

# Zur Diffusionstheorie der Spinteilchen:

Numerische Berechnung der Relaxationskonstanten für schnelle Elektronen\*

Von H.-D. KUPATT

Institut für theoretische Physik der Universität Mainz

(Z. Naturforschg. **19 a**, 301–314 [1964]; eingegangen am 9. Dezember 1963)

Die Relaxations-Weglängen  $l_0$ ,  $l_{11}$  usw. der WALDMANNschen Diffusionstheorie für Spin-1/2-Teilchen werden numerisch bestimmt für Elektronen der Geschwindigkeiten  $v/c=0,4; 0,5; 0,6; 0,7; 0,8; 0,9$ , die an neutralen Atomen der Ordnungszahlen  $Z=13; 48; 80$  elastisch gestreut werden. Als Streupotential wird das exponentiell abgeschirmte COULOMB-Potential  $V = (-Ze^2/r) \cdot \exp(-\lambda r)$  vorausgesetzt; für den Abschirmparameter wird vorgegeben  $\lambda/\lambda_0=1,00; 1,16; 1,59; 1,80; 1/\lambda_0$  ist die THOMAS-FERMI-Länge der streuenden Atomart. — Der Auswertung zugrunde gelegt wird die 2. BORNSche Näherung des MOTT-Streuoperators für das angeschriebene Atompotential. Wo diese ungenau ist, werden die von SHERMAN vertafelten MOTT-Funktionen der Streuung am reinen COULOMB-Feld herangezogen. Die BORN-Näherung für Streuung am abgeschirmten Feld wird dann nur im Kleinwinkelbereich benutzt.

Auch für Streuung am THOMAS-FERMI-Potential und am HARTREE-Potential ( $Z=80$ ) werden die Relaxations-Weglängen ermittelt.

Das Verhalten eines Strahls von Spinteilchen bei der Ausbreitung in Materie beansprucht sowohl experimentell als auch theoretisch Aufmerksamkeit. Experimentell stellt sich die Aufgabe, die Änderung der Polarisierung der Teilchen bei Transmission eines Spinstrahls durch ein Material zu untersuchen. Theoretisch interessant sind die formale Erweiterung der kinetischen Gastheorie skalarer Teilchen durch Einbeziehung des Spins als Teilchen-Struktureigenschaft sowie der Einfluß der Art des Einzelstreuungsprozesses auf das Transport- und Relaxationsverhalten eines Spingases.

Ausgehend von der BOLTZMANN-Gleichung für Spinteilchen<sup>1</sup> haben vor einiger Zeit einerseits MÜHLSCHLEGEL und KOPPE<sup>2</sup> und andererseits WALDMANN<sup>3</sup> die Ausbreitung eines Spinstrahles studiert. MÜHLSCHLEGEL und KOPPE behandelten die Vielfachstreuung polarisierter Elektronen in einer dünnen Folie und beschränkten sich auf die Kleinwinkel-näherung: Ein auffallender Parallelstrahl verläßt die Folie nur schwach divergent. Den entgegengesetzten Grenzfall, die Ausbreitung eines — dort fast isotropen — Spinstrahls in einer dicken Folie, hat WALDMANN untersucht und für Spin-1/2-Teilchen eine Diffusionstheorie gegeben. WALDMANNs Theorie setzt voraus, daß Spin-1/2-Teilchen an unregelmäßig verteilten, ruhenden, isotropen Zentren elastisch gestreut werden. Unter Entwicklung des exakten kinetischen Verteilungsoperators um das thermische

Gleichgewicht nach irreduziblen Tensoren wird die BOLTZMANN-Gleichung in erster nichttrivialer Näherung in ein System linearer Differentialgleichungen für die das Spingas beschreibenden Dichten und Ströme übergeführt. Die in diesen Diffusions-Relaxationsgleichungen auftretenden Kopplungskonstanten, Relaxationskonstanten genannt, sind durch Parameter des Teilchenstoßes bestimmt. Ziel der folgenden Berechnungen ist, diese Relaxationskonstanten speziell für schnelle Elektronen numerisch anzugeben.

## § 1. Die Relaxationskonstanten

In der von WALDMANN<sup>3</sup> gegebenen Diffusionstheorie für polarisierte Spin-1/2-Teilchen wird das Relaxationsverhalten eines Spingases beherrscht von der Mannigfaltigkeit von Relaxationskonstanten

$$\omega_0, \omega_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3, 4).$$

Die Relaxationskonstanten werden von der Wechselwirkung der Spinteilchen bestimmt. Sie sind Funktionen des Streuoperators  $a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s})$ , der das Verhalten eines gestreuten Teilchens asymptotisch beschreibt:

$$\psi = \exp\{i \mathbf{k} \mathbf{r} \mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'\} \chi + a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s}) \chi \frac{e^{i \mathbf{k} \mathbf{r}}}{k r}. \quad (1.1)$$

$\psi$  ist die Gesamtwelle eines im Ursprung elastisch gestreuten Teilchens am Orte  $\mathbf{r}$ ,  $\chi$  die  $(2s+1)$ -komponentige Spinfunktion,  $\mathbf{e}, \mathbf{e}'$  sind die Flugrichtungen.

\* Gekürzter Teil einer Dissertation, Mainz 1963.

<sup>1</sup> L. WALDMANN, Z. Naturforschg. **12 a**, 660 [1957]; **13 a**, 609 [1958]. — R. F. SNIDER, J. Chem. Phys. **32**, 1051 [1960].

<sup>2</sup> B. MÜHLSCHLEGEL u. H. KOPPE, Z. Phys. **150**, 474 [1958].

<sup>3</sup> L. WALDMANN, a) Nuovo Cim. Ser. X, **14**, 898 [1959]; b) Z. Naturforschg. **15 a**, 19 [1960].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition “no derivative works”). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

gen vor und nach dem Stoß,  $\mathbf{s}$  ist der Spinoperator und  $k$  die Wellenzahl des Teilchens.

Bei spiegel- und zeitumkehrinvarianter Wechselwirkung bestehen für die Relaxationskonstanten die Relationen

$$\omega_{ij} = 0 \quad \text{für } i = 1, 2; j = 3, 4 \text{ und umgekehrt,}$$

$$\omega_{12} = -\omega_{21}, \quad \omega_{34} = \omega_{43};$$

die Matrix  $(\omega_{ij})$  lautet dann

$$(\omega_{ij}) = \begin{pmatrix} \omega_{11} & \omega_{12} & 0 & 0 \\ -\omega_{12} & \omega_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_{33} & \omega_{34} \\ \omega_{34} & \omega_{44} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

Für die durch Gl. (1.3) beschriebene Wechselwirkung sind die Relaxationskonstanten durch die Integraldarstellungen gegeben:

$$\begin{aligned} \omega_0 &= \omega \cdot 4\pi \int_0^\pi |a_0 \sin \frac{\Theta}{2} - a_1 \cos \frac{\Theta}{2}|^2 \sin \Theta \, d\Theta, & \omega_{11} &= \omega \cdot 4\pi \int_0^\pi (|a_0|^2 + |a_1|^2) \sin^2 \frac{\Theta}{2} \sin \Theta \, d\Theta, \\ \omega_{12} &= \omega \cdot \sqrt{2} \pi \int_0^\pi i(a_0 a_1^* - a_0^* a_1) \sin^2 \Theta \, d\Theta, & \omega_{22} &= \frac{1}{2} (\omega_0 + \omega_{11}), \\ \omega_{33} &= \omega \cdot 2\pi \int_0^\pi (|a_1|^2 + |a_0 \sin \Theta - a_1 \cos \Theta|^2) \sin \Theta \, d\Theta, & & \\ \omega_{34} &= \omega \cdot \sqrt{2} \pi \int_0^\pi (|a_1|^2 - |a_0 \sin \Theta - a_1 \cos \Theta|^2) \sin \Theta \, d\Theta, & & \\ \omega_{44} &= \frac{1}{2} \omega_{33}; & & \end{aligned} \quad (1.4)$$

dabei bedeutet

$$\omega = n_s v / k^2, \quad k = p / \hbar.$$

$v$  ist die Geschwindigkeit eines Teilchens vom Impuls  $p$ ,  $\hbar$  die PLANCKSche Konstante,  $n_s$  bezeichnet die Konzentration der unregelmäßig verteilten Streuzentren.

Die Reziproken der Relaxationskonstanten-Matrizen  $\omega_0, (\omega_{ij})$  definieren Weglängen  $l_0, l_{ij}$ :

$$l_0 = v / \omega_0, \quad (l_{ij}) = v (\omega_{ij})^{-1}. \quad (1.5)$$

Ist  $(\omega_{ij})$  von der in Gl. (1.2) angeschriebenen Gestalt, so sind die Relaxations-Weglängen  $l_{ij}$  gegeben durch

$$\begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} \\ l_{21} & l_{22} \end{pmatrix} = \frac{v}{\omega_{11} \omega_{22} + \omega_{12} \omega_{21}} \begin{pmatrix} \omega_{22} & -\omega_{12} \\ \omega_{12} & \omega_{11} \end{pmatrix}, \quad (1.6)$$

$$\begin{pmatrix} l_{33} & l_{34} \\ l_{43} & l_{44} \end{pmatrix} = \frac{v}{\omega_{33} \omega_{44} - \omega_{34} \omega_{43}} \begin{pmatrix} \omega_{44} & -\omega_{34} \\ -\omega_{34} & \omega_{33} \end{pmatrix};$$

nicht aufgeführte  $l_{ij}$  sind Null.

Für schnelle Elektronen, die an ruhenden, neutralen Atomen durch das exponentiell abgeschirmte COULOMB-Potential

$$V(r) = -\frac{Z e^2}{r} \cdot \exp(-\lambda r) \quad (1.7)$$

Für Spin-1/2-Teilchen ist der Streuoperator  $a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s})$  linear im Spinoperator und hat bei spiegelinvarianter Wechselwirkung und Kugelsymmetrie der Streuzentren wegen der Drehinvarianz die allgemeine Form

$$a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s}) = a_0(\Theta) + 2i a_1(\Theta) \mathbf{n} \cdot \mathbf{s},$$

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{e}' \times \mathbf{e}}{\sin \Theta}, \quad a_1(\Theta = 0) = 0; \quad (1.3)$$

dabei ist  $\Theta = \angle(\mathbf{e}, \mathbf{e}')$  der Streuwinkel. Spiegel- und Drehinvarianz dieses Streuoperators garantieren bereits die Relationen, die zu Gl. (1.2) führen.

gestreut werden, sollen im folgenden die Ausdrücke Gln. (1.4) numerisch ausgewertet und die Relaxations-Weglängen  $l_0, l_{ij}$  numerisch angegeben werden. Den Auswertungen zugrunde gelegt wird die 2. BORNSche Näherung des in Gl. (1.3) angeschriebenen MOTTSchen Streuoperators. Wo diese ungenau ist, werden die von SHERMAN<sup>4</sup> vertafelten MOTT-Funktionen der Elektronenstreuung am reinen COULOMB-Feld herangezogen. Die BORN-Näherung für Streuung am abgeschirmten Feld wird dann nur im Kleinwinkelbereich ( $\leq 15^\circ$ ) benutzt.

Auch für Streuung am THOMAS-FERMI-Potential und am HARTREE-Potential ( $Z=80$ ) werden die Relaxations-Weglängen schneller Elektronen berechnet.

## § 2. Der Dirac-Streuoperator 2. Born-Näherung

Die Durchführung der gestellten Aufgabe erfordert zunächst, den in Gl. (1.1) erklärten Streuoperator speziell für die Streuung von relativistischen Elektronen am exponentiell abgeschirmten COULOMB-

<sup>4</sup> N. SHERMAN, Phys. Rev. **103**, 1601 [1956].

Potential, Gl. (1.7), anzugeben. Wertvolle Vorarbeit hierfür hat DALITZ<sup>5</sup> geleistet, der das  $S$ -Matrix-Element, die Übergangsamplitude zwischen zwei ebenen Wellen-Zuständen, für die Streuung von DIRAC-Elektronen an diesem Potential bis zur 2. BORNschen Näherung im FEYNMAN-Formalismus berechnete. Um die Ergebnisse von DALITZ uns nutzbar zu machen, haben wir die  $S$ -Matrix in Relation zu setzen zum Streuoperator der in Gl. (1.1) zugrunde gelegten Ortsdarstellung. Das kann auf verschiedene Weise erreicht werden. Wir wollen hier der Übersichtlichkeit halber so vorgehen, das Streuproblem a priori in Ortsdarstellung zu formulieren. Prinzipiell aufgezeigt, aber nur auf die 1. BORN-Näherung angewandt hat SAUTER<sup>6</sup> das allgemeine Verfahren. Speziell bei Vorgabe des exponentiell abgeschirmten

COULOMB-Potentials, Gl. (1.7), werden wir in 2. BORNscher Näherung auf Integrale stoßen, die DALITZ bereits ausgewertet hat.

Die Streuung eines Elektrons der Energie  $E(>0)$  und Masse  $m$  am Potential  $V(\mathbf{r})$  wird von der DIRAC-Gleichung beschrieben:

$$(\beta E + \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{i} \nabla - m) \Psi = \beta V \Psi. \quad (2.1)$$

$\beta, \gamma_1$  sind — üblich bezeichnet — DIRAC-Matrizen<sup>7</sup>,  $\Psi$  ist der vierkomponentige DIRAC-Spinor; benutzt wurden rationale Einheiten:  $\hbar = c = 1$ . — Gesucht wird diejenige asymptotische Lösung der Gl. (2.1), die als Streuwelle eine auslaufende Kugelwelle enthält:

$$\Psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{k}) \exp\{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\} + T u(\mathbf{k}) \frac{e^{i k r}}{r}. \quad (2.2)$$

Dem formulierten Streuproblem asymptotisch äquivalent ist das Integralgleichungsproblem

$$\Psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{k}) \exp\{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\} + \int d\mathbf{r}' G_+(\mathbf{r}', \mathbf{r}) [\beta E + \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{i} \nabla_{\mathbf{r}'} + m] \beta V(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}'), \quad (2.3)$$

wenn nur  $G_+(\mathbf{r}', \mathbf{r})$  die auslaufende Kugelwellen erzeugende GREENsche Funktion des Differentialoperators  $(\Delta + k^2) = (\Delta + E^2 - m^2)$  ist:

$$G_+(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \frac{e^{i \mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})}}{(k + i\varepsilon)^2 - q^2}, \quad \varepsilon > 0, \text{ reell.} \quad (2.4)$$

Durch sukzessives Einsetzen des Ausdrucks Gl. (2.3) für  $\Psi$  in sich selbst wird  $\Psi$  in die BORNsche Reihe übergeführt. Deren Abbruch in 2. Näherung ergibt

$$T^{(2)} = -2m A_+(\mathbf{k}') 2\pi^2 \left[ \beta v(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d\mathbf{q} \beta v(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \frac{2m A_+(\mathbf{q})}{(k + i\varepsilon)^2 - q^2} \beta v(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \right]; \quad (2.5)$$

dabei ist

$$A_+(\mathbf{k}') = (\beta E - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{k}' + m)/2m \quad (2.6)$$

der Projektionsoperator auf die Zustände positiver Energie des freien Teilchens vom Impuls  $\mathbf{k}'$ , und es bezeichnet

$$v(\mathbf{a}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int V(\mathbf{r}) \exp\{-i \mathbf{a} \cdot \mathbf{r}\} d\mathbf{r} \quad (2.7)$$

die FOURIER-Transformierte des Wechselwirkungspotentials.

Anmerkung: Der Kunstgriff in der Herleitung von Gl. (2.5) besteht in der Beibehaltung der Integraldarstellung Gl. (2.4) für die GREENsche Funktion — sofern diese nicht den Beobachtungspunkt  $\mathbf{r}$  enthält und asymptotisch zu nähern ist —, in der Darstellung des Wechselwirkungspotentials durch ein FOURIER-Integral und in der Ausnutzung der bekannten Integraldarstellung der DIRACschen  $\delta$ -Funktion.

Speziell für das in Gl. (1.7) angeschriebene, exponentiell abgeschirmte COULOMB-Potential ist

$$T^{(2)} = m A_+(\mathbf{k}') \left[ \beta \left( \frac{2Ze^2}{\lambda^2 + (\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2} - (Ze^2)^2 E \frac{I+J}{\pi^2} \right) - (Ze^2)^2 m \frac{I-J}{\pi^2} \right]; \quad (2.8)$$

dabei bedeutet

$$I = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d\mathbf{q} \frac{1}{[\lambda^2 + (\mathbf{k}' - \mathbf{q})^2] [(k + i\varepsilon)^2 - q^2] [\lambda^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{k})^2]},$$

$$\frac{\mathbf{k}' + \mathbf{k}}{2} J = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d\mathbf{q} \frac{\mathbf{q}}{[\lambda^2 + (\mathbf{k}' - \mathbf{q})^2] [(k + i\varepsilon)^2 - q^2] [\lambda^2 + (\mathbf{k} - \mathbf{q})^2]}.$$

<sup>5</sup> R. H. DALITZ, Proc. Roy. Soc., Lond. A **206**, 509 [1951].

<sup>6</sup> F. SAUTER, Z. Phys. **86**, 818 [1933].

<sup>7</sup> Siehe z. B. S. S. SCHWEBER, An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory, Row u. Peterson Verlag, Evanston (Ill.) 1961, Kap. 4.

Die von DALITZ<sup>5</sup> in der Näherung  $\lambda^2 \ll k^2$  erhaltenen Lösungen dieser Integrale lauten

$$I = \frac{-\pi^2}{k \sin \Theta/2 \sqrt{\lambda^4 + 4k^2(\lambda^2 + k^2 \sin^2 \Theta/2)}} \left\{ \arctg \frac{k \lambda \sin \Theta/2}{\sqrt{\lambda^4 + 4k^2(\lambda^2 + k^2 \sin^2 \Theta/2)}} + \frac{i}{2} \ln \frac{\sqrt{\lambda^4 + 4k^2(\lambda^2 + k^2 \sin^2 \Theta/2)} + 2k^2 \sin \Theta/2}{\sqrt{\lambda^4 + 4k^2(\lambda^2 + k^2 \sin^2 \Theta/2)} - 2k^2 \sin \Theta/2} \right\}, \quad (2.9)$$

$$J = \frac{2k^2 + \lambda^2}{2k^2 \cos^2 \Theta/2} I + \frac{\pi^2}{2k^3 \cos^2 \Theta/2} \left[ \arctg \frac{2k}{\lambda} - \frac{1}{\sin \Theta/2} \arctg \frac{k \sin \Theta/2}{\lambda} \right] - i \frac{\pi^2}{2k^3 \cos^2 \Theta/2} \frac{1}{2} \ln \frac{\lambda^2}{4k^2 + \lambda^2}. \quad (2.10)$$

Wie aus dem DIRAC-Streuoperator  $T$  der eigentlich gesuchte, in Gl. (1.1) eingeführte Streuoperator  $a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s})$  zu gewinnen ist, soll anschließend gesagt werden.

### § 3. Die Mottschen Streufunktionen

Die Streuung von DIRAC-Teilchen kann asymptotisch mittels zweikomponentiger Spinoren vollständig beschrieben werden. Das hat MOTT<sup>8</sup> erkannt, der in seinen frühen Arbeiten über die Streuung relativistischer Elektronen am COULOMB-Potential davon Gebrauch machte. Die asymptotische Wellenfunktion des Streuproblems kann nämlich, wie die BORNSche Reihe lehrt, aus freien-Teilchen-Spinoren aufgebaut werden, und für freie Teilchen sind ja die oberen zu den unteren Komponenten eines DIRAC-Spinors proportional:

$$(\beta E - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{k} - m) u(\mathbf{k}) = 0, \quad (3.1)$$

$$u(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

$$\begin{pmatrix} u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = - \frac{\boldsymbol{\sigma}^P \cdot \mathbf{k}}{m + E} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix},$$

$u_1, u_2$  sind die willkürlichen „großen“,  $u_3, u_4$  die dann bestimmten „kleinen“ Komponenten des DIRAC-Spinors  $u(\mathbf{k})$  von positiver Energie,  $\boldsymbol{\sigma}^P$  bezeichnet den Vektor der PAULI-Matrizen, die den Rang 2 haben. — Gesucht ist der Streuoperator der MOTT-Darstellung.

Einen eleganten Weg für die Transformation eines DIRAC-Streuoperators  $T$  in die MOTT-Darstellung haben MÜHLSCHLEGEL und KOPPE<sup>2</sup> gegeben. Gefragt ist ein Operator  $A$ , der die Beziehung erfüllt:

$$\frac{1+\beta}{2} T u(\mathbf{k}) = A \frac{1+\beta}{2} u(\mathbf{k}). \quad (3.3)$$

$(1+\beta)/2$  ist der Projektionsoperator auf die großen Komponenten von  $u(\mathbf{k})$ :

$$\frac{1+\beta}{2} u(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

$A$  ist eine Matrix vom Rang 4. Sie kann geschrieben werden:

$$A = \frac{2m}{E+m} \frac{1+\beta}{2} A_+(\mathbf{k}') T A_+(\mathbf{k}) \frac{1+\beta}{2}. \quad (3.5)$$

Die Transposition des auf große Komponenten projizierten DIRAC-Spinors der Streuwelle, Gl. (3.3), in die isomorphe zweikomponentige MOTT-Darstellung besteht darin, daß  $\chi$  an Stelle von  $\frac{1}{2}(1+\beta)u$  geschrieben und in  $A$  nach Ausführung aller Multiplikationen  $\beta$  durch 1 und  $\boldsymbol{\sigma}$  durch den Vektor  $\boldsymbol{\sigma}^P$  der PAULI-Matrizen ersetzt wird. Der so erhaltene Streuoperator  $A_M$  der MOTT-Darstellung ist die linke obere Unterdeterminante vom Rang 2 der in Gl. (3.3) eingeführten Matrix  $A$  und als solche eindeutig bestimmt.

Für den DIRAC-Streuoperator

$$T = A_+(\mathbf{k}') [\beta C + 1 D], \quad (C, D = \text{Skalare}), \quad (3.6)$$

ist der MOTT-Streuoperator von der Form

$$A_M(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \boldsymbol{\sigma}^P) = \frac{a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \boldsymbol{\sigma}^P)}{k} = f + i g \left( \frac{\mathbf{e}' \times \mathbf{e}}{\sin \Theta} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}^P.$$

$f(C, D, \Theta)$  und  $g(C, D, \Theta)$  sind die MOTTschen Streufunktionen.

Die Elektronenstreuung am exponentiell abgeschirmten COULOMB-Potential, Gl. (1.7), wird in 2. BORNScher Näherung vom DIRAC-Streuoperator  $T^{(2)}$  beschrieben, der in Gl. (2.8) gegeben ist. Dieser Operator ist von der Gestalt Gl. (3.6). Die zugehörigen MOTTschen Streufunktionen lauten explizit

<sup>8</sup> N. F. MOTT, Proc. Roy. Soc., Lond. A **124**, 425 [1929]; A **135**, 429 [1932].



$$\begin{aligned}
f^{(2)} &= \frac{1}{2} (E+m) \left( (Z e^2) \frac{2}{\lambda^2 + (2k \sin \Theta/2)^2} - (Z e^2)^2 \left[ (E+m) \frac{1}{\pi^2} I + (E-m) \frac{1}{\pi^2} J \right] \right) \\
&+ \frac{1}{2} (E-m) \left( (Z e^2) \frac{2}{\lambda^2 + (2k \sin \Theta/2)^2} - (Z e^2)^2 \left[ (E-m) \frac{1}{\pi^2} I + (E+m) \frac{1}{\pi^2} J \right] \right) \cos \Theta, \\
g^{(2)} &= \frac{1}{2} (E-m) \left( (Z e^2) \frac{2}{\lambda^2 + (2k \sin \Theta/2)^2} - (Z e^2)^2 \left[ (E-m) \frac{1}{\pi^2} I + (E+m) \frac{1}{\pi^2} J \right] \right) \sin \Theta.
\end{aligned} \quad (3.8)$$

$I$  und  $J$  sind durch Gln. (2.9), (2.10) erklärt. — Die MOTTschen Streufunktionen sind hier in rationalen Einheiten geschrieben:  $\hbar = c = 1$ . Mittels der Übersetzung

$$\begin{array}{cccc}
E & m & V & (Z e^2) \\
\frac{E}{\hbar \cdot c} & \frac{m \cdot c}{\hbar} & \frac{V}{\hbar \cdot c} & \left( \frac{Z e^2}{\hbar \cdot c} \right)
\end{array}$$

können sie in üblichen Einheiten dargestellt werden.

Mit den Gln. (3.8), für die alle Abkürzungen erklärt sind, ist, wie Gl. (3.7) lehrt, der in Gl. (1.1) eingeführte Streuoperator  $a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s})$  für Elektronenstreuung am exponentiell abgeschirmten COULOMB-Potential, Gl. (1.7), in 2. BORNScher Näherung als elementare Funktion bekannt. Die Integraldarstellungen Gln. (1.4) für die Relaxationskonstanten  $\omega_0$ ,  $\omega_{ij}$  können damit speziell formuliert werden. Die in diesen Gleichungen auftretenden Bilinearformen aus  $f^{(2)}$  und  $g^{(2)}$  sind, weil  $f^{(2)}$  und  $g^{(2)}$  nur die  $Z^2$ -Näherung der exakten Streufunktionen geben, konsistent in  $Z^3$ -Näherung aufzuschreiben<sup>9</sup>.

Wir betrachten noch den Grenzfall des reinen COULOMB-Feldes. Für  $\lambda \rightarrow 0$  werden die MOTTschen Streufunktionen der 2. BORNSchen Näherung  $f^{(2)}$ ,  $g^{(2)}$  im Imaginärteil singular, die in Gln. (1.4) enthaltenen Bilinearformen sind jedoch in konsistenter  $Z^3$ -Näherung regulär.

Die mit  $\lambda=0$  durch Gln. (3.8), (2.9), (2.10) dargestellten Streufunktionen 2. BORNScher Näherung für das reine COULOMB-Feld stimmen nicht mit den von TOPTYGIN<sup>10</sup> mitgeteilten und auch nicht mit den von SOKOLOV et al.<sup>11</sup> errechneten, rein reell angeschriebenen Streufunktionen „2. Näherung“ (bis  $Z^2$ ) überein, SOKOLOVs Streufunktionen sind mit den Realteilen der durch die genannten Gleichungen gegebenen Streufunktionen 2. BORN-Näherung identisch. Die von TOPTYGIN behaupteten Ausdrücke für den über die Spinrichtungen des einfallenden Teilchens gemittelten Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/d\Omega$  und für die Polarisationsgröße  $D$  und der von SOKOLOV erhaltene Wirkungsquerschnitt stimmen jedoch mit den aus Gln. (3.8), (2.9), (2.10) in konsistenter

$Z^3$ -Näherung hergeleiteten Darstellungen überein. In üblichen Einheiten bei  $q = Z e^2 / \hbar c$  ist

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f|^2 + |g|^2 = \frac{1}{k^2} \frac{q^2}{4(v/c)^2 \sin^4 \Theta/2} \\
&\cdot \left[ 1 - \left( \frac{v}{c} \right)^2 \sin^2 \frac{\Theta}{2} + q \pi \frac{v}{c} \sin \frac{\Theta}{2} \left( 1 - \sin \frac{\Theta}{2} \right) \right],
\end{aligned} \quad (3.9)$$

$$D = i(f g^* - g f^*) = \frac{q^3}{k^3} \frac{m c}{\hbar} \frac{1}{\sin \Theta} \ln \sin \frac{\Theta}{2}. \quad (3.10)$$

Gl. (3.9) ist zuerst von MCKINLEY und FESHBACH<sup>12</sup>, Gl. (3.10) zuerst von MOTT<sup>8</sup> gegeben worden.

MOTT<sup>8</sup> hat für reines COULOMB-Feld die Streufunktionen  $f$  und  $g$  in der Form geschrieben

$$a_0(\Theta) = k f(\Theta) = -i \gamma' F + G, \quad (3.11)$$

$$a_1(\Theta) = k g(\Theta) = [i \gamma' (1 + \cos \Theta) F + (1 - \cos \Theta) G] \frac{1}{\sin \Theta},$$

$$\gamma' = \frac{Z e^2}{\hbar c} \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{\beta}$$

und für die Funktionen  $F$  und  $G$  Reihendarstellungen mitgeteilt. Diese exakten Reihen hat SHERMAN<sup>4</sup> für spezielle Parametervorgaben numerisch ausgewertet. Von den Ergebnissen SHERMANS werden wir bei der Berechnung der Relaxationskonstanten Gln. (1.4) ebenfalls Gebrauch machen (vgl. § 5).

#### § 4. Numerische Spezifizierung des Wechselwirkungspotentials

Das Wechselwirkungspotential, das wir der Berechnung der Relaxationskonstanten eines Spingases aus Elektronen, die an unregelmäßig verteilten, festen Zentren gestreut werden, zugrunde legen, wollen wir nun numerisch fixieren. Als Streuzentren ziehen wir die neutralen Atome der Elemente Aluminium, Cadmium und Quecksilber in Betracht, geben also für die Kernladungszahl alternativ die Werte vor

$$Z = 13; 48; 80.$$

<sup>9</sup> Wegen „des“ Entwicklungsparameters der BORNSchen Reihe siehe H. MITTER u. P. URBAN, Acta Phys. Austriaca 7, 311 [1953].

<sup>10</sup> I. N. TOPTYGIN, Soviet Phys. — Zh. Eksperim. Teor. Fiz. 36, 340, 488 [1959].

<sup>11</sup> A. A. SOKOLOV, V. M. ARUTYUNYAN u. R. M. MURADYAN, Soviet Phys. — Zh. Eksperim. Teor. Fiz. 36, 412, 594 [1959].

<sup>12</sup> W. A. MCKINLEY u. H. FESHBACH, Phys. Rev. 74, 1759 [1948].

Das Streufeld eines neutralen Atoms soll, wie gesagt, durch das einparametrig exponentiell abgeschirmte COULOMB-Potential dargestellt sein:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \exp(-\lambda r). \quad (4.1)$$

Die Abschirmkonstante  $\lambda$  schreiben wir

$$\lambda = \mu \cdot \lambda_0, \quad \lambda_0 = 4 \left( \frac{2Z}{9\pi^2} \right)^{1/4} \frac{m e^2}{\hbar^2}, \quad (4.2)$$

$\lambda_0$  ist die reziproke THOMAS-FERMI-Längeneinheit<sup>13</sup>. Den Parameter  $\mu$  verfügen wir alternativ zu

$$\mu = 1,00; 1,16; 1,59; 1,80.$$

Warum gerade diese Werte gewählt wurden, bleibt zu sagen. — Für  $\mu = 1,00$  ist die Abschirmkonstante  $\lambda$  gleich der reziproken THOMAS-FERMI-Längeneinheit, für  $\mu = 1,59$  sind die Steigungen der Abschirmfunktionen des modifizierten COULOMB-Potentials Gl. (4.1) und des THOMAS-FERMI-Potentials<sup>13</sup>,

$$V_{TF}(r) = -\frac{Ze^2}{r} \varphi(\lambda_0 r), \quad (4.3)$$

für  $r \rightarrow 0$  gleich groß. Tiefere Bedeutung kommt diesen beiden Wertevorgaben nicht zu. — Der Wert  $\mu = 1,80$  wurde von NIGAM, SUNDARESAN und WU<sup>14</sup> bei der in 2. BORN-Näherung vorgenommenen Analyse der Strahlverbreiterung durch Mehrfachstreuung beim Durchgang von 15,6-MeV-Elektronen durch dünne Folien aus Gold und Beryllium als bester Parameterfit gefunden. Nach SUNDARESAN<sup>15</sup> sollte dieser  $\mu$ -Wert auch für Elektronengeschwindigkeiten von  $\beta \simeq 0,6$  noch „ziemlich gut“ sein. — Die vielleicht begründetste Vorgabe der Abschirmkonstanten,  $\mu = 1,16$ , resultiert aus Formfaktortabellen; das bedarf einer Erläuterung.

In 1. BORNscher Näherung ist der Streuoperator zur FOURIER-Transformierten  $v(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$  des Streupotentials  $V(\mathbf{r})$  proportional, siehe Gln. (2.5), (2.7). Für Elektronenstreuung am ruhenden, neutralen Atom vom Potential

$$V_F(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{r} + e^2 \int \frac{\varrho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$$

ist

$$v_F(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = -\frac{e^2}{2\pi^2} \cdot \frac{Z - F(\mathbf{k}' - \mathbf{k})}{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2}. \quad (4.4)$$

Die FOURIER-Transformierte  $F(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$  der Elek-

tronendichte  $\varrho(\mathbf{r})$ ,

$$F(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = \int \varrho(\mathbf{r}) \exp\{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}\} d\mathbf{r},$$

wird als Atomformfaktor bezeichnet. — Bei Darstellung des Atompotentials durch das exponentiell abgeschirmte COULOMB-Potential, Gl. (4.1), andererseits wird

$$v(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = -\frac{e^2}{2\pi^2} \frac{Z}{\lambda^2 + (\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2}. \quad (4.5)$$

Eine Justierung des Abschirmparameters  $\lambda$  an der Elektronenverteilung  $\varrho(\mathbf{r})$  des Atoms via Atomformfaktor kann erfolgen, wenn die Ausdrücke Gln. (4.4) und (4.5) miteinander verknüpft werden. Nun liegen in 1. BORN-Näherung für  $\lambda \ll k$  die Maxima der Integranden von  $\omega_0$ ,  $\omega_{11}$ ,  $\omega_{33}$ ,  $\omega_{34}$  alle bei demselben Wert des Arguments  $|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$ ,

$$|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|_{\text{Max}} = (2k \sin \Theta/2)_{\text{Max}} \approx \sqrt{3} \lambda; \quad (4.6)$$

für diesen Wert von  $|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$  wurden die Ausdrücke Gln. (4.4) und (4.5) einander gleichgesetzt. Unter graphischer Interpolation publizierter Formfaktortabellen konnte aus der so erhaltenen Gleichung  $\lambda$  bestimmt werden. Für das neutrale Aluminiumatom wurden dabei die aus der Interpolation bekannter HARTREE-Dichten gewonnenen Formfaktorwerte von PARRY<sup>16</sup> und die bei Zugrundelegung geeigneter Elektronenwellenfunktionen errechneten Werte von TOMIE und STAM<sup>17</sup> herangezogen; für das neutrale Cadmium- und Quecksilberatom fanden die auf der Basis der THOMAS-FERMI-Dirac-Elektronendichte ermittelten Formfaktoren von THOMAS und UMEDA<sup>18</sup> Verwendung. — Die so erhaltenen Werte für den Abschirmparameter schwankten von 1,13 bis 1,17. Als Mittelwert fixierten wir  $\mu = 1,16$ . —

Außer dem durch Gl. (4.1) gegebenen, einparametrig exponentiell abgeschirmten COULOMB-Potential legen wir unseren Berechnungen als Potential des neutralen Atoms noch das THOMAS-FERMI-Potential und das für  $Z = 80$  verfügbare HARTREE-Potential zugrunde, und zwar benutzen wir analytische Approximationen dieser Potentiale durch Exponentialterme.

Die THOMAS-FERMI-Funktion  $\varphi(x)$  hat ROZENTAL<sup>19</sup> wie folgt analytisch angenähert ( $x = \lambda_0 \cdot r$ ):

$$\varphi(x) = 0,255 \cdot e^{-0,246x} + 0,581 \cdot e^{-0,947x} + 0,164 \cdot e^{-4,356x}. \quad (4.7)$$

<sup>13</sup> Siehe z. B. P. GOMBAS, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Springer-Verlag, Wien 1949, § 3.

<sup>14</sup> B. P. NIGAM, M. K. SUNDARESAN u. TA-YOU WU, Phys. Rev. **115**, 491 [1959].

<sup>15</sup> M. K. SUNDARESAN, Phys. Rev. **118**, 1072 [1960].

<sup>16</sup> G. S. PARRY, Act. Cryst. **3**, 593 [1955].

<sup>17</sup> Y. TOMIE u. C. H. STAM, Act. Cryst. **11**, 126 [1958].

<sup>18</sup> L. H. THOMAS u. K. UMEDA, J. Chem. Phys. **26**, 293 [1957].

<sup>19</sup> S. ROZENTAL, Z. Phys. **98**, 742 [1936].

Diese Darstellung soll nach ROZENTAL im Bereich  $0 \leq x \leq 10$  gelten; sie kann aber im FOURIER-Integral des THOMAS-FERMI-Potentials als für alle  $x$ -Werte gültig angesehen werden.

Eine analytische Approximation des HARTREE-Feldes für das neutrale Quecksilberatom hat BYATT<sup>20</sup> vorgeschlagen:

$$V(r) = -\frac{80 e^2}{r} [0,19 \cdot e^{-0,257 x} + 0,56 \cdot e^{-0,779 x} + 0,25 \cdot e^{-3,16 x}]. \quad (4.8)$$

Dieser Ausdruck soll das numerisch bekannte HARTREE-Feld innerhalb desjenigen  $x$ -Bereichs, in dem die eckige Klammer größer als etwa 0,01 ist, bis auf einen Fehler von etwa 5% oder besser wiedergeben.

Weil nur in 1. BORNscher Näherung der Streuoperator linear im Streupotential ist, können wir mit der in § 2 geleisteten Vorarbeit die Streuung an den Potentialen Gl. (4.3), (4.7) und (4.8) nur in 1. BORN-Näherung berechnen. Um den Beitrag 2. BORN-Näherung in Rechnung zu stellen, müßten wir für gemischte Glieder  $v_i(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \cdot v_j(\mathbf{q} - \mathbf{k})$  das Integral in Gl. (2.5) lösen. Der analytische Aufwand, den die Darstellung der Relaxationskonstanten  $\omega_0$ ,  $\omega_{ij}$  in 2. BORN-Näherung bei Vorgabe mehrgliedriger Potentialausdrücke erfordert, wurde von uns als numerisch letztlich nicht recht lohnend angesehen (vgl. § 5).

### § 5. Rechenverfahren zur Bestimmung der Relaxationskonstanten

Die bisherigen Bemühungen zur Erledigung der in § 1 erläuterten Aufgabe bestanden darin, für das spezielle Streupotential Gl. (1.7) den Streuoperator  $a(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \mathbf{s})$  in 2. BORN-Näherung herzuleiten. Nicht für alle in § 4 vorgegebenen Werte  $Z = 13; 48; 80$  der Kernladungszahl der streuenden neutralen Atome ist nun aber der Entwicklungsparameter  $\beta^{-1} \cdot Z/137$  der „ungünstigsten Terme“ der BORNschen Reihe so klein gegenüber 1 (l. c.<sup>9</sup>), daß die 2. BORNsche Näherung die Streuung selbst von schnellen Elektronen bereits hinreichend genau wiederzugeben vermöchte. Wir sind darum gezwungen, uns nicht allein auf diese Näherung zu verlassen. — Nun sind ja nach einem heuristischen Argument<sup>21</sup> merkliche Abweichungen von der reinen COULOMB-Streuung bei dem von uns zugrunde gelegten exponentiell abgeschirm-

ten COULOMB-Potential nur für Streuwinkel zu erwarten, die von der Größenordnung  $\lambda/k$  oder kleiner sind, vgl. auch Gl. (4.6); der Quotient aus Abschirmkonstante und Wellenzahl ist gemäß unseren folgenden Vorgaben  $< 0,1$ . Andererseits ist die BORNsche Näherung für entsprechend kleine Streuwinkel noch eine gute Näherung, wenn sie bei der Beschreibung der Weitwinkelstreuung bereits versagt<sup>21</sup>. Diese Verhältnisse legen es nahe, gegebenenfalls die in BORN-Näherung berechneten Streufunktionen des abgeschirmten COULOMB-Feldes nur im Kleinwinkelbereich zu benutzen und für größere Streuwinkel eine zuverlässige Darstellung der Streufunktionen des reinen COULOMB-Feldes, wie sie die Tabellen von SHERMAN<sup>4</sup> geben, heranzuziehen. Dieses Verfahren gibt selbst für hohe Ordnungszahlen der streuenden Atome eine brauchbare Grundlage zur Berechnung der Relaxationskonstanten. Wir wollen das an Hand einiger Ergebnisse einer numerischen Analyse im einzelnen erläutern und die Methodik der Auswertung der Integraldarstellungen für  $\omega_0$ ,  $\omega_{ij}$  mitteilen.

Wir fixieren zunächst die Elektronengeschwindigkeiten, die wir zugrunde legen wollen, und richten dies so ein, daß bei Beachtung der in § 4 vorgegebenen Werte der Abschirmkonstanten  $\lambda$  der Quotient  $\lambda/k$  durchweg  $< 0,1$  ist. Nur wenn  $\lambda/k$  klein gegenüber 1 ist, die Streuung also bis auf den Kleinwinkelbereich als „Kernstreuung“ apostrophiert werden kann, ist ja eine Darstellung des Atomfeldes durch das exponentiell abgeschirmte COULOMB-Feld vernünftig. Erfolgt die Streuung überwiegend in der Elektronenhülle, wird besser ein Atompotential in Betracht gezogen, das die Feldverhältnisse in der Hülle genauer beschreibt. — Wir verfügen also ( $\beta = v/c$ ):

$$Z = 13: \quad \beta = 0,4; \dots 0,9$$

$$Z = 48: \quad \beta = 0,5; \dots 0,9; \text{ Schrittweite: } (0,1).$$

$$Z = 80: \quad \beta = 0,6; \dots 0,9$$

Die Frage, inwieweit für unsere Vorgaben von Potentialstärke und Teilchengeschwindigkeit die BORNsche Näherung Gültigkeit beanspruchen darf, haben wir in Betrachtung des reinen COULOMB-Feldes durch Vergleich der in BORN-Näherung berechneten Integranden  $I_0$ ,  $I_{ij}$  der Relaxationskonstanten  $\omega_0$ ,  $\omega_{ij}$  und der auf der Basis der SHERMAN-Tabellen bestimmten Integranden geprüft. Aus diesem Test er-

<sup>20</sup> W. J. BYATT, Phys. Rev. **104**, 1298 [1956].

<sup>21</sup> Siehe z. B. N. F. MOTT u. H. S. W. MASSEY, The Theory of Atomic Collisions, Oxford University Press, London 1949, S. 126, 191.

gaben sich Folgerungen über die Verwendbarkeit der BORN-Näherung — auch für abgeschirmtes COULOMB-Feld (vgl. Absatz 1) — die wir der Festsetzung der Rechenverfahren zur Bestimmung der Relaxationskonstanten jeweils zugrunde legten. — Wir wollen uns zunächst nur für die Relaxationskonstanten  $\omega_0$ ,  $\omega_{11}$ ,  $\omega_{33}$ ,  $\omega_{34}$  interessieren.  $\omega_{12}$  bedarf einer gesonderten Betrachtung, die abschließend gegeben werden soll.

### $Z = 13$

Für das reine COULOMB-Feld ist im Geschwindigkeitsbereich  $0,4 \leq \beta \leq 0,9$  und Streuwinkelbereich  $15^\circ \leq \Theta \leq 150^\circ$  die größte relative Abweichung der in 2. BORN-Näherung berechneten Integranden  $I_0$ ,  $I_{11}$ ,  $I_{33}$ ,  $I_{34}$  von den mittels der SHERMAN-Tabellen bestimmten Integrandenwerten kleiner als 3%. Die relativen Abweichungen  $| \Delta I / I |$  wachsen zwar nicht durchweg, jedoch für größere Streuwinkel monoton mit dem Winkel an und sind an der oberen Grenze des genannten Winkelbereichs am größten. Dort aber sind die Integranden, die durchweg mit wachsendem Streuwinkel monoton fallen, am kleinsten!

Für das einparametrig exponentiell abgeschirmte COULOMB-Feld beträgt der Beitrag derjenigen Streuwinkel, bei denen für das COULOMB-Feld  $| \Delta I / I |$  größer als 1% ist, zum Integral über alle Winkel höchstens 25%. — Der Beitrag der 2. BORN-Näherung zum Integral über alle Winkel ist kleiner als 5% des Beitrags der 1. BORN-Näherung, was ebenfalls auf Brauchbarkeit der BORNschen Näherung hindeutet.

Folgerung: Für  $Z = 13$  ist im Geschwindigkeitsbereich  $0,4 \leq \beta \leq 0,9$  die 2. BORNsche Näherung eine hinreichend genaue Approximation zur Berechnung der Relaxationskonstanten  $\omega_0$ ,  $\omega_{11}$ ,  $\omega_{33}$ ,  $\omega_{34}$ . Sie wird im gesamten Winkelbereich  $0 \leq \Theta \leq 180^\circ$  allein zugrunde gelegt.

### $Z = 48$

Für das reine COULOMB-Feld ist im Geschwindigkeitsbereich  $0,5 \leq \beta \leq 0,9$  beim Streuwinkel  $\Theta = 15^\circ$  die größte Abweichung der in 2. BORN-Näherung errechneten Integranden  $I_0$ ,  $I_{11}$ ,  $I_{33}$ ,  $I_{34}$  von den SHERMAN-Werten 2,6%. Die 2. BORN-Näherung gibt speziell unter diesen Bedingungen genauere Aussagen als die erste. Für große Streuwinkel ist die BORN-Näherung ziemlich schlecht,  $| \Delta I / I | \cong 20\%$ .

Für das exponentiell abgeschirmte COULOMB-Feld liegen gemäß unseren Vorgaben des Abschirmparameters und der Teilchengeschwindigkeit die Integrandenmaxima bei Streuwinkeln  $\leq 9^\circ$ .

Folgerung: Für  $Z = 48$  wird zur Berechnung der Relaxationskonstanten  $\omega_0$ ,  $\omega_{11}$ ,  $\omega_{33}$ ,  $\omega_{34}$  die 2. BORNsche Näherung der Streufunktionen des ab-

geschirmten COULOMB-Feldes nur im Streuwinkelbereich  $0 \leq \Theta \leq 15^\circ$  herangezogen. Für Streuwinkel  $\Theta > 15^\circ$ , d. h. ab  $30^\circ$ , werden die im  $15^\circ$ -Raster gegebenen SHERMAN-Tabellen der Streufunktionen des reinen COULOMB-Feldes zugrunde gelegt.

### $Z = 80$

Im Fall des reinen COULOMB-Feldes ist im betrachteten Geschwindigkeitsbereich  $0,6 \leq \beta \leq 0,9$  speziell für den Streuwinkel  $\Theta = 15^\circ$  laut Vergleich mit den SHERMAN-Werten die erste BORNsche Näherung besser als die zweite. Der Beitrag 2. Näherung verbessert die Genauigkeit erst bei größeren Streuwinkeln. Für  $\Theta = 15^\circ$  beträgt die maximale Abweichung der in 1. BORN-Näherung berechneten Integranden  $I_0$ ,  $I_{11}$ ,  $I_{33}$ ,  $I_{34}$  von den Werten nach SHERMAN 10%.

Für das exponentiell abgeschirmte COULOMB-Feld liegen die Maxima der Integranden bei Streuwinkeln  $\leq 9^\circ$ .

Folgerung: Für  $Z = 80$  wird zur Berechnung genannten Relaxationskonstanten die 1. BORNsche Näherung der Streufunktionen des abgeschirmten COULOMB-Feldes im Winkelbereich  $0 \leq \Theta \leq 15^\circ$  zugrunde gelegt. Für Streuwinkel  $> 15^\circ$  finden die SHERMAN-Werte der Streufunktionen des reinen COULOMB-Feldes Verwendung.

Wir erläutern nun das Integrationsverfahren, das wir zur Bestimmung von  $\omega_0$ ,  $\omega_{11}$ ,  $\omega_{33}$ ,  $\omega_{34}$  heranziehen. Die Berechnung der Integrale Gln. (1.4) für die Relaxationskonstanten erfolgt durchweg numerisch. — In BORN-Näherung sind die Integranden analytisch bekannt, siehe Gln. (3.8), so daß die Intervalllänge für numerische Integration nach Belieben vorgegeben werden kann. Die Quadratur wird nach GAUSS mittels der 3-Punkte-Mittelwertformel vorgenommen<sup>22</sup>:

$$\int_{-h}^{+h} f(x) dx = \frac{2h}{18} \left[ 5f\left(-\frac{1}{5}\sqrt{15}h\right) + 8f(0) + 5f\left(+\frac{1}{5}\sqrt{15}h\right) \right].$$

Die Intervalleinteilung des Streuwinkelbereiches ist:  $0(1^\circ/4)2^\circ$ ,  $2^\circ(1^\circ/2)16^\circ$ ,  $16^\circ(1^\circ)60^\circ$ ,  $60^\circ(2^\circ)180^\circ$ ; in Klammern ist jeweils die Intervalllänge  $2h$  im betreffenden Teilbereich angegeben. Die Genauigkeit dieser Integration ist erheblich; der Fehler beeinflußt unsere vierziffrige aufgeschriebenen Ergebnisse bei weitem nicht!

Bei Rückgriff auf die SHERMAN-Werte der Streufunktionen des reinen COULOMB-Feldes sind die Integranden in den Darstellungen der Relaxationskon-

<sup>22</sup> Siehe z. B. F. A. WILLERS, Methoden der praktischen Analysis, de Gruyter Verlag, Berlin 1957, §§ 15, 16.



stanten, siehe Gln. (1.4), (3.11), für Streuwinkel  $\geq 15^\circ$  nur im  $15^\circ$ -Raster bekannt:  $15^\circ(15^\circ)180^\circ$ . Hier werden andere Quadraturformeln verwendet<sup>22</sup>, und zwar in den Bereichen  $15^\circ(15^\circ)105^\circ$ : die WEDDLESsche Regel,

$$\int_a^{a+6h} f(x) dx = \frac{6h}{20} [f(a) + 5f(a+h) + f(a+2h) + 6f(a+3h) + f(a+4h) + 5f(a+5h) + f(a+6h)],$$

$105^\circ(15^\circ)165^\circ$ : die 5-Punkte-COTES-Formel,

$$\int_a^{a+4h} f(x) dx = \frac{4h}{90} [7f(a) + 32f(a+h) + 12f(a+2h) + 32f(a+3h) + 7f(a+4h)],$$

$165^\circ(15^\circ)180^\circ$ : die Trapez-Regel,

$$\int_a^{a+h} f(x) dx = \frac{h}{2} [f(a) + f(a+h)].$$

Diese Kombination von Quadraturformeln wurde in numerischen Prüfungen als für unsere Berechnungen recht günstig herausgefunden. Der relative Fehler in der Bestimmung eines von  $15^\circ$  bis  $180^\circ$  erstreckten Integrals über  $I_0, I_{11}, I_{33}, I_{34}$  kann zu  $\leq 0,4\%$  angegeben werden.

Es verbleibt zu sagen, wie die Relaxationskonstante  $\omega_{12}$ , die durch die MOTT-Polarisation der Teilchen bei der Streuung bestimmt ist, numerisch ermittelt werden soll. Da für ein Zentralpotential  $V(r)$  die FOURIER-Transformierte  $v(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$  reell ist und damit der Streuoperator 1. BORNScher Näherung eine reelle Funktion darstellt, wird die Teilchenpolarisation frühestens von der 2. BORNSchen Näherung ausgesagt<sup>23</sup>. Daß diese Aussage dann bereits eine gute Näherung ist, darf wohl nur unter günstigsten Konvergenzbedingungen der BORN-Reihe erwartet werden. In der Tat erweist sich, wie ein Vergleich der 2. BORN-Näherung und der SHERMAN-Werte der Streufunktionen des reinen COULOMB-Feldes lehrt, die 2. BORN-Näherung bei unseren Vorgaben von  $Z$  und  $\beta$  zur Bestimmung der MOTT-Polarisation nicht als brauchbar. Sie gibt zwar für  $Z=13$  im ganzen Winkelbereich  $0 \leq \Theta \leq 180^\circ$  ein qualitativ richtiges Bild, für  $Z=48$  und  $Z=80$  aber stimmt bei

kleinen Streuwinkeln nicht einmal dieses qualitative Bild (Vorzeichenumkehr!).

Der Berechnung der Relaxationskonstante  $\omega_{12}$  legen wir ausschließlich die von SHERMAN<sup>4</sup> vertafelten Werte der Streufunktionen des reinen COULOMB-Feldes zugrunde. Die Integrandenwerte  $I_{12}(\Theta)$  von  $\omega_{12}$  sind damit für Streuwinkel  $\geq 15^\circ$  im  $15^\circ$ -Raster bekannt. Wir ergänzen sie durch  $I_{12}(\Theta=0)=0$ , was aus  $a_1(\Theta=0)=0$  folgt, vergleiche Anhang. Die erforderliche Quadratur wird unter trigonometrischer Interpolation dieser Integrandenwerte durchgeführt (l. c.<sup>22</sup>, § 24).

Bei unserer Bestimmung von  $\omega_{12}$  wird angenommen, daß die Abschirmung des COULOMB-Feldes praktisch keinen Einfluß auf die MOTT-Polarisation schneller Elektronen hat. Nach TASSIE<sup>24</sup> trifft dies bei hoher Ordnungszahl der Streuer ( $Z=80$ ) für die Teilchengeschwindigkeit  $\beta=0,6$  nur bei großen Streuwinkeln ( $\gtrsim 90^\circ$ ) zu! Als Differenzgröße ist die Polarisationsgröße  $D=i(fg^*-gf^*)$  empfindlicher gegenüber Abschirmeinflüssen als beispielsweise der über die Spinrichtungen gemittelte Wirkungsquerschnitt  $(|f|^2+|g|^2)$ . Der von uns hier vernachlässigte Abschirmeffekt bringt gewisse Unsicherheit in die Berechnung von  $\omega_{12}$ . Als Größenordnungsangaben jedoch sollten die von uns ermittelten Werte von  $\omega_{12}$  richtig sein.

## § 6. Ergebnisse

Für das Spingas von schnellen Elektronen, die an unregelmäßig verteilten, ruhenden, neutralen Atomen elastisch gestreut werden, waren die Relaxationskonstanten numerisch zu bestimmen. Unter den in §§ 4, 5 entwickelten Direktiven haben wir diese Aufgabe durchgeführt. Wir teilen nun die Ergebnisse mit, schreiben aber nicht die Relaxationskonstanten  $\omega_0, \omega_{ij}$  selbst, sondern die Weglängen  $l_0, l_{ij}$  an, die deren Reziproken proportional sind, siehe Gln. (1.5), (1.6). Die Weglängen stehen der Anschauung etwas näher! In der Tabelle 1 sind für drei Ordnungszahlen der Streuer die Relaxations-Weglängen in Abhängigkeit von der Elektronengeschwindigkeit  $\beta=v/c$  und vom Abschirmparameter  $\mu$ , siehe Gln. (4.1), (4.2), aufgeführt. TF in der Spalte für  $\mu$  bezeichnet das THOMAS-FERMI-

<sup>23</sup> Die bei der Streuung aufgenommene mittlere Polarisation eines Teilchens ist

$$S(\Theta) = D/(d\sigma/d\Omega) = i(fg^* - gf^*)/(|f|^2 + |g|^2).$$

<sup>24</sup> L. J. TASSIE, Phys. Rev. **107**, 1452 [1957]; vgl. auch C. B. O. MOHR u. L. J. TASSIE, Proc. Phys. Soc., Lond. A **67**, 711 [1954].

$\beta$	$\mu$	$l_0$	$l_{11}$	$l_{22}$	$l_{12}$	$l_{33}$	$l_{34}$
0,4	1,00	1,06 E-3	9,02 E-4	9,75 E-4	4,4 E-6	6 E-2	8 E-2
	1,16	1,11 E-3	9,42 E-4	1,02 E-3	4,8 E-6	7 E-2	1 E-1
	1,59	1,23 E-3	1,04 E-3	1,13 E-3	5,9 E-6	7 E-2	1 E-1
	1,80	1,28 E-3	1,09 E-3	1,18 E-3	6,4 E-6	8 E-2	1 E-1
	TF	1,11 E-3	9,51 E-4	1,02 E-3	4,9 E-6	7 E-2	1 E-1
0,5	1,00	3,02 E-3	2,30 E-3	2,61 E-3	1,3 E-5	6,5 E-2	9,0 E-2
	1,16	3,14 E-3	2,40 E-3	2,72 E-3	1,4 E-5	7,0 E-2	9,8 E-2
	1,59	3,45 E-3	2,64 E-3	2,99 E-3	1,7 E-5	7,49 E-2	1,05 E-1
	1,80	3,58 E-3	2,75 E-3	3,11 E-3	1,8 E-5	7,78 E-2	1,09 E-1
	TF	3,11 E-3	2,42 E-3	2,72 E-3	1,4 E-5	7,8 E-2	1,1 E-1
0,6	1,00	8,04 E-3	5,29 E-3	6,38 E-3	3,2 E-5	6,72 E-2	9,25 E-2
	1,16	8,35 E-3	5,50 E-3	6,63 E-3	3,4 E-5	7,00 E-2	9,63 E-2
	1,59	9,10 E-3	6,02 E-3	7,25 E-3	4,1 E-5	7,69 E-2	1,06 E-1
	1,80	9,43 E-3	6,25 E-3	7,52 E-3	4,4 E-5	8,05 E-2	1,11 E-1
	TF	8,25 E-3	5,54 E-3	6,63 E-3	3,5 E-5	7,67 E-2	1,06 E-1
0,7	1,00	2,20 E-2	1,16 E-2	1,52 E-2	7,3 E-5	7,38 E-2	9,84 E-2
	1,16	2,28 E-2	1,21 E-2	1,58 E-2	7,9 E-5	7,69 E-2	1,02 E-1
	1,59	2,47 E-2	1,32 E-2	1,72 E-2	9,4 E-5	8,39 E-2	1,12 E-1
	1,80	2,55 E-2	1,36 E-2	1,78 E-2	1,01 E-4	8,72 E-2	1,16 E-1
	TF	2,25 E-2	1,22 E-2	1,58 E-2	8,0 E-5	8,24 E-2	1,10 E-1
0,8	1,00	7,01 E-2	2,65 E-2	3,85 E-2	1,7 E-4	8,87 E-2	1,10 E-1
	1,16	7,25 E-2	2,75 E-2	3,98 E-2	1,8 E-4	9,20 E-2	1,14 E-1
	1,59	7,82 E-2	2,98 E-2	4,31 E-2	2,1 E-4	9,99 E-2	1,24 E-1
	1,80	8,06 E-2	3,08 E-2	4,46 E-2	2,2 E-4	1,03 E-1	1,28 E-1
	TF	7,16 E-2	2,78 E-2	4,00 E-2	1,8 E-4	9,67 E-2	1,21 E-1
0,9	1,00	3,67 E-1	7,40 E-2	1,23 E-1	3,9 E-4	1,35 E-1	1,38 E-1
	1,16	3,79 E-1	7,65 E-2	1,27 E-1	4,2 E-4	1,39 E-1	1,43 E-1
	1,59	4,06 E-1	8,24 E-2	1,37 E-1	4,9 E-4	1,50 E-1	1,54 E-1
	1,80	4,17 E-1	8,49 E-2	1,41 E-1	5,2 E-4	1,55 E-1	1,59 E-1
	TF	3,74 E-1	7,76 E-2	1,29 E-1	4,3 E-4	1,44 E-1	1,49 E-1

Tab. 1 a. Streuung schneller Elektronen an neutralen Aluminiumatomen ( $Z=13$ ). Relaxations-Weglängen  $l_0$ ,  $l_{ij}$  (in cm) in Abhängigkeit von der Elektronengeschwindigkeit  $\beta=v/c$  und vom Abschirmparameter  $\mu$ .

$\beta$	$\mu$	$l_0$	$l_{11}$	$l_{22}$	$l_{12}$	$l_{33}$	$l_{34}$
0,5	1,00	3,12 E-4	2,21 E-4	2,59 E-4	5,4 E-6	3 E-3	5 E-3
	1,16	3,26 E-4	2,31 E-4	2,70 E-4	5,9 E-6	3 E-3	5 E-3
	1,59	3,60 E-4	2,54 E-4	2,98 E-4	7,2 E-6	4 E-3	5 E-3
	1,80	3,75 E-4	2,64 E-4	3,10 E-4	7,7 E-6	4 E-3	5 E-3
0,6	1,00	8,24 E-4	5,00 E-4	6,22 E-4	1,4 E-5	4 E-3	6 E-3
	1,16	8,58 E-4	5,20 E-4	6,48 E-4	1,5 E-5	4,4 E-3	6,0 E-3
	1,59	9,41 E-4	5,69 E-4	7,09 E-4	1,8 E-5	4,7 E-3	6,4 E-3
	1,80	9,78 E-4	5,91 E-4	7,36 E-4	2,0 E-5	4,9 E-3	6,6 E-3
0,7	1,00	2,24 E-3	1,09 E-3	1,46 E-3	3,3 E-5	5,3 E-3	6,9 E-3
	1,16	2,33 E-3	1,13 E-3	1,52 E-3	3,5 E-5	5,5 E-3	7,1 E-3
	1,59	2,53 E-3	1,23 E-3	1,65 E-3	4,2 E-5	5,9 E-3	7,6 E-3
	1,80	2,63 E-3	1,27 E-3	1,71 E-3	4,5 E-5	6,1 E-3	7,9 E-3
0,8	1,00	7,14 E-3	2,45 E-3	3,65 E-3	7,4 E-5	7,0 E-3	8,4 E-3
	1,16	7,40 E-3	2,54 E-3	3,78 E-3	7,9 E-5	7,2 E-3	8,7 E-3
	1,59	8,01 E-3	2,75 E-3	4,09 E-3	9,3 E-5	7,8 E-3	9,3 E-3
	1,80	8,28 E-3	2,84 E-3	4,22 E-3	9,9 E-5	8,0 E-3	9,6 E-3
0,9	1,00	3,70 E-2	7,19 E-3	1,20 E-2	1,9 E-4	1,25 E-2	1,25 E-2
	1,16	3,82 E-2	7,43 E-3	1,25 E-2	2,0 E-4	1,30 E-2	1,30 E-2
	1,59	4,24 E-2	8,02 E-3	1,35 E-2	2,4 E-4	1,40 E-2	1,39 E-2
	1,80	4,37 E-2	8,28 E-3	1,39 E-2	2,5 E-4	1,44 E-2	1,44 E-2

Tab. 1 b. Streuung schneller Elektronen an neutralen Cadmiumatomen ( $Z=48$ ). Sonstiges wie bei Tab. 1 a.

$\beta$	$\mu$	$l_0$	$l_{11}$	$l_{22}$	$l_{12}$	$l_{33}$	$l_{34}$
0,6	1,00	3,53 E-4	2,01 E-4	2,56 E-4	9,0 E-6	1,1 E-3	1,5 E-3
	1,16	3,68 E-4	2,08 E-4	2,66 E-4	9,8 E-6	1,1 E-3	1,5 E-3
	1,59	4,04 E-4	2,26 E-4	2,90 E-4	1,16 E-5	1,2 E-3	1,5 E-3
	1,80	4,20 E-4	2,34 E-4	3,00 E-4	1,24 E-5	1,2 E-3	1,6 E-3
	TF	3,57 E-4	2,03 E-4	2,58 E-4	9,2 E-6	1,1 E-3	1,5 E-3
	H	3,58 E-4	2,04 E-4	2,60 E-4	9,3 E-6	1,1 E-3	1,5 E-3
0,7	1,00	9,42 E-4	4,26 E-4	5,86 E-4	2,2 E-5	1,5 E-3	1,9 E-3
	1,16	9,80 E-4	4,41 E-4	6,08 E-4	2,4 E-5	1,6 E-3	2,0 E-3
	1,59	1,07 E-3	4,76 E-4	6,58 E-4	2,8 E-5	1,6 E-3	2,0 E-3
	1,80	1,11 E-3	4,91 E-4	6,80 E-4	3,0 E-5	1,7 E-3	2,1 E-3
	TF	9,56 E-4	4,31 E-4	5,94 E-4	2,3 E-5	1,5 E-3	1,9 E-3
	H	9,60 E-4	4,33 E-4	5,96 E-4	2,3 E-5	1,6 E-3	1,9 E-3
0,8	1,00	2,95 E-3	9,42 E-4	1,43 E-3	5,1 E-5	2,4 E-3	2,8 E-3
	1,16	3,06 E-3	9,72 E-4	1,47 E-3	5,4 E-5	2,5 E-3	2,9 E-3
	1,59	3,31 E-3	1,04 E-3	1,59 E-3	6,3 E-5	2,6 E-3	3,0 E-3
	1,80	3,43 E-3	1,08 E-3	1,64 E-3	6,7 E-5	2,7 E-3	3,1 E-3
	TF	2,99 E-3	9,55 E-4	1,45 E-3	5,2 E-5	2,4 E-3	2,8 E-3
	H	3,00 E-3	9,58 E-4	1,45 E-3	5,3 E-5	2,4 E-3	2,8 E-3
0,9	1,00	1,52 E-2	2,58 E-3	4,41 E-3	1,2 E-4	4,0 E-3	3,7 E-3
	1,16	1,57 E-2	2,65 E-3	4,54 E-3	1,3 E-4	4,1 E-3	3,8 E-3
	1,59	1,69 E-2	2,83 E-3	4,85 E-3	1,5 E-4	4,4 E-3	4,0 E-3
	1,80	1,74 E-2	2,91 E-3	4,98 E-3	1,6 E-4	4,5 E-3	4,0 E-3
	TF	1,54 E-2	2,62 E-3	4,47 E-3	1,3 E-4	4,1 E-3	3,7 E-3
	H	1,55 E-2	2,62 E-3	4,48 E-3	1,3 E-4	4,1 E-3	3,7 E-3

Tab. 1 c. Streuung schneller Elektronen an neutralen Quecksilberatomen ( $Z=80$ ). Sonstiges wie bei Tab. 1 a.

Feld, siehe Gln. (4.3), (4.7), H das HARTREE-Feld, Gl. (4.8). Die Relaxations-Weglängen sind in Zentimeter gegeben, es bedeutet:

$$x \text{ E-}y = x \cdot 10^{-y} \text{ cm.} \quad (6.1)$$

Zugrunde gelegt wurden, hier konsistent dreiziffrigerundet, die Massendichten  $\rho$ , in  $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ , und relativen Atommassen  $M$ :

$$Z=13, \text{ Al: } \rho = 2,70; \quad M = 27,0;$$

$$Z=48, \text{ Cd: } \rho = 8,65; \quad M = 112;$$

$$Z=80, \text{ Hg: } \rho = 13,5; \quad M = 201.$$

Werte für Fundamentalkonstanten wurden dem Artikel von COHEN und DuMOND<sup>25</sup> entnommen.

Zur Durchführung unserer Rechnungen wurden elektronische Rechenmaschinen herangezogen; zum weitaus größeren Teil wurde die „IBM 704“, zum kleineren Teil die „Siemens 2002“ benutzt.

Bei Durchmusterung der für die Relaxations-Weglängen  $l_0, l_{ij}$  gegebenen Werte-Tabellen fällt zunächst rein formal auf, daß für  $l_{33}, l_{34}$  (und  $l_{12}$ ) die angegebenen Stellenzahlen mitunter kleiner sind als für die übrigen Weglängen. Das hat folgende Gründe. Die Relaxationskonstanten  $\omega_0, \omega_{ij}$  wurden zwar alle mit gleicher Stellenzahl konsistent berechnet, doch

der Nenner von  $l_{33}$  und  $l_{34}$  ist die kleine Differenz zweier großer Zahlen und reduziert somit die Genauigkeit der Kenntnis von  $l_{33}, l_{34}$  gegenüber den Relaxationskonstanten  $\omega_{33}, \omega_{34}$ . Die Stellenzahl von  $l_{12}$  andererseits haben wir aus den in § 5 erwähnten Gründen geringer angeschrieben als die von  $l_0, l_{11}, l_{22}$ . – Natürlich können – allgemein gesagt – bei Verwendung der kombinierten Auswertungsmethode rein formal gesehen unsere Ergebnisse nicht genauer sein als es die SHERMANSchen Streufunktionen sind; SHERMAN<sup>4</sup> gibt drei Ziffern an! Für  $Z=13$  aber lohnt sich die Angabe einer 4. Ziffer der Relaxations-Weglängen, über die wir verfügen, wegen der Genauigkeitsgrenze der hier allein zugrunde gelegten 2. BORNSchen Näherung nicht.

Die Genauigkeit der hier mitgeteilten Relaxations-Weglängen  $l_0, l_{ij}$  ist gemäß Gln. (1.6) bekannt, wenn die der Relaxationskonstanten  $\omega_0, \omega_{ij}$  gegeben ist. Für  $Z=13$  dürften – außer für das THOMAS-FERMI-Feld, vgl. unten –  $\omega_0, \omega_{11}, \omega_{33}, \omega_{34}$  bis auf etwa 2% Fehler genau ermittelt sein. Für  $Z=48$  und  $Z=80$  möchten wir diesen Relaxationskonstanten eine Genauigkeit bis auf einige Prozent Fehler zurechnen. Um mit einer einzigen Zahl die Genauigkeit

<sup>25</sup> E. R. COHEN u. J. W. M. DuMOND, The Fundamental Constants in Atomic Physics in FLÜGGES Handbuch der Physik, Bd. 35, Teil 1, Verlag Springer, Berlin 1957.

von  $l_0, l_{11}, l_{33}, l_{34}$  pauschal zu charakterisieren, wollen wir sagen: etwa 5% Fehler — sofern die angeschriebene Stellenzahl ( $l_{33}, l_{34}$ ) keine größere Ungenauigkeit bedingt. — Der angegebene Wert von  $l_{12}$  besitzt die Bedeutung einer Größenordnungsangabe. (Der reine Quadraturfehler in unserer Bestimmung von  $l_{12}$  bzw.  $\omega_{12}$  beträgt vielleicht 5% für  $Z = 48$  und  $Z = 80$  und ist für  $Z = 13$  kleiner.)

Die Abhängigkeit der Relaxations-Weglängen vom Abschirmparameter ist, wie Tab. 1 lehrt, im vorgegebenen Wertebereich der Teilchengeschwindigkeit und der Abschirmkonstanten nicht sehr erheblich. Die für  $\mu = 1,00$  und  $\mu = 1,80$  errechneten Relaxations-Weglängen weichen um etwa 20% voneinander ab; letztere sind, weil das Potential schwächer ist, natürlich größer. THOMAS-FERMI-Feld und HARTREE-Feld liefern innerhalb der Fehlergrenze übereinstimmende Relaxations-Weglängen. — Am THOMAS-FERMI-Feld justiert wurde der Wert  $\mu = 1,16$  des Abschirmparameters für das exponentiell abgeschirmte COULOMB-Feld, siehe § 4. Die sehr gute Übereinstimmung der für diese beiden Potentialvorgaben berechneten Relaxations-Weglängen im Fall  $Z = 13$  täuscht etwas. Für das exponentiell abgeschirmte Potential wurde bei  $Z = 13$  ja die 2. BORN-Näherung, für das THOMAS-FERMI-Potential nur die 1. BORN-Näherung zur Berechnung von  $\omega_0, \omega_{11}, \omega_{33}, \omega_{34}$  zugrunde gelegt, siehe § 5. Der Beitrag der 2. BORN-Näherung zu den Werten dieser Relaxationskonstanten beträgt für  $\mu = 1,16$  im ungünstigsten Fall +3,3% des Beitrags der 1. BORN-Näherung. Für das THOMAS-FERMI-Feld sollten die Relaxations-Weglängen, wenn die 2. BORN-Näherung in Anschlag gebracht würde, also etwa 3% kleiner sein als die angegebenen Werte; das ist beim Vergleich zu berücksichtigen. Der Abschirmparameter, der jeweils die gleiche Relaxationslänge wie zugrunde gelegtes THOMAS-FERMI-Potential gibt, liegt gemäß Tab. 1 c zwischen  $\mu = 1,16$  und  $\mu = 1,00$ .

Wir vergleichen noch die hier errechneten Relaxations-Weglängen, soweit dies möglich ist, mit den von BETHE, ROSE und SMITH<sup>26</sup> für die freie Weglänge elastisch gestreuter (skalarer) Elektronen gegebenen Werten. Die Werte von BETHE, ROSE, SMITH für  $l_{11}$  sind um den Faktor 2 bis 3 größer als unsere Werte. Jene Autoren benutzen die Kleinwinkelnäherung, wodurch sie zunächst einen Faktor 1/2 im allgemeinen Ausdruck für  $l_{11}$  verlieren, und behandeln das

Abschirmproblem, indem sie einfach das COULOMB-Feld zu kleinen Winkeln hin bei

$$\Theta = \frac{Z^{1/2}}{k} \frac{m e^2}{\hbar^2} \approx \frac{\lambda_0}{k} \quad (6.2)$$

abschneiden, vgl. hierzu Gln. (4.1), (4.2).

## § 7. Die Ausbreitung eines Elektronenstrahls

Die Ausbreitung eines breiten, senkrecht auf eine dicke Schicht treffenden Strahls von Spin-1/2-Teilchen ist von WALDMANN<sup>3b</sup> studiert worden. Im Inneren der Streufole, weit weg von deren Oberfläche ( $e^{\kappa(d-x)} \gg e^{-\kappa(d-x)}$ ,  $d$  = Schichtdicke), klingen die Spindichten praktisch exponentiell mit der Eindringtiefe ( $x$ ) des Strahls ab. Die Abklingkonstanten  $\kappa_l$  und  $\kappa_t$  von Longitudinal- und Transversalspindichte sind durch Relaxations-Weglängen gegeben:

$$\kappa_l = \sqrt{\frac{3}{l_0 l_{33}}}, \quad \kappa_t = \sqrt{\frac{4}{l_{22} l_{44}}}.$$

Für die Diffusion schneller Elektronen haben wir numerische Werte von  $1/\kappa_l$  und  $1/\kappa_t$  in den Tabellen 2 und 3 zusammengestellt. Als Streupotential zugrunde gelegt wurde diesen Werten das exponentiell abgeschirmte COULOMB-Potential mit dem Abschirmparameter  $\lambda = 1,16 \lambda_0$ , vgl. Gln. (4.1), (4.2).

$\beta$	$Z = 13$	$Z = 48$	$Z = 80$
0,4	$5 \cdot 10^{-3}$		
0,5	$8,6 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-4}$	
0,6	$1,40 \cdot 10^{-2}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$3,7 \cdot 10^{-4}$
0,7	$2,42 \cdot 10^{-2}$	$2,1 \cdot 10^{-3}$	$7,2 \cdot 10^{-4}$
0,8	$4,71 \cdot 10^{-2}$	$4,2 \cdot 10^{-3}$	$1,6 \cdot 10^{-3}$
0,9	$1,32 \cdot 10^{-1}$	$1,28 \cdot 10^{-2}$	$4,6 \cdot 10^{-3}$

Tab. 2. Abklinglänge  $1/\kappa_l$  (in cm) der Longitudinalspindichte schneller Elektronen in Abhängigkeit von deren Geschwindigkeit  $\beta = v/c$  und der Ordnungszahl  $Z$  der Streuer.

$\beta$	$Z = 13$	$Z = 48$	$Z = 80$
0,4	$6 \cdot 10^{-3}$		
0,5	$9,8 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-4}$	
0,6	$1,52 \cdot 10^{-2}$	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$3,8 \cdot 10^{-4}$
0,7	$2,46 \cdot 10^{-2}$	$2,0 \cdot 10^{-3}$	$7,0 \cdot 10^{-4}$
0,8	$4,28 \cdot 10^{-2}$	$3,7 \cdot 10^{-3}$	$1,4 \cdot 10^{-3}$
0,9	$9,39 \cdot 10^{-2}$	$1,20 \cdot 10^{-2}$	$3,1 \cdot 10^{-3}$

Tab. 3. Abklinglänge  $1/\kappa_t$  (in cm) der Transversalspindichte schneller Elektronen in Abhängigkeit von deren Geschwindigkeit  $\beta = v/c$  und der Ordnungszahl  $Z$  der Streuer.

Wir wollen noch die Lösung des Diffusionsproblems in Form von Größenordnungsbeziehungen anschrei-

<sup>26</sup> H. A. BETHE, M. E. ROSE u. L. P. SMITH, Proc. Amer. Phil. Soc. **78**, 573 [1938].



ben. Auf Grund der Tabellen 1, 2 und 3 bestehen die Relationen

$$l_{12}/l_{11} \simeq 10^{-2}, \quad \kappa \equiv \kappa_1 \simeq \kappa_t.$$

Wir fragen speziell nach dem Verhalten des Strahls bei Austritt aus der Folie:  $x=d$ . Für dicke Schichten,  $e^{-\kappa d} \gg e^{-\kappa' d}$ , gilt

$$\begin{aligned} n^{(1)} &\simeq \frac{l_{11}}{d+l_{11}} N, & n^{(3)} &\simeq N S_x e^{-\kappa d}, \\ j_x^{(1)} &\simeq v n^{(1)}, & j_z^{(1)} &\simeq 10^{-2} j_y^{(4)}, \\ j_x^{(2)} &\simeq -10^{-2} j_x^{(1)}, & j_z^{(2)} &= j_y^{(4)}, \\ j_x^{(3)} &\simeq v n^{(3)}, & j_y^{(3)} &\simeq j_y^{(4)}, \\ j_x^{(4)} &\simeq j_x^{(3)}, & j_y^{(4)} &\simeq v N S_y e^{-\kappa d}. \end{aligned}$$

$N, S_x$  und  $S_y$  sind Teilchendichte, Longitudinal- und Transversalspin der auf die Folie fallenden Teilchen;

$n$  und  $j$  beziehen sich auf die diffundierenden Teilchen:  $n^{(1)}$  = Teilchendichte,  $n^{(3)}$  = Helizitätsdichte,  $j^{(1)}$  = Teilchenstrom,  $j^{(2)}, j^{(3)}, j^{(4)}$  = Azimutal-, Longitudinal-, Transversalspindichte (bis auf Faktoren; wegen der genauen Definitionen siehe WALDMANN<sup>3b</sup>).  $j_x^{(2)}$  und  $j_z^{(1)}$  werden von der MOTT-Polarisation bei der Streuung der Teilchen bedingt; Teilchen, die tangential aus der Folie austreten, sind transversal polarisiert, siehe auch WALDMANN und KUPATT<sup>27</sup>.

Bei Vergleich mit Experimenten ist zu beachten, daß die hier mitgeteilten Relaxations-Weglängen und Abklingkonstanten allein für ein Spingas elastisch gestreuter Elektronen gelten. Wie mehrfach erwähnt, liegt die Modellvorstellung elastischer Streuung der WALDMANNschen Diffusionstheorie für polarisierte Spin-1/2-Teilchen zugrunde.

### Anhang: Streuphasendarstellung der Relaxationskonstanten

Für DIRAC-Teilchen, die an einem Zentralpotential gestreut werden, lautet der Streuoperator in MOTT-Darstellung

$$A_M(\mathbf{e}', \mathbf{e}, \boldsymbol{\sigma}^P) = f(\Theta) + i g(\Theta) \left( \frac{\mathbf{e}' \times \mathbf{e}}{\sin \Theta} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}^P.$$

Die Streufunktionen  $f$  und  $g$  besitzen nach MOTT<sup>28</sup> die Phasendarstellungen

$$\begin{aligned} a_0 &= k f = \frac{1}{2i} \sum_{l=0}^{\infty} [(l+1) (\exp\{2i\delta_l^1\} - 1) + l (\exp\{2i\delta_l^2\} - 1)] P_l(\cos \Theta), \\ a_1 &= k g = \frac{1}{2i} \sum_{l=1}^{\infty} [-\exp\{2i\delta_l^1\} + \exp\{2i\delta_l^2\}] P_l^1(\cos \Theta); \end{aligned}$$

dabei ist

$$P_l^1(\cos \Theta) = \sin \Theta \cdot \frac{d P_l(\cos \Theta)}{d \cos \Theta} \quad (l=1, 2, \dots), \quad [P_l^1(1) = 0, P_l(1) = 1].$$

$P_l(\cos \Theta)$  bezeichnet die LEGENDRESchen Polynome<sup>29</sup>. Für die Relaxationskonstanten  $\omega_0, \omega_{ij}$ , Gl. (1.4), können damit die Phasendarstellungen angeschrieben werden:

$$\begin{aligned} \omega_0 &= 4\pi\omega \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2(\delta_l^1 - \delta_{l+1}^2), \\ \omega_{11} &= 4\pi\omega \sum_l (l+1) \left[ \sin^2(\delta_l^1 - \delta_{l+1}^2) + \frac{2l}{2l+1} \sin(\delta_l^1 - \delta_l^2) \cos(\delta_{l-1}^1 + \delta_{l+1}^2 - \delta_l^1 - \delta_l^2) \sin(\delta_{l+1}^2 - \delta_{l-1}^1) \right], \\ \omega_{12} &= -\frac{4\pi\omega}{\sqrt{2}} \sum_l \frac{l(l+1)}{2l+1} \sin(\delta_l^1 - \delta_l^2) \{ \cos(2\delta_{l-1}^1 - \delta_l^1 - \delta_l^2) - \cos(2\delta_{l+1}^2 - \delta_l^1 - \delta_l^2) \}, \\ \omega_{33} &= 4\pi\omega \sum_l \frac{l(l+1)}{2l+1} [\sin^2(\delta_l^1 - \delta_l^2) + \sin^2(\delta_{l-1}^1 - \delta_{l+1}^2)], \\ \omega_{34} &= \frac{4\pi\omega}{\sqrt{2}} \sum_l \frac{l(l+1)}{2l+1} [\sin^2(\delta_l^1 - \delta_l^2) - \sin^2(\delta_{l-1}^1 - \delta_{l+1}^2)]. \end{aligned}$$

<sup>27</sup> L. WALDMANN u. H.-D. KUPATT, Z. Naturforschg. **18a**, 86 [1963].

<sup>29</sup> Vgl. JAHNKE-EMDE, Tafeln höherer Funktionen, Teubner Verlag, Leipzig 1948.

<sup>28</sup> Siehe MOTT-MASSEY, l. c. <sup>21</sup>, S. 76 (dort ist bezeichnet  $\delta_l^1 = \delta_l^1, \delta_l^2 = \delta_{l-1}^2$ ).

Wir notieren noch zwei Spezialisierungen:

1. In 1. BORNScher Näherung,  $\delta_l^i \ll 1$  für alle  $l$ , sind die Streufunktionen linear in den Streuphasen, ihre Bilinearformen dementsprechend bilinear. Das heißt  $\omega_{12}$  verschwindet, weil es von mindestens 3. Potenz in den Phasen ist.
2. Für skalare Teilchen ist  $\delta_l^1 = \delta_l^2$ , also  $a_1 = k \cdot g = 0$ . Es wird dann  $\omega_0 = \omega_{11}, \omega_{12} = 0, \omega_{33} = -\sqrt{2} \omega_{34}$ , wie es gemäß Gl. (1.4) sein muß.

Meinem verehrten Lehrer, Herrn Prof. Dr. L. WALDMANN, darf ich für die Anregung dieser Arbeit und fördernde Kritik herzlich danken. — Herrn Prof. Dr. G. U. SCHUBERT danke ich dafür, daß er die Voraussetzung zur Durchführung dieser Arbeit geschaffen hat. — Die technische Abwicklung meines Rechenprogrammes auf elektronischen Maschinen bei der IBM in Düsseldorf und in Stuttgart sowie am Institut für Angewandte Mathematik der Universität Mainz hat Herr Dipl.-Math. W. THIELE übernommen. Ihm und den beteiligten Instituten danke ich. — Dem Bundesministerium für wissenschaftliche Forschung sage ich für finanzielle Unterstützung dieser Arbeit meinen verbindlichen Dank.

## Simpler Formulae for the Chapman-Cowling Second Approximation to the Thermal Diffusion Factor of Binary Gas Mixtures

By R. K. JOSHI and S. C. SAXENA

Physics Department, University of Rajasthan, Jaipur, India

(Z. Naturforsch. **19 a**, 314—318 [1964]; eingegangen am 30. Oktober 1963)

A scheme has been proposed for approximating the complicated second and higher CHAPMAN-COWLING approximation formulae for the thermal diffusion factor of a binary gas mixture. Expressions have been reported for the second approximation and their accuracy investigated by performing numerical calculations for the systems Ar—Xe and He—Xe as a function of both temperature and composition. These formulae have been further simplified by expressing them in the ascending powers of  $M$ , the ratio of the molecular weight of the lighter component to the heavier component, and neglecting all those terms which explicitly possess the power of  $M$  greater than two. The two particular cases when either of the components is present in tracer amounts have also been investigated.

The complicated form and the poor convergence of the higher approximations to the thermal diffusion factor of a binary gas mixture,  $\alpha_T$ , according to the formulation of CHAPMAN and COWLING<sup>1</sup> has necessitated the development of suitable schemes for simplifying rigorous expressions without any appreciable loss of accuracy. One such scheme was proposed and applied to the various types of mixtures by SAXENA and DAVE<sup>2-4</sup>, and SAXENA, DAVE and PARDESHI<sup>5</sup>. This procedure involved the representation of the  $\alpha_T$  expression in ascending powers of  $M$ , the ratio of the mass of the lighter component ( $M_2$ ) to the heavier component ( $M_1$ ), and neglect of all those terms which contained the power of  $M$  greater than two. An alternative procedure can be developed

based on the property that the diagonal elements of the CHAPMAN-COWLING determinants are usually much larger than the off-diagonal elements. An indication that this scheme might prove successful for thermal diffusion was obtained from the work of SAXENA and JOSHI<sup>6, 7</sup>. These workers found that the simplified expressions of SAXENA et al. obtained according to the first procedure are considerably improved if the terms containing the product of two diagonal elements are also retained irrespective of their power of  $M$ . In this paper we apply this criterion to simplify the second approximation expression for the thermal diffusion factor  $[\alpha_T]_2$ . It is important to note that this particular procedure has proved very successful for simplifying the second approximation expression

<sup>1</sup> S. CHAPMAN and T. G. COWLING, *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*, Cambridge University Press, 1952.

<sup>2</sup> S. C. SAXENA and S. M. DAVE, *Rev. Mod. Phys.* **33**, 148 [1961].

<sup>3</sup> S. C. SAXENA and S. M. DAVE, *Mol. Phys.* **6**, 61 [1963].

<sup>4</sup> S. C. SAXENA and S. M. DAVE, *Indian J. Phys.* **37**, 111 [1963].

<sup>5</sup> S. C. SAXENA, S. M. DAVE, and P. A. PARDESHI, *Canadian J. Phys.* **40**, 1608 [1962].

<sup>6</sup> S. C. SAXENA and R. K. JOSHI, *Canadian J. Phys.* **41**, 207 [1963].

<sup>7</sup> S. C. SAXENA and R. K. JOSHI, *Indian J. Phys.* **37**, 235 [1963].