathbf{x} + \Sigma(T)]$ an, dann erhält man die BOLTZMANNSCHE Transportgleichung

$$\left[\frac{\partial}{\partial s} + \Omega \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \Sigma(T) \right] f_e(\mathbf{x}, T, \Omega, s) = \int d\tilde{T} \int d\tilde{\Omega} f_e(\mathbf{x}, \tilde{T}, \tilde{\Omega}, s) \Sigma(\tilde{T}) C_0(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) + S(\mathbf{x}, T, \Omega, s) \quad (1.5)$$

in der bekannten Form einer Integrodifferentialgleichung ¹⁷. Die eingangs erwähnte Modifikation des Stoßkernes

$$C_0(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) = \frac{N_a}{\varrho \Sigma(\tilde{T})} \xi(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega)$$

und des Transportkernes

$$G_0(T, s) = \Sigma(T) e^{-\Sigma(T) s}$$

bezüglich der Großwinkelstöße im „kombinierten Verfahren“ hängt von der genauen Definition der Großwinkelstöße und damit von der Wahl des Grenzwinkels Θ_{gr} und des Energieverlustes Q_{gr} ab, die Klein- und Großwinkelstöße trennen. Ihre zweckmäßige Wahl folgt aus der expliziten Gestalt des zweifach differentiellen Wirkungsquerschnittes ¹⁸.

2. Wirkungsquerschnitte der Elementarereignisse

Wir spalten den durch (1.1) definierten Wirkungsquerschnitt – zunächst formal – auf

$$\xi(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) = \xi_k(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) + \xi_g(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) \quad (2.1)$$

in einen Anteil für Stoßprozesse mit kleiner Winkelablenkung ($\Theta < \Theta_{gr}$):

$$\xi_k(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) = \xi(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) \eta(\Theta_{gr} - \Theta)$$

$$= \begin{cases} \xi(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega), & \text{für } \Theta < \Theta_{gr}, \\ 0, & \text{für } \Theta \geq \Theta_{gr} \end{cases} \quad (2.2a)$$

und einen zweiten für solche mit großer Winkelablenkung ($\Theta \geq \Theta_{gr}$):

$$\xi_g(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) = \xi(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) \eta(\Theta - \Theta_{gr})$$

$$= \begin{cases} 0, & \text{für } \Theta < \Theta_{gr}, \\ \xi(T \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega), & \text{für } \Theta \geq \Theta_{gr}. \end{cases} \quad (2.2b)$$

¹⁷ J. W. WEYMOUTH, Phys. Rev. **84**, 766 [1951].

¹⁸ Siehe Anhang.

Θ_{gr} ist dabei ein zunächst noch willkürlicher Grenzwinkel zwischen kleinen und großen Winkelablenkungen. Die Sprungfunktion $\eta(x) = 1$, wenn $x > 0$ und $\eta(x) = 0$, wenn $x < 0$. Der durch (1.1) definierte zweifach differentielle Wirkungsquerschnitt in erster BORNscher Näherung, der von MØLLER¹⁹ zuerst berechnet wurde, ist im Anhang (A.6) explizit angegeben. In dem in erster BORNscher Näherung geschlossenen durchrechenbaren Fall, in dem in H_a der Gl. (A.3) die Elektron-Elektronwechselwirkung: $\sum_{i < j} e^2/|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$ vernachlässigt wird^{20, 21}, dominieren bei kleinen Ablenkungen die Anregungsprozesse in die untersten Energieniveaus. Die Ionisierungsprozesse sind hier relativ selten. Bei unelastischen Stößen mit großer Impulsübertragung: $\hbar\mathbf{x} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}$ sorgt der Exponent: $i\mathbf{x}\cdot\mathbf{x}_j$ im Matrixelement (A.8) in Verbindung mit dem Zustandsvektor $|n\rangle$ des Endzustandes für die angenäherte Erfüllung des Impulssatzes, so als ob das betreffende Hüllelektron vor dem Stoß annähernd frei gewesen wäre. Dann aber muß das mittlere Schwankungsquadrat des Energieverlustes klein gegen den mittleren Energieverlust sein. Ein zwischen 10° und 15° liegender Grenzwinkel Θ_{gr} genügt dieser Forderung. Der Rückstoßverlust Q_{gr} eines Elektrons der kinetischen Energie T durch den Stoß mit einem ruhenden, freien, der durch die relativistische Kinematik aus der Winkelablenkung Θ_{gr} folgt, nämlich

$$\sin \Theta_{\text{gr}} = \sqrt{2 Q_{\text{gr}}/T(T+2-Q_{\text{gr}})}, \quad (2.3)$$

kann daher als Energieverlust gewählt werden, der Großwinkelstöße von Kleinwinkelstößen trennt.

Der Wirkungsquerschnitt $\xi_k(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega)$ wird dann für alle Energieübertragungen $\tilde{T} - T \geq Q_{\text{gr}}$ praktisch verschwinden. Wir erweitern deshalb (2.2a) zu²²

$$\xi_k(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) = 0, \quad \text{für } \begin{cases} \Theta \geq \Theta_{\text{gr}} \text{ oder} \\ (\tilde{T} - T) \geq Q_{\text{gr}}. \end{cases} \quad (2.4)$$

a) *Wirkungsquerschnitt für Großwinkelstöße*: Der Wirkungsquerschnitt für Großwinkelstöße

$$\xi_g(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega)$$

¹⁹ C. MØLLER, Ann. Phys., Lpz. (5) **14**, 531 [1932].

²⁰ H. BETHE, Handb. d. Phys., Bd. XXIV/1, Kap. 3/IV, Springer-Verlag, Berlin 1933.

²¹ F. SAUTER, Vorträge über kosmische Strahlung, 2. Auflage, S. 461, Berlin 1953, herausgegeben von W. HEISENBERG.

²² Da für den Wert $T = T_0$ (Einfallsenergie) Q_{gr} den größten Betrag zu einem vorgegebenen Θ_{gr} annimmt, wählen wir $Q_{\text{gr}} = T_0/M$, wobei $M = 10$ gesetzt wurde.

²³ F. MOTT, Proc. Roy. Soc., Lond. A **124**, 425 [1928].

läßt sich aus (A.6) in guter Näherung durch Addition der Wirkungsquerschnitte für reine Kernstreuung und reine Hülleinstreuung darstellen:

$$\left(\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial Q} \right)_g = \xi_{g_{\text{Kern}}}(\tilde{T}, Q, \Theta) + Z \xi_{g_{\text{Elektron}}}(\tilde{T}, Q, \Theta); \quad (2.5)$$

$$T = E_{\text{kin}}/(m c^2); \quad Q = \varepsilon/(m c^2); \quad Z: \text{Ordnungszahl.}$$

Für den ersten Summanden: $\xi_{g_{\text{Kern}}}(\tilde{T}, Q, \Theta)$ folgt aus dem elastischen Anteil von (A.6) – mit der elektrischen Wechselwirkung allein –, wenn man das von der Abschirmung herrührende Summenglied

$$\sum_j \langle n_0 | \exp(i \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_j) | n_0 \rangle$$

vernachlässigt, die bekannte MOTTSche Formel^{23, 24}

$$\begin{aligned} \xi_{g_{\text{Kern}}}(T, Q, \Theta) &= (2.6) \\ &= \frac{Z^2}{4} r_e^2 \frac{(T+1)^2}{T^2(T+2)^2} \frac{1}{\sin^4(\Theta/2)} R(\Theta, T, Z) \delta(Q). \end{aligned}$$

McKINLEY und FESHBACH²⁵ berechneten den Spinfaktor $R(\Theta, T, Z)$ für die Kernstreuung in zweiter BORNscher Näherung:

$$\begin{aligned} R(\Theta, T, Z) &= 1 - \frac{T(T+2)}{(T+1)^2} \sin^2 \frac{\Theta}{2} \quad (2.7) \\ &\quad + \frac{Z \pi \sqrt{T(T+2)}}{137(T+1)} \left(1 - \sin \frac{\Theta}{2} \right) \sin \frac{\Theta}{2}; \end{aligned}$$

$$r_e = e^2/(m c^2) = 2,81718 \cdot 10^{-13} \text{ cm: klassischer Elektronenradius.}$$

Der zweite Summand: $Z \cdot \xi_{g_{\text{Elektron}}}(T, Q, \Theta)$ ergibt sich aus dem unelastischen Anteil von (A.6). Wegen des KRONECKER-Symbols: δ_{n, n_0} in (A.8) verschwindet der Anteil der Kernstreuung. Wegen der angenäherten Erfüllung des Impulssatzes für inelastische Stöße mit großer Winkelablenkung in der oben erläuterten Form können wir den von MØLLER²⁶ berechneten Wirkungsquerschnitt für die Streuung zweier freier Elektronen aneinander im Ruhesystem des einen benutzen²⁷

$$\begin{aligned} \xi_{g_{\text{Elektron}}}(T, Q, \Theta) &= r_e^2 \frac{(T+1)^2}{T(T+2)} \\ &\cdot \left[\frac{1}{Q^2} + \frac{1}{(T-Q)^2} - \frac{(2T+1)}{T(T+1)^2} \left\{ \frac{1}{Q} + \frac{1}{T-Q} \right\} + \frac{1}{(T+1)^2} \right] \\ &\cdot \delta \left(\cos \Theta - \sqrt{\frac{(T+2)(T+Q)}{T+2-Q}} \right). \quad (2.8) \end{aligned}$$

²⁴ F. MOTT, Proc. Roy. Soc., Lond. A **135**, 429 [1932].

²⁵ W. A. Mc KINLEY u. H. FESHBACH, Phys. Rev. **74**, 1759 [1948].

²⁶ C. MØLLER, Z. Phys. **70**, 686 [1931].

²⁷ Der MØLLERSche Wirkungsquerschnitt enthält neben dem Retardierungs- auch den Austauscheffekt; daher ist

$$\xi(\tilde{T}, Q = T - \tilde{T}, \Theta) = \xi(T, \tilde{T}, \Theta).$$

Möller Das energiereichere Elektron wird stets als Primärelektron bezeichnet. Der maximale Energieverlust ist daher

$$Q_{\text{max}} = T/2.$$

b) *Wirkungsquerschnitte für Kleinwinkelstöße:* Bei kleinen Winkelablenkungen ($\Theta < \Theta_{\text{gr}}$) kann man die Exponentialfunktion im Matrixelement (A.8) entwickeln und nach dem ersten nicht verschwindenden Glied abbrechen. Da ferner für Kleinwinkelstöße – wie schon in der Einleitung erwähnt – Winkelablenkungen durch Vielfachstreuung im abgeschirmten COULOMB-Feld des Kernes und Energieverluste durch Hülleinstreuung nach geringfügiger Modifikation getrennt behandelt werden können, sind für unser Verfahren nur die einfach differentiellen Wirkungsquerschnitte erforderlich. Für

$$(\partial\sigma/\partial Q)_k \equiv \int d\Omega \xi_k(T_0, Q, \Theta)$$

erhält man in dieser Näherung aus (A.6) den nach BETHE und LIVINGSTONE²⁸ berechneten Wirkungsquerschnitt

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\sigma}{\partial Q}\right)_k &= 2\pi r_e^2 \frac{(T_0+1)^2}{T_0(T_0+2)} \sum_n \frac{f_{on}}{Q} \left[\ln\left(\frac{2Q_{\text{gr}} T_0 (T_0+2)}{Q^2}\right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{T_0 (T_0+2)}{(T_0+1)^2} \right] \delta\left(Q - \frac{W_n - W_0}{m c^2}\right). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Die Oszillatiorstärke f_{on} ist durch die Gleichung

$$|\langle n | \sum_{j=1}^Z x_j | n_0 \rangle|^2 = f_{on} \hbar^2 / 2 m (W_n - W_0) \quad (2.10)$$

gegeben. Für sie gilt der Summensatz

$$\sum_n f_{on} = Z. \quad (2.11)$$

Bei der Berechnung des „zweiten Moments“ $\langle Q_k^2(T, M) \rangle$ nach Gl. (4.2) auf Seite 275 tritt die Oszillatiorstärke f_{oi} auch noch in der Verknüpfung

$$\sum_n f_{oi} \frac{(W_i - W_0)}{m c^2} \ln \frac{(W_i - W_0)}{m c^2}$$

auf. Wenn $W_i - W_0 = I_i$ die Ionisierungsenergie der i -ten Ionisierungsstufe ist, gibt $f_{oi} = n_i$ die Zahl der Elektronen dieser Ionisierungsenergie I_i an (man vergleiche auch Seite 275).

Für

$$(\partial\sigma/\partial Q)_k \equiv \int dQ \xi_k(T_0, Q, \Theta)$$

werden wir den von MOLIÈRE²⁹ berechneten Wirkungsquerschnitt für Kleinwinkelstöße am abgeschirmten Kernfeld unter Berücksichtigung der Hülleinstöße nach FANO³⁰ zugrunde legen:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\sigma}{\partial Q}\right)_k &= Z(Z+1)(1+\varepsilon(T_0)) r_e^2 \frac{(T_0+1)^2}{T_0^2(T_0+2)^2} \\ &\quad \cdot \frac{1}{(1+\Theta_a^2(T_0)/2 - \cos\Theta)^2}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

In (2.12) ist

$$\Theta_a^2(T) = \left(\frac{Z^{1/3}}{0,885 \cdot 137}\right)^2 \frac{1}{T(T+2)} \cdot \left[1,13 + 3,76 \left(\frac{Z}{137}\right)^2 \frac{(T+1)^2}{T(T+2)} \right] \quad (2.12a)$$

die von MOLIÈRE²⁹ berechnete Abschirmkonstante, und mit

$$\begin{aligned} \varepsilon(T) &= \frac{1}{(Z+1) \ln \Theta_a^2(T)} \\ &\cdot \left\{ 5 - \ln \left[0,16 \cdot Z^{-2/3} \left(1 + \frac{3,33 Z(T+1)}{137 \sqrt{T(T+2)}} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.12b)$$

wird die von FANO³⁰ berechnete Korrektur durch inelastische Stöße berücksichtigt.

3. Gleichungen für die Verteilungsdichten des kombinierten Verfahrens

Unter Ausnutzung der aus dem Wirkungsquerschnitt (A.6) folgenden Relationen (2.4) und (2.5) können wir die unserem physikalischen Modell zugrunde gelegte Transportgleichung (1.5) schreiben als

$$\frac{\partial}{\partial s} f_e + \boldsymbol{\Omega} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} f_e + \Sigma_k f_e + \Sigma_g f_e = X_k + X_g + X_Q. \quad (3.1)$$

In der Gl. (3.1) machten wir Gebrauch von den Zerlegungen:

$$\Sigma(T) = \Sigma_k(T) + \Sigma_g(T) \quad (3.2a)$$

und

$$\begin{aligned} \Sigma(\tilde{T}) C_0(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \boldsymbol{\Omega}) &= \Sigma_k(\tilde{T}) C_k(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \\ &\quad + \Sigma_g(\tilde{T}) C_g(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \boldsymbol{\Omega}). \end{aligned} \quad (3.2b)$$

Es ist

$$\Sigma_k(T) = 2\pi \frac{N_a}{\varrho} \int_0^{Q_{\text{gr}}} dQ \int_0^{\Theta_{\text{gr}}} d\Theta \sin\Theta \xi_k(T, Q, \Theta) \quad (3.2c)$$

und ferner

$$\Sigma_g(T) = \Sigma_{g_{\text{Kern}}}(T) + Z \Sigma_{g_{\text{Elektron}}}(T), \quad (3.2d)$$

$$\Sigma_{g_{\text{Kern}}}(T) = 2\pi \frac{N_a}{\varrho} \int dQ \int_{\Theta_{\text{gr}}}^{\pi} d\Theta \sin\Theta \xi_{g_{\text{Kern}}}(T, Q, \Theta) \quad (3.2e)$$

²⁸ M. S. LIVINGSTONE u. H. A. BETHE, Rev. Mod. Phys. **9**, 245 [1937].

²⁹ G. MOLIÈRE, Z. Naturforsch. **2a**, 133 [1947].

³⁰ U. FANO, Phys. Rev. **93**, 117 [1954].

und

$$\Sigma_{g_{\text{Elektron}}}(T) = 2 \pi \frac{N_a}{\varrho} \int d\Theta \sin \Theta \cdot \int_{Q_{\text{gr}}}^{T/2} dQ \xi_{g_{\text{Elektron}}}(T, Q, \Theta). \quad (3.2f)$$

Ganz ähnlich ist

$$C_k(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) = \frac{N_a/\varrho}{\Sigma_k(\tilde{T})} \xi_k(\tilde{T}, \tilde{T} - T, \Theta) \quad (3.3a)$$

$$\text{und } C_g(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) = \begin{cases} \frac{N_a/\varrho}{\Sigma_g(\tilde{T})} [\xi_{g_{\text{Kern}}}(\tilde{T}, \tilde{T} - T, \Theta) + Z \xi_{g_{\text{Elektron}}}(\tilde{T}, \tilde{T} - T, \Theta)], & \text{für } \Theta \geq \Theta_{\text{gr}}, \\ 0, & \text{für } \Theta < \Theta_{\text{gr}}. \end{cases} \quad (3.3b)$$

Die rechte Seite der Transportgleichung (3.1), das „reduzierte Stoßintegral“, setzt sich aus drei Anteilen zusammen:

a) dem Stoßintegral für Kleinwinkelstöße

$$X_k(\mathbf{x}, T, \Omega, s) = \int_{\tilde{T}}^{T+Q_{\text{gr}}} d\tilde{T} \int_{\theta < \Theta_{\text{gr}}} d\tilde{\Omega} f_e(\mathbf{x}, \tilde{T}, \tilde{\Omega}, s) C_k(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) \Sigma_k(\tilde{T}), \quad (3.4)$$

b) dem Stoßintegral für Großwinkelstöße

$$X_g(\mathbf{x}, T, \Omega, s) = \int_{T+Q_{\text{gr}}}^{2T} d\tilde{T} \int_{\theta \geq \Theta_{\text{gr}}} d\tilde{\Omega} f_e(\mathbf{x}, \tilde{T}, \tilde{\Omega}, s) C_g(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) \Sigma_g(\tilde{T}), \quad (3.5)$$

c) dem Quellterm für Sekundärelektronen ($S = X_Q$)

$$X_Q(\mathbf{x}, T, \Omega, s) = Z \frac{N_a}{\varrho} \int_{\frac{1}{2}T}^{T_0} d\tilde{T} \int_{\theta \geq \Theta_{\text{gr}}} d\tilde{\Omega} f_e(\mathbf{x}, \tilde{T}, \tilde{\Omega}, s) \xi_{g_{\text{Elektron}}}(\tilde{T}, \tilde{T} - T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega). \quad (3.6)$$

T_0 ist dabei die maximal auftretende kinetische Energie der einfallenden Elektronen.

Die differentielle Stoßwahrscheinlichkeit für Großwinkelstöße: $C_g(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega)$ ist bereits durch die Gl. (3.3b) explizit gegeben. $\xi_{g_{\text{Kern}}}(T, Q, \Theta)$, den Mottschien, und $\xi_{g_{\text{Elektron}}}(T, Q, \Theta)$, den Møllerschen Streuquerschnitt, enthalten (2.6) und (2.8). Für die Wahrscheinlichkeitsdichte $W_T(T_0, l)$, deren Zusammenhang mit $G_g(T_0, l)$, dem Transportkern für Großwinkelstöße, durch

$$G_g(T_0, l) = \int dT W_T(T_0, l) \quad (3.7)$$

gegeben ist, folgt die Transportgleichung

$$\left[\frac{\partial}{\partial l} + \Sigma_k(T) + \Sigma_g(T) \right] W_T(T_0, l) = \int d\tilde{T} W_{\tilde{T}}(T_0, l) \Sigma_k(T) \int d\tilde{\Omega} C_k(T \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) \quad (3.8)$$

aus (3.1) formal dadurch, daß man das „Strömungsglied“: $\Omega \cdot (\partial/\partial \mathbf{x}) f_e$, den „Quellterm“: X_Q und das Stoßintegral für Großwinkelstöße: X_g gleich Null setzt. Für die Wahrscheinlichkeitsdichte: $\Delta f_k(\mathbf{x}, T, \Omega, s)$ von Orten \mathbf{x} , Energien T und Flugrichtungen Ω durch Kleinwinkelstöße längs eines Vielfachstreichsrittes $s = \Delta l$ zwischen zwei Großwinkelstößen ergibt sich ähnlich aus (3.1) die Gleichung

$$\left[\frac{\partial}{\partial s} + \Omega \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \Sigma_k(T) \right] \Delta f_k(\mathbf{x}, T, \Omega, s) = \int_{\tilde{T}}^{T+Q_{\text{gr}}} d\tilde{T} \int_{\theta < \Theta_{\text{gr}}} d\tilde{\Omega} \Delta f_k(\mathbf{x}, \tilde{T}, \tilde{\Omega}, s) C_k(\tilde{T} \rightarrow T; \tilde{\Omega} \cdot \Omega) \Sigma_k(\tilde{T}), \quad (3.9)$$

wenn man $\Sigma_g \equiv 0$ setzt, d. h. die Stoßdichte für Großwinkelstöße: $\Sigma_g f_e$, der Quellterm: X_Q und das Stoßintegral für Großwinkelstöße: X_g verschwinden. Für unser Verfahren benötigen wir die Lösungen von (3.8) und (3.9) zu den Anfangs- bzw. Randbedingungen

$$W_T(T_0, l) = \begin{cases} \delta(T - T_0), & \text{für } l = 0, \\ 0, & \text{für } \begin{cases} T_0 < T \text{ oder} \\ l < 0 \end{cases} \end{cases} \quad (3.10)$$

und

$$\Delta f_k(\mathbf{x}, T, \Omega, s) = \begin{cases} \frac{\delta(\mathbf{x})}{(2\pi)^3} \delta(\Omega - \Omega_0) \delta(T - T_0), & \text{für } s = 0, \\ 0, & \text{für } s < 0. \end{cases} \quad (3.11)$$

4. Simulation von Elektronenschicksalen nach der kombinierten Methode

Um Zufallswege von Elektronen in Materie nach dem eingangs erläuterten kombinierten Verfahren zu konstruieren, haben wir die folgenden Näherungs-

lösungen der Gln. (3.9) und (3.8) bzw. (3.7) benutzt.

1. für die Wahrscheinlichkeit $f_{k_1}(T_0; T, s) dT$, daß ein Elektron der kinetischen Energie T_0 längs s durch Kleinwinkelstöße auf eine solche zwischen T und $T + dT$ absinkt

$$f_{k_1}(T_0; T, s) = \frac{1}{\sqrt{2 \pi \Delta_T^2(T_0; s)}} \exp \left\{ -\frac{(T - \bar{T}(T_0; s))^2}{2 \Delta_T^2(T_0; s)} \right\}. \quad (4.1)$$

Wenn wir

$$\langle Q_k^2(T, M) \rangle \equiv \frac{N_a}{\varrho} \int_0^{Q_{gr} = T/M} dQ Q^2 \left(\frac{\partial \sigma}{\partial Q} \right)_k \quad (4.2)$$

$$\langle Q_k(T, M) \rangle = 2 C \frac{(T+1)^2}{T(T+2)} \left[\ln \left\{ 2 \left(\frac{m c^2}{I} \right)^2 T^2 (T+2) \right\} - \frac{T(T+2)}{(T+1)^2} \right], \quad (4.3c)$$

$$\langle Q_k^2(T, M) \rangle = 2 C \frac{(T+1)^2}{T(T+2)} \left[\sum_i \frac{n_i}{Z} \left\{ \left(\frac{R I_i}{m c^2} \right) \left\{ \ln \left(2 \frac{I_i}{m c^2} \left(\frac{m c^2}{K_i} \right)^2 T(T+2) \right) - \frac{T(T+2)}{(T+1)^2} \right\} + \frac{T}{M} - 5 \left(\frac{I_i}{m c^2} \right) \right\} \right]. \quad (4.3d)$$

$C = 0,150 Z/A \text{ cm}^2/\text{g}$; Z : Ordnungszahl; A : Atomgewicht; I : mittleres Ionisierungspotential des Atoms; $T/M = Q_{gr}$: Grenzenergie für kleine Energieverluste als Bruchteil M der kinetischen Energie T ; n_i : Zahl der Elektronen der Ionisierungsenergie I_i ; i : „Ionisierungsstufe“; $K_i = p I_i$ ($p = 1,3$ bei STERNHEIMER³¹); $R \approx 1,33$ (man vergleiche dazu etwa SPENCER und FANO³²).

2. Für die Wahrscheinlichkeit³³ $A(\hat{T}, \Delta, s) d\Delta$, daß der wahre Weg s eines Elektrons um einen Wert zwischen Δ und $\Delta + d\Delta$ größer ist als die zugehörige Eindringtiefe $x_3 = s - \Delta$ (man vergleiche Abb. 1):

$$A(\hat{T}, \Delta, s) = \begin{cases} \frac{4 \omega^2(\hat{T})}{s^3 \sqrt{\pi} v^3} (e^{-1/v} - 3 e^{-9/v}) , & \text{für } v \leq 2, \\ \frac{\pi \omega^2(\hat{T})}{2 s^2} e^{-\pi^2 v/16} , & \text{für } v \geq 2. \end{cases} \quad (4.4)$$

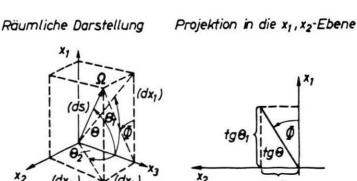


Abb. 1. Übergang von den Winkeln Θ, ϕ zu den Winkeln Θ_1, Θ_2 durch Projektion in die x_1, x_2 -Ebene bzw. x_2, x_3 -Ebene.

³¹ R. M. STERNHEIMER, Phys. Rev. **88**, 851 [1952].

³² L. V. SPENCER u. U. FANO, Phys. Rev. **93**, 1172 [1954].

³³ C. N. YANG, Phys. Rev. **84**, (I) 599 [1951].

einführen, ergibt sich die mittlere Energie $T(T_0, s)$ als Umkehrfunktion der durch numerische Integration von

$$s = \int_{T_0}^{T_0} dT \frac{1}{\langle Q_k(T, M) \rangle} \quad (4.3a)$$

gewonnenen wahren Weglänge s . Das Schwankungsquadrat $\Delta_T^2(T_0, s)$ ergibt sich zu

$$\Delta_T^2(T_0, s) = \int_{T_0}^{T_0} dT \frac{\langle Q_k^2(T, M) \rangle}{\langle Q_k(T, M) \rangle}. \quad (4.3b)$$

Mit dem Wirkungsquerschnitt $(\partial \sigma / \partial Q)_k$ für Kleinwinkelstöße der Gl. (2.9) erhalten wir:

Dabei ist $\hat{T} = (T_0 + T)/2$ und $1/\omega^2(T)$ das mittlere Quadrat des Ablenkungswinkels pro Längeneinheit durch Kleinwinkelstöße. Wir berechneten es mit dem Wirkungsquerschnitt $(\partial \sigma / \partial Q)_k$ der Gl. (2.12) zu

$$\frac{1}{\omega^2(\hat{T})} = \frac{\pi}{4} N_a Z(Z+1) r_e^2 (1 + \varepsilon(\hat{T})) \frac{(\hat{T}+1)^2}{\hat{T}^2(\hat{T}+2)^2} \cdot \left\{ \ln \frac{\Theta_a^2(\hat{T}) + \Theta_{gr}^2}{\Theta_a^2(\hat{T})} - \frac{\Theta_{gr}^2}{\Theta_a^2(\hat{T}) + \Theta_{gr}^2} \right\}. \quad (4.5)$$

Ferner ist $\Delta = \frac{\varrho^2}{2 \omega^2(T)} v$.

3. Für die Wahrscheinlichkeit $W(\hat{T}, x_l, s) dx_l$, daß ein Elektron nach der wahren Weglänge s eine transversale Ortsversetzung zwischen x_l und $x_l + dx_l$ besitzt^{34, 35}:

$$W(\hat{T}, x_l, s) = \left(\frac{3 \omega^2(\hat{T})}{4 \pi s^3} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{3 \omega^2(\hat{T}) x_l^2}{-4 s^3} \right\}. \quad (4.6)$$

4. Für die Wahrscheinlichkeit $W(\hat{T}, \Theta_l | x_l, s) d\Theta_l$, daß nach einer wahren Weglänge s ein projizierter Winkel zwischen Θ_l und $\Theta_l + d\Theta_l$ auftritt, wenn die transversale Ortsversetzung x_l ist:

$$W(\hat{T}, \Theta_l | x_l, s) = \frac{1}{\sqrt{2 \pi \Delta_\Theta^2(\hat{T}, s)}} \cdot \exp \left\{ -\frac{(\Theta - \Theta(x_l, s))^2}{2 \Delta_\Theta^2(\hat{T}, s)} \right\}, \quad (4.7)$$

³⁴ W. T. SCOTT, Phys. Rev. **76**, 212 [1949].

³⁵ Die Gln. (4.6) und (4.7) gelten für $l=1, 2$: ($x_1=x$; $x_2=y$; $\Theta_1=\Theta_x$; $\Theta_2=\Theta_y$).

wobei $\Theta(x_l, s) = 3x_l/2s$ (4.8a)

und $\Delta_\Theta^2(\hat{T}, s) = \frac{1}{\omega^2(\hat{T})} \cdot \frac{s}{2}$. (4.8b)

5. Für den „Transportkern für Großwinkelstöße“:

$$G_g(T_0, l) = \int dT \Sigma_g(T) f_{k_1}(T_0, T, l) \cdot \exp \left\{ - \int_{s'=0}^l ds' \Sigma_g(\bar{T}(T_0, s')) \right\}. \quad (4.9)$$

Die Näherungsannahmen für die angegebenen Wahrscheinlichkeitsverteilungen

$$f_{k_1}(T_0, T, s), \quad A(\hat{T}, \Delta, s), \quad W(\hat{T}, x_l, s),$$

$$W(\hat{T}, \Theta_l | x_l, s) \quad \text{und} \quad G_g(T_0, l)$$

sind im einzelnen die folgenden: a) Die Energieabhängigkeit der mittleren Stoßzahl pro Längeneinheit $\Sigma(T)$ wird durch die Abhängigkeit von der mittleren Energie ersetzt, die sich auf Grund der Kleinwinkelstöße allein einstellt. Das ist eine gute Näherung, wenn die Schwankungen der Energieverluste um den Mittelwert klein bleiben. Wenn man die Grenzenergie Q_{gr} klein gegen den maximalen Energieverlust wählt und die Lösungen von (3.8) und (3.9) auf kurze Wege l bzw. s beschränkt, ist das sicher erfüllt, weil das Energieschwankungsquadrat annähernd linear mit der Weglänge zunimmt. b) Die Korrelationen zwischen den Energien und den Orten bzw. den Flugrichtungen, die sich nach einem vorgegebenen Vielfachstreuenschritt einstellen, werden folgendermaßen angenähert: Bei der analytischen Lösung der Transportgleichung für die Verteilungen der Orte und Flugrichtungen berücksichtigen wir zwar die mittlere Energieänderung durch Kleinwinkelstöße, vernachlässigen aber zunächst deren Schwankungen. Diese Näherung korrigieren wir im Monte-Carlo-Programm wieder teilweise: Wir bestimmen dort zunächst die Energie am Ende eines Vielfachstreuenschrittes aus der entsprechenden Verteilung. In den Verteilungen für Orte und Flugrichtungen setzen wir für die mittlere Energie den Mittelwert aus den Energien am Anfang und Ende des betreffenden Vielfachstreuenschrittes ein. c) Für die mit den obigen Annahmen verträglichen

Werte: $Q_{gr} = T/10$, $\Theta_{gr} = 15^\circ$ und s gleich 10 mg pro cm^2 bei Energien zwischen $2 m c^2$ und $m c^2$ und gleich 5 mg/cm^2 bei kleineren Energien haben wir nur die Korrelationen der transversalen Ortsversetzung und einer damit verknüpften Winkelablenkung mit der wahren Weglänge s zu berücksichtigen und nicht gleichzeitig auch die Korrelation dieser wahren Weglänge mit der Eindringtiefe. Das Verhältnis der mittleren transversalen Ortsversetzung zur wahren Weglänge ist nämlich eine lineare Funktion des mittleren (kleinen) Ablenkwinkels, das Verhältnis der Wegverlängerung zur mittleren Eindringtiefe hängt dagegen quadratisch vom mittleren Ablenkinkel ab.

d) Die Beschränkung auf die FOKKER-PLANCKSche Näherung^{36, 37} bei der Integration der Transportgleichung führt auf GAUSS-Funktionen für Energie-, Winkel- und Ortsverteilungen. Die unter c) genannten Werte Q_{gr} , Θ_{gr} und s ergeben auch hier brauchbare Resultate³⁸. In den seltenen Fällen, in denen die Schrittweite s infolge dicht aufeinanderfolgender Großwinkelstöße sehr klein ist und die Annäherung durch GAUSS-Funktionen eigentlich versagt, ist die Halbwertsbreite der Verteilungen so gering, daß die genauere Form der auslaufenden Flanken von untergeordneter Bedeutung ist. Etwas kritischer ist dagegen die Tatsache, daß bei gleicher Schrittänge s die durch die FOKKER-PLANCKSche Näherung geforderte Bedingung mit dem Wert $\Theta_{gr} = 15^\circ$ stets besser zu erfüllen ist als mit $Q_{gr} = T/10$. Für eine gleiche Güte von Energie- und Winkelverteilung wäre stets ein größerer wahrer Weg erforderlich, was aber die Güte aller sonstigen Näherungen verschlechtern würde. Der Grund dafür besteht darin, daß die Energieverteilung auch bei Kleinwinkelstößen – besonders im unteren verwendeten Energiebereich zwischen den Werten 0,5 und 0,1 MeV – einen asymmetrischen Ausläufer gegen große Energieverluste hin besitzt. Eine Verbesserung könnte man hier erzielen, wenn man die Entwicklung der Energieverteilung unter dem Stoßintegral nicht nach Gliedern 2. Ordnung abbricht, sondern höhere Terme berücksichtigt³⁹. e) Schließlich sind alle Wahrscheinlichkeits-Dichten für das unendlich ausgedehnte Medium

³⁶ A. D. FOKKER, Ann. Phys., Lpz. **13**, 810 [1914].

³⁷ M. PLANCK, Berl. Ber. **1917**, 324.

³⁸ Man kann zeigen, daß die FOKKER-PLANCKSche Näherung gut ist, wenn die Schwankungsquadrat der Energie- und Winkelverteilung größer oder gleich den Werten Q_{gr}^2 bzw. Θ_{gr}^2 sind. Da die Schwankungsquadrat andererseits aber proportional der wahren Weglänge s sind, sollte s eine (energieabhängige) untere Grenze nicht unterschreiten.

³⁹ Bei der Vorbereitung der jetzigen Version des Programms hatten wir auf diese Korrektur wegen der rechnerischen Vereinfachung verzichtet, die eine häufige Ausnutzung der gleichen GAUSS-Verteilung für verschiedene stochastische Variable mit sich bringt.

berechnet. Das führt bei räumlich begrenzten Streu- medien grundsätzlich an allen Orten auf zu hohe Werte der Wahrscheinlichkeitsfunktionen, da auch die Teilchen mitgezählt werden, die durch geometrische Begrenzung tatsächlich verlorengehen. Der tatsächliche Einfluß ist aber nicht gravierend. Bei genügend kleinen Vielfachstreuerschritten bleibt nämlich wegen der allein auftretenden, stark vorwärts gerichteten Kleinwinkelstöße die mittlere Ablenkung klein. Quantitativ kann man die Einflüsse von Berandungen nach einer von ØVERAS⁴⁰ entwickelten Methode abschätzen.

Wegen der durch planparallele Platten bedingten Symmetrie kann man den Zustand S eines Elektrons auf seinem Zufallsweg durch vier Größen kennzeichnen (Abb. 2):

$$S = (s, T, z, \cos \Theta), \quad (4.10)$$

s : wahre Weglänge; T : kinetische Energie; z : Abstand von der Quellebene; $\cos \Theta$: Richtungskosinus des Geschwindigkeitsvektors mit der z -Achse.

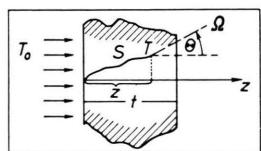


Abb. 2. Durchgang von Elektronen der Energie T_0 durch eine planparallele Platte der Dicke t .

Den Zustand eines Elektrons unmittelbar nach dem n -ten Vielfachstreuerschritt eines gegebenen Zufallsweges wollen wir mit $S_{n,m}$ ($n=0, 1, 2, \dots$; $m=1, 2, 3, \dots$) bezeichnen. Der Index n zählt die Vielfachstreuerschritte, der Index m die „Zweige“ des Zufallsweges, die durch δ -Elektronen bedingt sind ($m=1$ bezeichnet das Quellelektron, $m=2$ das erste δ -Elektron, $m=3$ das zweite usw.). Der Zufallsweg eines Quellelektrons mit seinen möglichen Verzweigungen sei z. B. durch den folgenden Satz von S_{n,m_k, m_k} -Werten gegeben (vergleiche auch Abb. 3):

$$\begin{aligned} & S_{0,1} S_{1,1} S_{2,1} \dots S_{5,1} \dots S_{n,1} \dots S_{N,1} \\ & S_{5,2} \dots S_{n,2} \dots S_{N,2} \\ & \dots \quad \dots \\ & \dots S_{n_{m_k, m_k}} \dots \\ & S_{6, M_k} \dots S_{N_{M_k, M_k}}. \end{aligned}$$

⁴⁰ H. ØVERAS, CERN Report 60-18, Genève 1960.

⁴¹ Um eine stochastische Variable x zu erhalten, die eine Verteilungsdichte $f(x)$ besitzt, genügt im Prinzip ein einziger Satz von Zufallszahlen $\{\xi\}$, die im Intervall $(0, 1)$ gleich verteilt sind. Durch die Gleichung $\xi = \int_{-\infty}^x f(y) dy$ wird

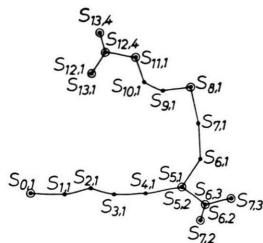


Abb. 3. Beispiel für den Zufallsweg eines Elektrons mit möglichen Verzweigungen durch δ -Elektronen.

Jeder Term: $S_{n_{m_k, m_k}}$ — außer $S_{0,1}$ — hängt stochastisch nur von dem unmittelbar vorhergehenden: $S_{n_{m_k}-1, m_k}$ ab (MARKOFF-Prozeß). Eine Verzweigung der Zufallsweg tritt immer dann auf, wenn die an ein Sekundärelektron übertragene Energie Q und die kinetische Energie T des Primärelektrons nach dem Stoß größer als eine untere Schranke T_{gr} ($=0,2 m c^2$) sind. Der Zufallsweg oder ein Zweig davon wird abgebrochen, wenn die Energie des zugehörigen Elektrons diese untere Grenze T_{gr} unterschreitet, das Elektron aus der Folie austritt ($z \geq t$), oder reflektiert wird ($z \leq 0$).

Um einen Zufallsweg zu erzeugen, muß man von Vielfachstreuerschritt zu Vielfachstreuerschritt fortfahren, indem man $(s_{n+1}, T_{n+1}, z_{n+1}, \cos \Theta_{n+1})$ nach der Monte-Carlo-Methode aus $(s_n, T_n, z_n, \cos \Theta_n)$ rekursiv durch die hierfür bereitgestellten Verteilungen berechnet⁴¹. Die Gültigkeit dieser näherungsweise berechneten Verteilungen hängt dabei jeweils von T_n und s_{n+1} ab. Wir wählen daher:

$$s_{n+1} = \begin{cases} 10^{-2} \text{ g/cm}^2, & \text{für } 1,0 < T_n \leq 2,0, \\ 5 \cdot 10^{-3} \text{ g/cm}^2, & \text{für } 0,2 < T_n \leq 1,0, \end{cases} \quad (4.11)$$

falls auf dem durch (4.11) definierten Bahnabschnitt kein Großwinkelstoß liegt. Sonst ist s_{n+1} einfach der wahre Weg bis zum nächsten Großwinkelstoß. Ferner hat man zu beachten, daß sich die Ortskoordinate z'_{n+1} und der Richtungskosinus $\cos \Theta'_{n+1}$ auf ein Koordinatensystem beziehen, das durch die Flugrichtung $\cos \Theta_n$ am Ende des Bahnsegmentes s_n orientiert wird. Man muß daher nach jedem durchlaufenen Vielfachstreuerschritt eine Koordinatentransformation auf das ursprüngliche Bezugssystem mit $(z_{n+1}, \cos \Theta_{n+1})$ durchführen. Die zu dieser Transformation

$$z_{n+1} = z_n - \sqrt{1 - \cos^2 \Theta_n} \cdot x'_{n+1} + \cos \Theta_n \cdot z'_{n+1} \quad (4.12)$$

ebenfalls erforderliche Koordinate x'_{n+1} aus der Verteilung (4.6) muß der Bedingung genügen:

$$|x'_{n+1}| \leq \sqrt{s_{n+1}^2 - z_{n+1}^2}, \quad (4.13)$$

ähnlich wie für die Koordinate y'_{n+1} aus der gleichen Verteilung (4.6) zu fordern ist:

dann z. B. der Zufallszahl ξ die stochastische Variable x zuordnet. Die x erzeugt man als sogenannte Pseudozufallszahlen durch die Maschine selbst (man vergleiche z. B. BERGER und COOPER⁴²).

⁴² M. J. BERGER u. J. W. COOPER, J. Res. Nat. Bur. Stand. 63 A, 101 [1959].

$$|y'_{n+1}| \leq \sqrt{s_{n+1}^2 - z_{n+1}^2 - x_{n+1}^2}. \quad (4.14)$$

Mit $\Theta'_{x_{n+1}}$ und $\Theta'_{y_{n+1}}$ aus der Verteilung (4.7) und den Relationen (Abb. 1)

$$\text{und } \begin{aligned} \tg \Theta'_{n+1} &= \sqrt{\tg \Theta_{x_{n+1}}^2 + \tg \Theta_{y_{n+1}}^2} \\ \tg \Phi'_{n+1} &= \tg \Theta'_{y_{n+1}} / \tg \Theta'_{x_{n+1}} \end{aligned} \quad (4.15)$$

berechnet sich der Richtungskosinus zu

$$\begin{aligned} \cos \Theta_{n+1} &= -\sin \vartheta [(\sqrt{1 - \cos^2 \Theta_n} \cos \Theta'_{n+1} \cos \Phi'_{n+1} + \cos \Theta_n \sin \Theta'_{n+1}) \cos \varphi \\ &\quad - \sqrt{1 - \cos^2 \Theta_n} \sin \Phi'_{n+1} \sin \varphi] + \cos \vartheta (-\sqrt{1 - \cos^2 \Theta_n} \sin \Theta'_{n+1} \cos \Phi'_{n+1} + \cos \Theta_n \cos \Theta'_{n+1}). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Es wird stets zunächst das Quellelektron mit $m_k = 1$ durchgespielt: auftretende „Verzweigungspunkte“ $S_{n_{m_k}, m_k}$ ($m_k > 1$) werden gespeichert. Danach werden, ausgehend von diesen „Verzweigungspunkten“, die einzelnen Zweige nach aufsteigenden Werten m_k durchgespielt.

Speziell für planparallele Platten kann man die erforderliche Rechenzeit dadurch erheblich verkürzen, daß man die gewünschten Berechnungen für verschiedene Dicken gleichzeitig durchführt. Wenn die verschiedenen Folienstärken: $t_1, t_2, t_3, \dots, t_f$ sind (Abb. 4), hat ein

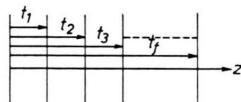


Abb. 4. Zur gleichzeitigen Berechnung des Durchganges von Elektronen durch Folien der Stärke: $t_1, t_2, t_3, \dots, t_f$.

Elektron die erste Folie durchlaufen, sobald $z \geq t_1$. Anstatt den Zufallsweg dieses Elektrons abzubrechen, registriert man diesen ersten Durchgang und fährt nun für den zweiten fort, solange bis $z \geq t_2$. Man muß darauf achten, daß jedes Elektron jede Folie nur einmal durchläuft; sobald $z \geq t_i$, sind die Berechnungen für alle zur i -ten Folie gehörenden Größen des betrachteten Elektrons zu beenden.

5. Berechnungen für den Durchgang von Elektronen von $2 m c^2$ durch Aluminium auf der IBM-7090, Diskussion und Vergleich mit dem Experiment

Um Ergebnisse unserer Methode mit vorliegenden Experimenten vergleichen zu können und um Anhaltspunkte für erforderliche Rechenzeiten zu gewinnen, haben wir ein Fortran-Programm für die IBM-7090 mit 32768 Speicherplätzen geschrieben, das zur Berechnung des Durchganges von Elektronen von $2 m c^2$ durch Aluminiumfolien diente⁴³. Unsere Ergebnisse stellen daher nur einen kleinen Ausschnitt der mit dieser Methode möglichen Berechnungen dar.

Das gesamte Programm einschließlich Ein- und Ausgabe benötigt 14 959 Speicherplätze.

$$\begin{aligned} \cos \Theta_{n+1} &= -\sqrt{1 - \cos^2 \Theta_n} \cos \Phi'_{n+1} \sin \Theta'_{n+1} \\ &\quad + \cos \Theta_n \cos \Theta'_{n+1}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Am Ende eines solchen Bahnelementes, an dem auch noch ein Großwinkelstoß liegt, ist wegen der dadurch bedingten Winkeländerung (ϑ, φ) eine zusätzliche Drehung des Koordinatensystems notwendig und an die Stelle von (4.16) tritt:

5.1 Halbunendlich ausgedehntes Medium

Für eine Einfallsenergie $T_0 = 2 m c^2$ (1,02 MeV) haben wir 1500 Elektronenschicksale durchgespielt, die senkrecht auf einen halbunendlich ausgedehnten Aluminium-Block auffallen. Dosisverteilung, Energie- und Teilchenzahlreflexion wurden bestimmt. Die Rechenzeit betrug 31 min.

i) Monte-Carlo-Berechnungen

Dosisverteilung: Die von uns errechnete, im Mittel pro Elektron und Längeneinheit absorbierte Energie [$m c^2 / (g \cdot cm^{-2})$] haben wir in Abb. 5 (aus-

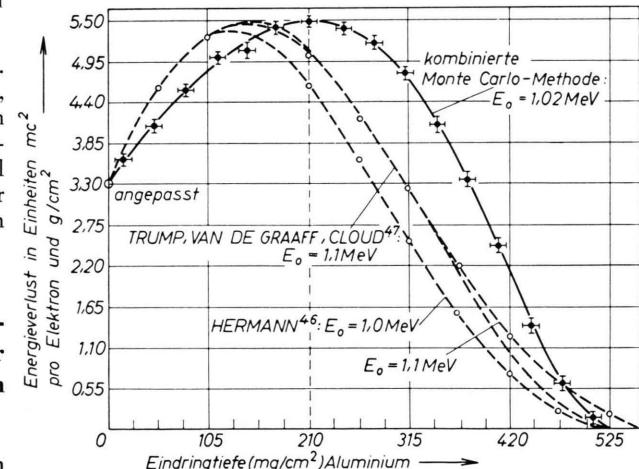


Abb. 5. Dosisverteilungen von Elektronen der Einfallsenergie E_0 , die senkrecht auf ein halbunendliches Medium auffallen. Für die Monte-Carlo-Berechnungen wurden 1500 Elektronenschicksale durchgespielt. Die Ordinate der experimentell gewonnenen Kurve für $E_0 = 1$ MeV wurde bei der Eindringtiefe Null an die berechnete angepaßt.

⁴³ Die Rechnungen wurden auf den IBM-Rechenanlagen von Euratom C. C. R. in Ispra (Italien) und vom Institut für Plasmaphysik GmbH, München-Garching, durchgeführt. Für die freundliche Aufnahme sei beiden Instituten herzlich gedankt.

gezogene Kurve) als Funktion der Eindringtiefe (mg/cm^2) aufgetragen. Die einer Elektronenenergie von 1,02 MeV entsprechende mittlere wahre Weglänge: $\bar{s}_{\text{max}}(1,02 \text{ MeV}) = 555 \text{ mg}/\text{cm}^2$. Die maximale Dosis liegt bei $210 \pm 10 \text{ mg}/\text{cm}^2$ und beträgt $5,50 \pm 0,08 \text{ m c}^2/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-2})$. Die auf die Eindringtiefe Null extrapolierte Dosis ergibt sich zu $3,35 \pm 0,05 \text{ m c}^2/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-2})$, das sind $61 \pm 0,09\%$ des Maximalwertes. Die maximale Eindringtiefe beträgt $525 \pm 5 \text{ mg}/\text{cm}^2$; die Abszisse zum Maximum der Dosis ($210 \pm 10 \text{ mg}/\text{cm}^2$) beträgt daher $40 \pm 2\%$ der maximalen Eindringtiefe.

Reflektierte Energie und Reflexionskoeffizient: Die in dem halbunendlich ausgedehnten Aluminium-Block insgesamt pro Elektron im Mittel absorbierte Energie erhält man als Integral über die Dosisverteilung (d. h. über den Energieverlust pro Längeneinheit der Abb. 5). Die so berechnete, pro einfallendes Elektron als Funktion der Eindringtiefe absorbierte mittlere Energie erreicht bei der maximalen Abszisse der Abb. 5 ($525 \text{ mg}/\text{cm}^2$) ihren „Sättigungswert“ von $1,94 \text{ m c}^2$; d. h., daß $0,06 \text{ m c}^2$ (bzw. 3% der Einfallsenergie) im Mittel pro Elektron zurückgestreut werden (Tab. 1).

Rückgestreute Elektronenenergie %	
kombinierte Monte-Carlo-Methode ($E \gtrsim 0,1216 \text{ MeV}$)	experimentell ⁴⁴ ($E > 50 \text{ eV}$)
$3 \pm 0,1$ (1500 Schicksale, $E_0 = 1,02 \text{ MeV}$)	$3,6 \pm 0,1$ ($E_0 = 1 \text{ MeV}$)

Tab. 1. Verhältnis der rückgestreuten Elektronenenergie zur Einfallsenergie für Elektronen von 1,02 MeV (bzw. 1 MeV experimentell).

Für das Verhältnis der von dem halbunendlich ausgedehnten Aluminium-Block zurückgestreuten Elektronen einer Energie $T \gtrsim T_{\text{gr}} = 0,2 \text{ m c}^2$ zu den einfallenden Elektronen (Reflexionskoeffizient) ergab sich nach unseren Rechnungen $5,1 \pm 0,4\%$ (Tab. 2).

⁴⁴ K. A. WRIGHT u. J. G. TRUMP, J. Appl. Phys. **33**, 687 [1962].

⁴⁵ In den gemessenen Dosisverteilungen sind die Energieverluste durch Anregungen nur teilweise enthalten. Auf die dadurch bedingte Abweichung der Messungen von den berechneten Kurven kommen wir in der Diskussion zurück.

Reflexionskoeffizient (Al) in %		
kombinierte Monte-Carlo-Methode ($E \gtrsim 0,12 \text{ MeV}$)	experimentell ⁴⁴ ($E > 50 \text{ eV}$)	PERKINS ¹⁴ (Monte-Carlo)
$5,1 \pm 0,4$ (1500 Schicksale, $1,02 \text{ MeV}$)	7 (1 MeV)	5 ± 1 (1 MeV)

Tab. 2. Verhältnis der rückgestreuten Elektronen zu den eingefallenen für eine Einfallsenergie von 1 MeV (bzw. 1,02 MeV in unseren Monte-Carlo-Berechnungen).

ii) Experimentelle Ergebnisse

Dosismessungen: Da für Elektronen von 1 MeV die für die Erzeugung von Bremsstrahlung verbrauchte Energie weniger als 1% der Ionisationsverluste ausmacht, kann man durch Messung der Ionisation mit einer flachen, zur Einfallsebene parallelen Ionisationskammer unmittelbar die Dosis als Funktion der Eindringtiefe gewinnen⁴⁵.

Den Messungen von HERMANN⁴⁶ haben wir die Dosisverteilung als Funktion der Eindringtiefe (mg/cm^2) für Elektronen der Einfallsenergien von 1 und 1,1 MeV entnommen. Wegen eines Fehlers in seiner Absoluteichung mußten wir uns damit begnügen, die gemessenen Kurven bei der Eindringtiefe Null an die berechneten anzupassen (Abb. 5).

Aus Relativmessungen von TRUMP, VAN DE GRAAFF und CLOUD⁴⁷ für die Verteilung der Ionisation als Funktion der Eindringtiefe haben wir die Kurve für 1,1 MeV-Elektronen entnommen und in Abb. 5 (unter der gleichen Anpassung) aufgetragen. TRUMP u. a.⁴⁷ haben das Verhältnis des Stromes an der Ionisationskammer zum Strom der einfallenden Elektronen gemessen. Abgesehen von den Unterschieden in der maximalen Reichweite und der leichten Verschiebung der maximalen Dosis, stimmen die Messungen von HERMANN⁴⁶ und TRUMP u. a.⁴⁷ überein.

Reflektierte Energie und Reflexionskoeffizienten: Für die pro einfallendes Elektron im Mittel rückgestreute Energie wurden für Einfallsenergien zwischen 20 und 680 keV zahlreiche Messungen durchgeführt^{48, 49, 50}, während im Bereich zwischen 1 und

⁴⁶ J. HERMANN, Dipl.-Arbeit, Labor f. Techn. Physik, Techn. Hochschule München 1960.

⁴⁷ J. G. TRUMP, R. I. VAN DE GRAAFF u. R. W. CLOUD, Amer. J. Röntgenology and Rad. **43**, 728 [1940].

⁴⁸ J. O. BRAND, Ann. Phys., Lpz. **26**, 609 [1936].

⁴⁹ H. KULENKAMPFF u. W. SPYRA, Z. Phys. **137**, 416 [1954].

⁵⁰ W. BOTHE, Z. Naturforschg. **4a**, 542 [1949].

3 MeV für monoenergetische Elektronen nur die Experimente von WRIGHT und TRUMP⁴⁴ bekannt sind. Für Elektronen von 1 MeV finden WRIGHT und TRUMP, daß die insgesamt rückgestreute Energie 3,6% der eingefallenen Energie beträgt (Tab. 1). Die Zahl der rückgestreuten Elektronen beträgt nach den gleichen Autoren 7% der eingefallenen Elektronen (Tab. 2). Sie zählen dabei alle rückgestreuten Elektronen, deren Austrittsenergie größer als 50 eV ist. Auch hierfür gibt es zahlreiche Messungen zu den Einfallsenergien zwischen 10 und 340 keV⁵¹⁻⁵⁵, während für monoenergetische Elektronen höherer Energien nur noch die Messungen von FRANK⁵⁶ zwischen 1,7 und 3 MeV bekannt sind.

iii) Diskussion der Ergebnisse

Bei der *Rückstreuung* ist die Übereinstimmung sowohl im Verhältnis der rückgestreuten Elektronenenergie zur eingefallenen Energie (Tab. 1) als auch im Verhältnis der rückgestreuten Elektronen zu den eingefallenen (Tab. 2) als befriedigend zu bezeichnen. In beiden Fällen dürften die von den Autoren⁴⁴ gemessenen, etwas höheren Werte damit zu erklären sein, daß im Experiment alle austretenden Elektronen > 50 eV gezählt werden; in den Rechnungen werden praktisch nur wenige Elektronen erfaßt, die mit einer Energie kleiner als $E_{gr} = 0,126$ MeV austreten. Die von PERKINS¹⁴ durchgeführte Monte-Carlo-Rechnung stimmt mit unserem Wert überein (Tab. 2); er hat allerdings sein Ergebnis nicht weiter kommentiert. Bei der *Dosisverteilung* (Abb. 5) beträgt das Verhältnis der Dosis an der Oberfläche zur maximalen in unseren Rechnungen und den Experimenten^{46, 47} in guter Übereinstimmung etwa $61 \pm 2\%$. Die berechnete maximale Eindringtiefe (525 ± 10 mg/cm²) stimmt mit der von HERMANN gemessenen überein, während zwischen seinen Messungen und denen von TRUMP u. a.⁴⁷ kleine Abweichungen auftreten. Eine Abweichung der Rechnung vom Experiment zeigt sich in der Lage des maximalen Energieverlustes (Abb. 5). Während das berechnete Maximum bei $40 \pm 2\%$ der maximalen Reichweite liegt, beträgt dieser Wert bei TRUMP u. a.⁴⁷ etwa 30 und bei HERMANN⁴⁶ nur etwa 27%. Aus weiteren Experimenten (für Energien ≥ 2 MeV)

schlossen TRUMP, WRIGHT und CLARKE⁵⁷, daß dieses Maximum für schnelle Elektronen weitgehend unabhängig von der Einfallsenergie bei etwa 33% der maximalen Eindringtiefe liegt. Daß mit der Verschiebung des Maximums der Ionisationsdichte in den Experimenten ein steilerer Anstieg der linken Flanke verbunden ist, könnte durch einen größeren als den berechneten Reflexionskoeffizienten bedingt sein. Wir haben deshalb die TRUMPSche Dosisverteilung für 1,1 MeV (Abb. 5) graphisch integriert, wobei wir die Anpassung an der Eindringtiefe Null und die dadurch bedingten Unsicherheiten natürlich berücksichtigen mußten. Die Differenz des so erhaltenen Wertes gegen die Einfallsenergie sollte die rückgestreute Energie ergeben. Sie beträgt $15 \pm 4\%$ der eingefallenen gegenüber dem für 1 MeV gemessenen Wert⁴⁴ von 3,6% und dem von uns berechneten von $3,0 \pm 0,1\%$ (Tab. 1). Während die um 0,1 MeV höhere Energie nach Messungen von WRIGHT und TRUMP⁴⁴ eher einen kleineren Wert (etwa 3,4%) bewirken müßte, liegt der erhaltene Wert trotz aller Unsicherheiten doch deutlich höher. Als Ursache für die Diskrepanz zwischen gemessener und berechneter Energiebilanz dürften nur noch die in den Messungen nur teilweise enthaltenen Energieverluste durch Anregung in Frage kommen. Eine quantitative Untersuchung des Einflusses der Anregungsverluste auf die Dosisverteilung wird deshalb zur Zeit durchgeführt.

5.2 Planparallele Platten

Für dieselbe Einfallsenergie $T_0 = 2$ m c^2 haben wir 7500 Elektronenschicksale durchgespielt, die senkrecht auf planparallele Platten auffallen. Die Rechenzeit betrug bei einer Foliendicke von 420 mg/cm² 1 h 15 min. Die Dosisverteilungen in diesen zwei-seitig begrenzten Folien, die Energieverteilungen nach Durchlaufen der Folien und Transmissionskoeffizienten wurden berechnet.

i) Dosisberechnungen für planparallele Platten

Um den Einfluß von geometrischen Berandungen auf die Dosisverteilung zu untersuchen, berechneten wir die pro Längeneinheit und Elektron in plan-

⁵¹ W. BOTHE, Ann. Phys., Lpz. **6**, 44 [1949].

⁵² B. F. J. SCHONLAND, Proc. Roy. Soc., Lond. **108**, 187 [1924].

⁵³ P. PALLUEL, C. R. Acad. Sci., Paris **224**, 1492 [1947].

⁵⁴ J. G. TRUMP u. R. J. VAN DE GRAAFF, Phys. Rev. **75**, 44 [1949].

⁵⁵ H. KANTER, Ann. Phys., Lpz. **20**, 9 [1957].

⁵⁶ V. H. FRANK, Z. Naturforsch. **14a**, 247 [1959].

⁵⁷ J. G. TRUMP, K. A. WRIGHT u. A. M. CLARKE, J. Appl. Phys. **21**, 345 [1950].

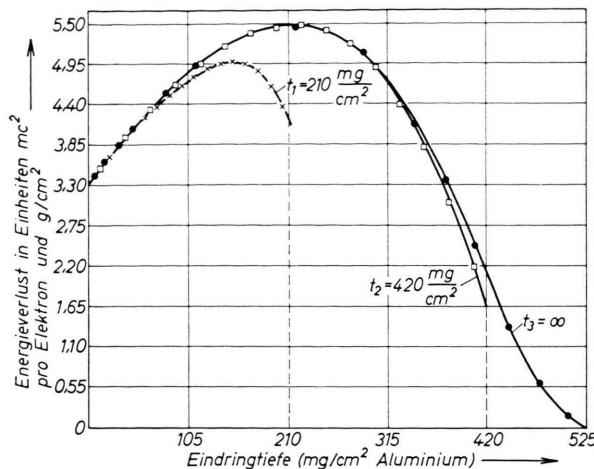


Abb. 6. Dosisverteilungen von Elektronen der Einfallsenergie $E_0 = 1,02 \text{ MeV}$, die senkrecht auf Aluminiumschichten verschiedener Dicken t auftreffen. Die Monte-Carlo-Rechnungen wurden für drei verschiedene Folienstärken durchgeführt: —×— $t_1 = 210 \text{ mg/cm}^2$ (7500 Schicksale), —●— $t_3 = \infty$ (halbunendlich ausgedehntes Medium, 1500 Schicksale), —□— $t_2 = 420 \text{ mg/cm}^2$ (7500 Schicksale).

parallelen Platten der Dicken: $t_1 = 210 \text{ mg/cm}^2$ und $t_2 = 420 \text{ mg/cm}^2$ absorbierte Energie. In Abb. 6 haben wir diese Dosisverteilungen zum Vergleich gegen die für das halbunendlich ausgedehnte Medium aufgetragen. Entsprechende Experimente existieren nicht⁵⁸.

Der Abfall der Dosisverteilungen für endliche Foliedicken gegen die für das halbunendlich ausgedehnte Medium beruht darauf, daß bei endlichen Folien alle Elektronen, welche die rechte Berandung erreichen, nicht mehr in die Folie zurückgestreut werden.

ii) Transmissionskoeffizienten für planparallele Platten

Zur Vervollständigung der obigen Ergebnisse haben wir außerdem den Transmissionskoeffizienten für dieselben Folien: $t_1 = 210 \text{ mg/cm}^2$ und

Folienstärke (mg/cm^2)	Transmission in % ($T \geq 0,126 \text{ MeV}$)
210	$86,4 \pm 0,2$ (7500 Schicksale)
420	$17,0 \pm 0,3$ (7500 Schicksale)

Tab. 3. Transmissionskoeffizienten für Elektronen von $2 m c^2$ in Aluminium.

⁵⁸ Am Labor f. Techn. Phys. der Techn. Hochschule München werden zur Zeit solche Messungen durchgeführt (Dipl.-Arbeiten: REIHL und PARAK).

$t_2 = 420 \text{ mg/cm}^2$ berechnet (Tab. 3). Für monoenergetische Elektronen der betrachteten Energie sind keine Experimente bekannt.

iii) Energieverteilung für planparallele Platten

Die nach unserem Monte-Carlo-Verfahren berechneten Histogramme der Energieverteilungen für zwei Folienstärken $t_1 = 157,5 \text{ mg/cm}^2$ und $t_2 = 210 \text{ mg/cm}^2$ enthält die Abb. 7. Um den wahrscheinlichsten

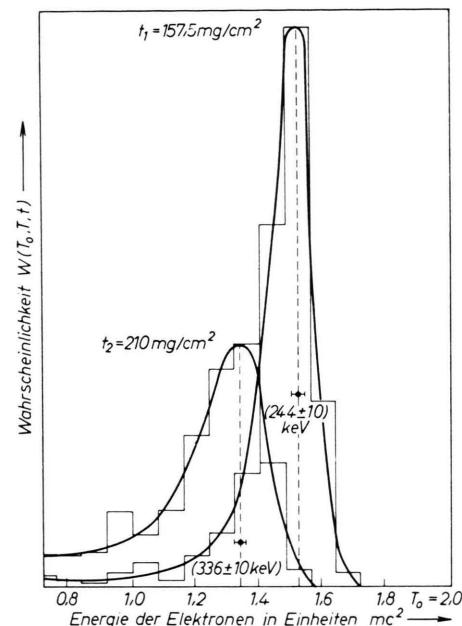


Abb. 7. Energieverteilungen für Elektronen von $2 m c^2$ (1,02 MeV) nach Durchlaufen der planparallelen Platten von $t_1 = 157,5 \text{ mg/cm}^2$ und $t_2 = 210 \text{ mg/cm}^2$. Beide Verteilungen wurden nach der kombinierten Monte-Carlo-Methode berechnet (7500 Schicksale).

Energieverlust und die Halbwertsbreite dieser Histogramme zu bestimmen, haben wir flächengleiche, „glatte“ Kurven in die Histogramme gelegt. Die Ergebnisse sind in Abb. 8 bzw. den Tab. 4 und 5 wiedergegeben. Die Zahlenwerte der Tab. 5 erhält man aus den Histogrammen unserer Rechnung (Abb. 7) durch Faltung mit einer GAUSS-Funktion, deren Halbwertsbreite die experimentelle Anfangsbreite und das Auflösungsvermögen des Spektrometers erfaßt⁵⁹. Die nach der LANDAUSCHEN Theorie⁴ berechneten wahrscheinlichsten Energieverluste lie-

⁵⁹ J. A. McDONELL, M. A. HANSON u. P. R. WILSON, Australian J. Phys. **8**, 98 [1955].

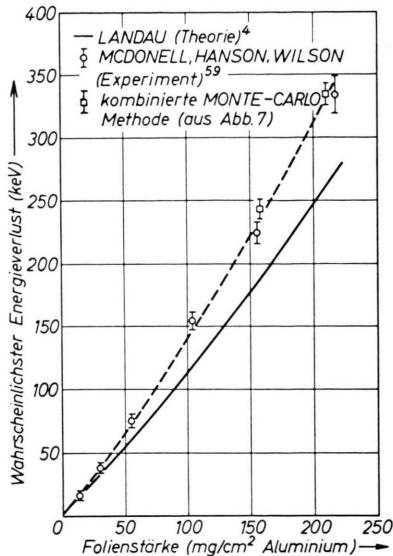


Abb. 8. Wahrscheinlichster Energieverlust von Elektronen der Einfallsenergie E_0 in Aluminium als Funktion der Folienstärke. — für $E_0 = 1$ MeV, ○ für $E_0 = 1$ MeV, □ für $E_0 = 1,02$ MeV.

Folienstärke (mg/cm ²)	Halbwertsbreite (keV)	
	komb. Monte-Carlo-Meth.	LANDAU ⁴ (theoretisch)
157,5	86	52,5
210	123	72,5

Tab. 4. Vergleich der von uns bestimmten Halbwertsbreite der Energieverteilung von Elektronen (Abb. 7) mit der LANDAU-schen Theorie⁴.

Folienstärke (mg/cm ²)	Halbwertsbreite (in Einheiten Volt der Diskriminatorspannung)	
	komb. Monte-Carlo-Meth.	McDONELL u. a. ⁵⁹ (experimentell)
157,5	6,5	6,7 ± 0,5
210	9,2	8,7 ± 1,0

Tab. 5. Vergleich der gemessenen Halbwertsbreiten der Energieverteilung von Elektronen in Aluminium mit den aus der kombinierten Monte-Carlo-Berechnung (Tab. 4) erhaltenen.

gen für größere Foliendicken, ebenso wie die entsprechenden Halbwertsbreiten, zu tief, da dort die Wegverlängerungen durch Vielfachstreuung im COULOMB-Feld ebenso vernachlässigt wird wie der Einfluß der großen Energieverluste. Die Übereinstimmung mit dem Experiment⁵⁹ ist gut.

Abschließend wollen wir noch die Grenzen des Modells durch die von uns benutzten Wirkungsquer-

schnitte erläutern. Die Einfallsenergie der Elektronen sollte eine obere Grenze von etwa 3 MeV und die Ordnungszahl Z des Streumediums einen Wert 30 nicht überschreiten. Andernfalls muß man Bremsstrahlung und Dichteefekte im Streumedium berücksichtigen. Die untere Grenze der Einfallsenergie liegt bei etwa 0,5 MeV, sonst liegt ein zu großer Teil des Elektronenweges in Energiebereichen, in denen der kohärente Streuanteil durch die Gitterstruktur so groß wird, daß die Rechnung mit isolierten Atomen nicht mehr gerechtfertigt ist.

Mein herzlicher Dank gilt Herrn Prof. Dr. H. MAIER-LEIBNITZ und Herrn Privatdozent Dr. T. SPRINGER für die Anregung zu dieser Arbeit und das stets fördernde Interesse. Herrn Direktor Dr. RITTER von EURATOM in Ispra, der es mir ermöglichte, an der dortigen IBM-7090 zu rechnen, und allen Herren von C.E.T.I.S., die mich während meines Aufenthaltes in Italien unterstützten, insbesondere Herrn Dott. L. GUERRI, darf ich herzlich dafür danken.

Anhang

Die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i \hbar \partial_t \Psi(t) = H \Psi(t) \quad (A.1)$$

unseres Modells für die Streuung eines unpolarisierten Elektrons an dem elektromagnetischen Potential eines ruhenden, isolierten Atoms enthält den HAMILTON-Operator

$$H = H_e + H_a + H_w, \quad (A.2)$$

wobei:

$$\left. \begin{aligned} H_e &= m c^2 \beta - i c \beta \gamma \hbar \nabla : && \text{freies DIRAC-Elektron,} \\ H_a &= - \sum_{i=1}^Z \frac{\hbar^2 \nabla i^2}{2 m} - \sum_{i=1}^Z \frac{e^2 Z}{|\mathbf{x}_i|} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} : && \text{freies Atom der Ordnungszahl } Z, \\ H_w(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_Z; \mathbf{x}_e) &= -e(\Phi - \beta \gamma \mathbf{A}) : && \text{elektromagnetische Wechselwirkung.} \end{aligned} \right\} \quad (A.3)$$

In der stationären, spinunabhängigen Näherung ist

$$\left. \begin{aligned} \Phi &= \frac{e Z}{|\mathbf{x}_e|} - \sum_{i=1}^Z \frac{e}{|\mathbf{x}_e - \mathbf{x}_i|}, \\ \mathbf{A} &= - \sum_{i=1}^Z \frac{\mathbf{v}_i}{c} \frac{e}{|\mathbf{x}_e - \mathbf{x}_i|}. \end{aligned} \right\} \quad (A.4)$$

e : Elementarladung; \mathbf{x}_i , \mathbf{v}_i : Orts- und Geschwindigkeitskoordinaten der Atomelektronen; \mathbf{x}_e : Ortskoordinate des einfallenden Elektrons; $\beta = \gamma_4$, γ : DIRAC-Matrizen.

Den vom Elektron an das Atom übertragenen Impuls bezeichnen wir mit

$$\hbar \mathbf{x} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p} \quad (\text{A.5a})$$

und die übertragene Energie mit

$$\varepsilon = E_0 - E. \quad (\text{A.5b})$$

Der Wirkungsquerschnitt für die Streuung eines unpolarisierten Elektrons der Energie E_0 und des Impulses: $\mathbf{p}_0 = \hbar \cdot \mathbf{k}_0$ in einem Zustand beliebiger Spineinstellung der Energie E und des Impulses: $\mathbf{p} = \hbar \cdot \mathbf{k}$ – an einem Atom im Grundzustand – lautet dann in erster Bornscher Näherung¹⁹

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \varepsilon} = \left(\frac{e}{2 \pi c \hbar^2} \right)^2 \left(\frac{k}{k_0} \right) |V(\mathbf{x})|^2 \quad (\text{A.6})$$

$$\cdot \sum_{\mu, \nu=1}^4 \text{Sp} \{ (p^* + m c) \gamma_\mu (p^* + m c) \gamma_\nu \} S_{\mu\nu}(\mathbf{x}, \varepsilon).$$

Dabei benutzten wir die Abkürzungen:

$$S_{\mu\nu}(\mathbf{x}, \varepsilon) = \sum_n T_{n_0, n}^{[\mu]}(\mathbf{x}) T_{n, n_0}^{[\nu]*}(\mathbf{x}) \delta(\varepsilon + W_0 - W_n), \quad (\text{A.7})$$

$$T_{n_0, n}^{[\mu]}(\mathbf{x}) = \delta_{n, n_0} \delta_{4, \mu} \quad (\text{A.8})$$

$$- \frac{1}{Z} \sum_{j=1}^Z \langle n_0 | (\delta_{4, \mu} - \sum_{l=1}^3 \frac{v_l^{(j)}}{c} \delta_{l, \mu}) e^{i \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_j} | n \rangle$$

$$\text{und} \quad p^* = \beta(E/c) - \Upsilon p^*, \quad (\text{A.9})$$

$$V(\mathbf{x}) = \int d^3 \mathbf{x}_e \left(\frac{Z e}{|\mathbf{x}_e|} \right) e^{i \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_e}; \quad (\text{A.10})$$

ε : übertragene Energie; W_0 : Energie des Atoms im Grundzustand $|n_0\rangle$, W_n : im angeregten Zustand $|n\rangle$.

Die Auswertung der Spur ergibt*

$$\text{Sp} \{ p^* + m c \} \gamma_\mu (p^* + m c) \gamma_\nu \} \quad (\text{A.11})$$

$$= \frac{1}{4} \left[\left(m^2 c^2 - \frac{E_0 E}{c^2} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{p} \right) \delta_{\mu\nu} \right. \\ \left. + \sum_{\lambda=1}^4 (p_0^{(\lambda)} p^{(\lambda)} + p^{(\lambda)} p_0^{(\lambda)}) \delta_{\mu\nu} \delta_{\lambda\lambda} \right].$$

$$* \quad p^{(4)} = E/c \quad \text{und} \quad \delta_{\mu\nu} = \begin{cases} +1, & \text{für } \mu = \nu = 4, \\ -1, & \text{für } \mu = \nu = 1, 2, 3. \end{cases}$$