

# Berechnung der komplexen atomaren Streuamplituden für schnelle Elektronen zur Auswertung von Elektronenbeugungsaufnahmen

JOACHIM HAASE

Lehrstuhl für Chemische Physik der Universität Kiel \*

(Z. Naturforsch. 21 a, 187–192 [1966]; eingegangen am 29. Oktober 1965)

Nach bekannten Verfahren wurden die komplexen atomaren Streuamplituden von Argon und Uran bei 40, 60, 80, 100 und 120 kV Beschleunigungsspannung berechnet. Als Atompotentiale wurden THOMAS-FERMI-DIRAC-Potentiale verwendet. Die Ergebnisse wurden mit den Resultaten von KARLE und BONHAM bei 40 kV Beschleunigungsspannung verglichen.

Ausgehend von zwei Arbeiten von SCHOMAKER und GLAUBER<sup>1</sup>, die das Auftreten von Anomalien bei der Strukturbestimmung gasförmiger Moleküle mit Hilfe der Methode der Elektronenbeugung auf die Verwendung der ersten BORNschen Näherung<sup>2</sup> für die Streuamplituden zurückführten, haben eine ganze Reihe von Autoren die komplexen Streuamplituden berechnet<sup>3–5</sup>. Von den einzelnen Autoren werden teilweise sehr unterschiedliche Werte angegeben, was hauptsächlich auf die Verwendung der nur ungenau bekannten Atompotentiale zurückzuführen ist. Jetzt liegen die Atompotentiale nach Arbeiten von BONHAM und STRAND<sup>6,7</sup> als analytische Ausdrücke vor, nachdem in den letzten Jahren sowohl für das HARTREE-FOCK-Feld als auch für das THOMAS-FERMI-DIRAC-Feld der Atome bessere Werte erhalten worden sind<sup>8</sup>.

KARLE und BONHAM<sup>5</sup> haben die komplexen Streuamplituden von Argon und Uran bei 40 kV Beschleunigungsspannung berechnet. Die Autoren kündigen die Berechnung für alle Atome des periodischen Systems bei 10, 40 und 80 kV Beschleunigungsspannung an. Für die bei uns mit Hilfe der Elektronenbeugung an Gasen durchgeführten Arbeiten<sup>9,10</sup> ist es jedoch wichtig, die Streufaktoren bei 60 kV Beschleunigungsspannung – und für eine spätere Erweiterung des Spannungsbereiches bis ca. 120 kV – zu kennen. Es wurden zunächst die komplexen Streuamplituden von Argon und Uran bei 40, 60, 80, 100 und 120 kV Beschleunigungsspannung nach bekannten Methoden<sup>3,4</sup> mit einigen Änderungen berechnet. Die Werte bei 40 kV wurden

zur Prüfung des hier angewendeten Rechenverfahrens ermittelt und mit denen von KARLE und BONHAM<sup>5</sup> verglichen.

## Theorie

Nach der Partialwellenmethode kann die winkelabhängige Amplitude von an einem Atom gestreuten Elektronen, wenn man vom Einfluß des Spins, des Elektronenaustausches, sowie dem Einfluß der inelastischen Streuung auf den elastischen Wirkungsquerschnitt absieht, durch folgende Gleichung beschrieben werden:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (\exp(2i\delta_l) - 1) P_l(\cos \vartheta). \quad (1)$$

Dabei bedeuten:  $k = 2\pi/\lambda$  den Betrag des Wellenvektors,  $P_l(\cos \vartheta)$  die LEGENDRE-Polynome erster Art,  $\delta_l$  die Phase der  $l$ -ten Partialwelle.

Zur Bestimmung der  $\delta_l$  stehen eine ganze Reihe von Verfahren zur Verfügung. Nach Angabe von KARLE und BONHAM<sup>5</sup> erhält man die besten Werte für die  $\delta_l$  durch numerische Integration der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\frac{d^2\varphi_l(r)}{dr^2} + (k^2 - U(r) - l(l+1)/r^2) \varphi_l(r) = 0. \quad (2)$$

Die Werte der  $\delta_l$  entnimmt man der asymptotischen Form der Lösung

$$\varphi_l^A(r) = \sin(kr - \delta_l - l \cdot \frac{1}{2}\pi). \quad (3)$$

\* Derzeitige Anschrift: 75 Karlsruhe, Hertzstr. 16, Bau 35 (Westhochschule).

<sup>1</sup> V. SCHOMAKER u. R. GLAUBER, *Nature*, London **170**, 290 [1952]; *Phys. Rev.* **89**, 667 [1953].

<sup>2</sup> M. BORN, *Z. Phys.* **37**, 863 [1926]; **38**, 803 [1926].

<sup>3</sup> J. A. HOERNI u. J. A. IBERS, *Phys. Rev.* **91**, 1182 [1953].

<sup>4</sup> J. A. IBERS u. J. A. HOERNI, *Acta Cryst.* **7**, 405 [1954].

<sup>5</sup> J. KARLE u. R. A. BONHAM, *J. Chem. Phys.* **40**, 1396 [1964].

<sup>6</sup> T. G. STRAND u. R. A. BONHAM, *J. Chem. Phys.* **40**, 1686 [1964].

<sup>7</sup> R. A. BONHAM u. T. G. STRAND, *J. Chem. Phys.* **39**, 2200 [1963].

<sup>8</sup> E. CLEMENTI, *J. Chem. Phys.* **41**, 295, 303 [1964].

<sup>9</sup> J. HAASE u. W. ZEIL, *Z. Phys. Chem., N. F.* **45**, 202 [1965].

<sup>10</sup> W. ZEIL, J. HAASE u. L. WEGMANN, *Z. Instrumentenkunde*, im Druck.



In Gl. (2) ist  $U(r) = 2m/\hbar^2 \cdot V(r)$ , wobei  $V(r)$  das atomare Streupotential darstellt.

Man kann die  $\delta_l$  auch nach der WBK-Methode<sup>11</sup> berechnen und erhält folgenden Ausdruck

$$\delta_l = \int_{r_0(l)}^{\infty} \sqrt{k^2 - U(r) - (l + \frac{1}{2})^2/r^2} dr - \int_{r_1(l)}^{\infty} \sqrt{k^2 - (l + \frac{1}{2})^2/r^2} dr. \quad (4)$$

Hierbei bedeuten  $r_0(l)$  und  $r_1(l)$  die Nullstellen der jeweiligen Integranden. Gl. (4) wurde in dieser Arbeit zur Berechnung der  $\delta_l$  benutzt, Einzelheiten der Berechnung sind im Anhang näher erläutert.

Eine weitere Möglichkeit zur Bestimmung der  $\delta_l$  liefert eine von DRUKAREW<sup>12</sup> angegebene Beziehung

$$\frac{d\delta_l(r)}{dr} = -k r^2 U(r) (j_l(kr) \cos \delta_l(r) - n_l(kr) \sin \delta_l(r))^2. \quad (5)$$

Diese Gleichung, die numerisch etwas umständlich zu handhaben ist, liefert aber, wenn die  $\delta_l(r)$  über den gesamten  $r$ -Bereich klein sind, eine Formel für die  $\delta_l$ , die mit dem Ausdruck der  $\delta_l$  in zweiter BORN-scher Näherung übereinstimmt

$$\delta_l = -k \int_0^{\infty} r^2 U(r) j_l^2(kr) dr. \quad (6)$$

Die zur Berechnung verwendeten Atompotentiale werden in folgender Form dargestellt

$$V(r) = -\frac{Z e^2 Z_p(r)}{r Z}. \quad (7)$$

Dabei bedeuten  $Z$  die Kernladungszahl des jeweiligen Atoms,  $Z_p(r)$  die effektive Kernladungszahl,  $Z_p(r)/Z$  nennt man den Abschirmfaktor.

Für die ersten 36 Atome des periodischen Systems werden die HARTREE-FOCK-Potentiale durch Verwendung des folgenden Abschirmfaktors dargestellt

$$\frac{Z_p(r)}{Z} = \sum_i a_i \exp(-b_i r) + r \sum_j c_j \exp(-d_j r). \quad (8)$$

Die Parameter  $a_i, b_i, c_j, d_j$ , die für jedes Atom bestimmt werden müssen, finden sich bei STRAND und BONHAM<sup>6</sup> tabelliert. Die Abschirmfaktoren für die THOMAS-FERMI-DIRAC-Potentiale aller neutralen Atome werden durch folgenden Ausdruck wiedergegeben

$$\frac{Z_p(r)}{Z} = \sum_{i=1}^3 A_i \exp(-B_i r). \quad (9)$$

Für die  $A_i$  und  $B_i$  gilt folgende Gleichung

$$(A_i, B_i) = a + b \ln Z + c (\ln Z)^2 + d (\ln Z)^3 + e (\ln Z)^4. \quad (10)$$

Die Werte der entsprechenden Parameter  $a, b, c, d$  und  $e$  finden sich bei BONHAM und STRAND<sup>7</sup> tabelliert.

## Ergebnisse

Die Berechnung der Streuamplituden nach Gl. (1) wurde auf einer Rechenanlage IBM 7090 im Deutschen Rechenzentrum Darmstadt durchgeführt. Das verwendete Programm setzt sich aus drei Abschnitten zusammen. Im ersten Teil werden die Nullstellen  $r_0(l)$  und  $r_1(l)$  nach dem NEWTONschen Iterationsverfahren mit einer Genauigkeit von  $2 \cdot 10^{-8}$  bestimmt. Die Ausführung der beiden Integrationen und damit die Bestimmung der  $\delta_l$  wird im zweiten Abschnitt durchgeführt. Im dritten Programmteil werden dann Betrag  $|f(\vartheta)|$  und Phase  $\eta(\vartheta)$  der Streuamplituden berechnet. Als Laufparameter wurde nicht, wie allgemein üblich, der Beugungswinkel  $\vartheta$  gewählt, sondern die in der Praxis übliche Größe  $s = (4\pi/\lambda) \sin \vartheta/2$  verwendet. Die einzelnen Werte der Streuamplituden wurden jeweils von  $s=0$  bis  $s=38,5$  mit einer Schrittweite  $\Delta s=0,5$  berechnet. Die Rechenzeit für ein Atom bei einer Beschleunigungsspannung betrug ca. 5 min.

Bei der Berechnung der Partialwellenphasen  $\delta_l$  nach Gl. (4) wurden folgende THOMAS-FERMI-DIRAC-Potentiale benutzt<sup>5</sup>

$$\text{Argon:} \quad U(r) = -\frac{2Z}{ar} (0,50529 \exp(-2,68764 r) + 0,43447 \cdot \exp(-9,06392 r) + 0,06071 \exp(-46,4985 r)), \quad (11 a)$$

$$\text{Uran:} \quad U(r) = -\frac{2Z}{ar} (0,3100 \exp(-2,9802 r) + 0,56667 \cdot \exp(-10,564 r) + 0,12346 \exp(-50,463 r)). \quad (11 b)$$

<sup>11</sup> A. MESSIAH, Quantum Mechanics, North Holland Publ. Comp., Amsterdam 1964.

<sup>12</sup> G. F. DRUKAREW, J. Exp. Theor. Phys. UdSSR **19**, 247 [1949].

In den Formeln (11 a) und (11 b) bedeutet  $a$  den relativistischen BOHRschen Radius. Bei der Berechnung der Streuamplituden wurden 126 Partialwellen berücksichtigt, von denen die ersten 25 nach Gl. (4) ermittelt worden sind. In Tab. 1 sind die Werte der

$\delta_l$  für Argon und Uran bei 40 kV Beschleunigungsspannung angegeben und mit den entsprechenden Werten nach KARLE und BONHAM<sup>5</sup> verglichen.

Die aus diesen und den bei den anderen Beschleunigungsspannungen ermittelten  $\delta_l$ -Werten gewonnenen Werte der Beträge und Phasen der Streuamplituden sind in Tab. 2 und Tab. 3 angegeben. Zu den Beträgen der Streuamplituden sind jeweils noch die Streuamplituden in erster BORNscher Näherung angegeben.

In Tab. 4 sind die Werte der  $|f(s)|$  und der  $\eta(s)$  von Argon und Uran bei 40 kV Beschleunigungsspannung den Ergebnissen von KARLE und BONHAM<sup>5</sup> gegenübergestellt.

### Bemerkungen

Bei der Diskussion der Ergebnisse sind folgende Fehlerquellen zu berücksichtigen:

Die zur Berechnung der Partialwellenphasen  $\delta_l$  verwendeten Atompotentiale sind nur auf drei gültige Ziffern bestimmt<sup>5</sup>. Die zur Bestimmung der  $\delta_l$  angewendete WBK-Methode ist eine Näherungsmethode.

Bei der numerischen Behandlung des ersten Integrals der Gl. (4) ergeben sich Unsicherheiten je nach der verwendeten Integrationsformel.

Ein Vergleich der in Tab. 1 zusammengefaßten  $\delta_l$ -Werte zeigt, daß die in dieser Arbeit berechneten Werte höher sind als die von KARLE und BONHAM<sup>5</sup>

$l$	$\delta_l$ für Argon		$\delta_l$ für Uran		
	eigene Werte	KARLE, BONHAM	eigene Werte <sup>a</sup>	eigene Werte <sup>b</sup>	KARLE, BONHAM
0	1,3314	1,3228	5,3123	5,2192	5,2815
1	0,9627	0,9550	4,1450	4,1319	4,1405
2	0,7867	0,7802	3,3627	3,3564	3,3489
3	0,6735	0,6678	2,8069	2,8026	2,7915
4	0,5912	0,5863	2,3976	2,3941	2,3828
5	0,5275	0,5232	2,0842	2,0813	2,0704
6	0,4759	0,4722	1,8358	1,8338	1,8233
7	0,4332	0,4298	1,6340	1,6309	1,6224
8	0,3969	0,3939	1,4663	1,4641	1,4556
9	0,3656	0,3629	1,3247	1,3218	1,3149
10	0,3383	0,3359	1,2038	1,2019	1,1946
11	0,3142	0,3120	1,0991	1,0965	1,0906
12	0,2928	0,2908	1,0078	1,0062	1,0000
13	0,2737	0,2718	0,9275	0,9256	0,9204
14	0,2563	0,2547	0,8567	0,8556	0,8500
15	0,2408		0,7935	0,7921	0,7873
16	0,2266		0,7371	0,7354	0,7314
17	0,2136		0,6865	0,6845	0,6811
18	0,2017		0,6407	0,6397	0,6358
19	0,1907		0,5993	0,5981	0,5947
20	0,1807		0,5618	0,5603	0,5574
21	0,1714		0,5276	0,5260	0,5235
22	0,1627		0,4963	0,4954	0,4925
23	0,1547		0,4675	0,4666	0,4640
24	0,1472		0,4411	0,4400	0,4378

Tab. 1. Gegenüberstellung der Werte der Partialwellenphasen. a) Integrationsschrittweite  $h=2 \cdot 10^{-4}$ , b) Integrationsschrittweite  $h=2 \cdot 10^{-3}$ , siehe Anhang.

$s$	$U_B = 40$ kV		$U_B = 60$ kV		$U_B = 80$ kV		$U_B = 100$ kV		$U_B = 120$ kV	
	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $
0	5,5213	5,4126	5,7216	5,6411	5,9219	5,8555	6,1221	6,0641	6,3224	6,2697
2	3,6745	3,5809	3,8078	3,7386	3,9411	3,8841	4,0744	4,0246	4,2076	4,1624
4	1,9228	1,8565	1,9925	1,9437	2,0623	2,0223	2,1320	2,0974	2,2018	2,1706
6	1,1293	1,0846	1,1703	1,1369	1,2112	1,1837	1,2522	1,2284	1,2931	1,2720
8	0,7405	0,7100	0,7673	0,7445	0,7942	0,7750	0,8211	0,8040	0,8479	0,8324
10	0,5226	0,5013	0,5416	0,5256	0,5605	0,5474	0,5795	0,5676	0,5984	0,5872
12	0,3880	0,3729	0,4020	0,3904	0,4161	0,4067	0,4302	0,4221	0,4442	0,4368
14	0,2989	0,2879	0,3097	0,3014	0,3205	0,3133	0,3314	0,3253	0,3422	0,3371
16	0,2369	0,2289	0,2455	0,2395	0,2541	0,2489	0,2627	0,2578	0,2713	0,2670
18	0,1922	0,1863	0,1991	0,1946	0,2061	0,2025	0,2131	0,2096	0,2200	0,2165
20	0,1589	0,1545	0,1646	0,1612	0,1704	0,1676	0,1761	0,1739	0,1819	0,1795
22	0,1334	0,1334	0,1383	0,1358	0,1431	0,1408	0,1480	0,1462	0,1528	0,1514
24	0,1136	0,1113	0,1177	0,1157	0,1218	0,1203	0,1260	0,1243	0,1301	0,1290
26	0,0979	0,0962	0,1014	0,0999	0,1050	0,1038	0,1085	0,1073	0,1121	0,1108
28	0,0852	0,0841	0,0882	0,0872	0,0913	0,0903	0,0944	0,0937	0,0975	0,0965
30	0,0748	0,0741	0,0775	0,0767	0,0802	0,0793	0,0829	0,0823	0,0856	0,0851
32	0,0662	0,0659	0,0686	0,0679	0,0710	0,0704	0,0734	0,0727	0,0758	0,0755
34	0,0589	0,0590	0,0611	0,0608	0,0632	0,0629	0,0654	0,0648	0,0675	0,0671
36	0,0529	0,0531	0,0548	0,0546	0,0567	0,0563	0,0586	0,0584	0,0605	0,0600
38	0,0477	0,0481	0,0494	0,0494	0,0511	0,0509	0,0528	0,0527	0,0546	0,0542

Tab. 2 a. Beträge der Streufaktoren für Argon.  $f_B(s)$  sind die Streufaktoren in erster BORNscher Näherung.

s	U <sub>B</sub> = 40 kV		U <sub>B</sub> = 60 kV		U <sub>B</sub> = 80 kV		U <sub>B</sub> = 100 kV		U <sub>B</sub> = 120 kV	
	f <sub>B</sub> (s)	f(s)	f <sub>B</sub> (s)	f(s)	f <sub>B</sub> (s)	f(s)	f <sub>B</sub> (s)	f(s)	f <sub>B</sub> (s)	f(s)
0	15,0082	12,3468	15,5526	13,2781	16,0971	14,0473	16,6415	14,7362	17,1858	15,3788
2	10,8787	8,4774	11,2734	9,2189	11,6680	9,8163	12,0626	10,3415	12,4572	10,8247
4	6,3543	4,4931	6,5848	4,9804	6,8153	5,3672	7,0458	5,7014	7,2763	6,0038
6	4,0470	2,6850	4,1938	2,9957	4,3406	3,2472	4,4874	3,4680	4,6342	3,6698
8	2,8224	1,8297	2,9248	2,0346	3,0271	2,2006	3,1295	2,3463	3,2319	2,4817
10	2,0890	1,3555	2,1648	1,4973	2,2406	1,6179	2,3164	1,7205	2,3921	1,8119
12	1,6087	1,0600	1,6670	1,1589	1,7254	1,2490	1,7837	1,3310	1,8421	1,4023
14	1,2749	0,8570	1,3211	0,9331	1,3674	0,9972	1,4136	1,0604	1,4598	1,1215
16	1,0333	0,7088	1,0708	0,7710	1,1082	0,8222	1,1457	0,8668	1,1832	0,9134
18	0,8530	0,5962	0,8840	0,6472	0,9149	0,6926	0,9458	0,7291	0,9768	0,7613
20	0,7152	0,5080	0,7412	0,5518	0,7671	0,5892	0,7931	0,6242	0,8190	0,6515
22	0,6078	0,4377	0,6298	0,4762	0,6519	0,5073	0,6739	0,5374	0,6960	0,5655
24	0,5225	0,3808	0,5415	0,4143	0,5604	0,4423	0,5794	0,4664	0,5983	0,4919
26	0,4538	0,3337	0,4703	0,3640	0,4867	0,3887	0,5032	0,4101	0,5197	0,4298
28	0,3977	0,2941	0,4121	0,3223	0,4266	0,3436	0,4410	0,3637	0,4554	0,3803
30	0,3513	0,2605	0,3641	0,2875	0,3768	0,3063	0,3896	0,3237	0,4023	0,3400
32	0,3126	0,2316	0,3239	0,2580	0,3353	0,2748	0,3466	0,2897	0,3579	0,3049
34	0,2799	0,2068	0,2900	0,2322	0,3002	0,2479	0,3103	0,2613	0,3205	0,2741
36	0,2521	0,1860	0,2612	0,2100	0,2703	0,2252	0,2795	0,2368	0,2886	0,2480
38	0,2282	0,1684	0,2365	0,1908	0,2447	0,2051	0,2530	0,2156	0,2613	0,2259

Tab. 2 b. Beträge der Streufaktoren für Uran. f<sub>B</sub>(s) sind die Streufaktoren in erster Bornscher Näherung.

Zusammenstellung der η(s)-Werte für Argon						Zusammenstellung der η(s)-Werte für Uran					
s	U <sub>B</sub> = 40 kV	U <sub>B</sub> = 60 kV	U <sub>B</sub> = 80 kV	U <sub>B</sub> = 100 kV	U <sub>B</sub> = 120 kV	s	U <sub>B</sub> = 40 kV	U <sub>B</sub> = 60 kV	U <sub>B</sub> = 80 kV	U <sub>B</sub> = 100 kV	U <sub>B</sub> = 120 kV
0	0,119	0,100	0,088	0,080	0,075	0	0,335	0,300	0,278	0,261	0,248
2	0,169	0,142	0,126	0,115	0,107	2	0,462	0,412	0,380	0,357	0,339
4	0,281	0,235	0,210	0,193	0,180	4	0,772	0,679	0,623	0,584	0,555
6	0,399	0,334	0,297	0,273	0,256	6	1,134	0,987	0,898	0,838	0,794
8	0,510	0,427	0,427	0,378	0,321	8	1,477	1,283	1,163	1,080	1,019
10	0,609	0,511	0,453	0,413	0,384	10	1,788	1,554	1,410	1,309	1,234
12	0,700	0,585	0,520	0,477	0,445	12	2,068	1,804	1,618	1,522	1,437
14	0,783	0,655	0,580	0,532	0,499	14	2,323	2,033	1,850	1,720	1,624
16	0,859	0,720	0,637	0,581	0,544	16	2,558	2,243	2,045	1,906	1,800
18	0,929	0,778	0,691	0,631	0,586	18	2,777	2,441	2,225	2,076	1,966
20	0,994	0,832	0,738	0,678	0,630	20	2,985	2,625	2,396	2,233	2,116
22	1,054	0,883	0,782	0,118	0,672	22	3,179	2,797	2,558	2,384	2,254
24	1,111	0,930	0,825	0,753	0,707	24	3,364	2,965	2,706	2,530	2,389
26	1,164	0,974	0,865	0,790	0,736	26	3,540	3,123	2,849	2,663	2,523
28	1,215	1,016	0,900	0,826	0,767	28	3,707	3,271	2,991	2,786	2,645
30	1,262	1,055	0,934	0,857	0,800	30	3,868	3,415	3,124	2,909	2,754
32	1,307	1,092	0,968	0,884	0,830	32	4,024	3,552	3,246	3,034	2,860
34	1,349	1,128	1,000	0,912	0,853	34	4,178	3,678	3,366	3,147	2,974
36	1,389	1,162	1,028	0,942	0,875	36	4,332	3,802	3,485	3,249	3,085
38	1,428	1,194	1,057	0,968	0,900	38	4,484	3,921	3,592	3,352	3,180

Tab. 3.

s	Argon				Uran			
	f(s)  <sup>a</sup>	f(s)  <sup>b</sup>	η(s) <sup>a</sup>	η(s) <sup>b</sup>	f(s)  <sup>a</sup>	f(s)  <sup>b</sup>	η(s) <sup>a</sup>	η(s) <sup>b</sup>
0	5,413	5,415	0,119	0,118	12,35	12,38	0,335	0,332
5,47	1,237	1,236	0,368	0,361	3,04	3,038	1,037	1,023
10,93	0,434	0,433	0,649	0,639	1,202	1,189	1,920	1,903
16,38	0,220	0,219	0,871	0,856	0,683	0,679	2,598	2,583
21,83	0,132	0,132	1,048	1,034	0,442	0,440	3,162	3,140
27,26	0,0882	0,0882	1,198	1,182	0,308	0,306	3,647	3,630
32,67	0,0634	0,0634	1,320	1,308	0,223	0,223	4,079	4,070
38,06	0,0479	0,0479	1,428	1,415	0,168	0,168	4,489	4,473

Tab. 4. Gegenüberstellung der eigenen Ergebnisse (a) und der von KARLE und BONHAM (b).

angegebenen, was wahrscheinlich darauf zurückzuführen ist, daß in dieser Arbeit eine kleinere Integrations-schrittweite verwendet wurde als bei den oben angeführten Autoren. Zur Berechnung der  $\delta_l$ -Werte des Urans wurden zwei Schrittweiten benutzt, die sich um den Faktor 10 unterscheiden, auch hier liegen die Ergebnisse höher als bei der oben erwähnten Arbeit.

Die Werte der Beträge und Phasen der Streufaktoren für Uran für eine Beschleunigungsspannung von 40 kV, die in Tab. 4 zusammengestellt sind, zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen von KARLE und BONHAM.

### Anhang

Bei der Berechnung der  $\delta_l$  nach Gl. (4) wurde nach dem von HOERNI und IBERS<sup>3</sup> angegebenen Verfahren mit einigen Änderungen vorgegangen. Der Rechengang soll kurz erläutert werden. Bezeichnet man die Integranden in Gl. (4) mit  $G(r)$  und  $G_0(r)$ , dann kann man die Integrale auch in folgender Form schreiben

$$\int_{r_0(l)}^R G(r) dr - \int_{r_1(l)}^R G_0(r) dr + \int_R^\infty (G(r) - G_0(r)) dr = I_1 - I_2 + I_3. \quad (\text{A. 1})$$

Dabei ist  $R$  so gewählt, daß sich  $G(R)$  und  $G_0(R)$  um nicht mehr als 10 Prozent unterscheiden. In diesem Fall reduziert sich der Ausdruck für  $I_3$  zu

$$I_3 = -\frac{1}{2} \int_R^\infty \frac{U(r)}{G_0(r)} dr. \quad (\text{A. 2})$$

Setzt man das Potential nach Gl. (7) ein, so erhält man

$$I_3 = \frac{Z}{a} \int_R^\infty \frac{Z_p(r)}{Z r G_0(r)} dr. \quad (\text{A. 3})$$

Im Falle des HARTREE-FOCK-Potentials ergibt sich hieraus zusammen mit Gl. (8)

$$I_3 = \frac{Z}{a} \left[ \sum_{i=1}^2 a_i \int_R^\infty \frac{\exp(-b_i r)}{\sqrt{k^2 r^2 - (l + \frac{1}{2})^2}} dr + \sum_{j=1}^3 c_j \int_R^\infty \frac{r \exp(-d_j r)}{\sqrt{k^2 r^2 - (l + \frac{1}{2})^2}} dr \right]. \quad (\text{A. 4})$$

Die beiden Integrale lassen sich durch folgende Entwicklungen darstellen

$$I_3 = \frac{Z}{a k} \left[ \sum_{i=1}^2 a_i \{K_0(u_i) - S(u_i, m)\} + \frac{l + \frac{1}{2}}{k} \sum_{j=1}^3 c_j \{K_1(v_j) - T(v_j, m)\} \right], \quad (\text{A. 5})$$

$$S(u_i, m) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-u_i)^n}{2^n n!} \sum_{\nu=0}^n \binom{n}{\nu} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{m^k}{k!} (n - 2\nu)^{k-1},$$

$$T(v_j, m) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-v_j)^n}{2^{n+1} n!} \sum_{\nu=0}^{n+1} \binom{n+1}{\nu} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{m^k}{k!} (n + 1 - 2\nu)^{k-1}$$

Dabei bedeuten

$$u_i = b_i(l + \frac{1}{2})/k, \quad v_j = d_j(l + \frac{1}{2})/k$$

und

$$m = \text{arcosh}((Rk)/(l + \frac{1}{2})).$$

$K_0(u_i)$  und  $K_1(v_j)$  sind die modifizierten BESSEL-Funktionen zweiter Art. Für große Werte von  $l$  ( $\geq 25$ ) wird  $r_0(l) \approx r_1(l) \approx R$ , so daß sich (A. 1) und (A. 5) vereinfachen zu

$$I = I_3 = \frac{Z}{a k} \left[ \sum_{i=1}^2 a_i K_0(u_i) + \frac{l + \frac{1}{2}}{k} \sum_{j=1}^3 c_j K_1(v_j) \right]. \quad (\text{A. 6})$$

Eine ähnliche Ableitung führt im Falle des THOMAS-FERMI-DIRAC-Potentials unter Beachtung der Gl. (9) zu folgendem Ausdruck für  $I_3$

$$I_3 = \frac{Z}{a k} \left[ \sum_{i=1}^3 A_i \{K_0(u_i) - S(u_i, m)\} \right]. \quad (\text{A. 7})$$

Dabei haben die Parameter dieselbe Bedeutung wie oben. Auch hier kann man für große  $l$ -Werte eine Vereinfachung durchführen und erhält

$$I = I_3 = \frac{Z}{a k} \sum_{i=1}^3 A_i K_0(u_i). \quad (\text{A. 8})$$

Zur Berechnung des Integrals  $I_1$  wurde folgende Integrationsformel<sup>13</sup> verwendet

$$I = \int_0^{5h} y(x) dx \quad (\text{A. 9})$$

$$= \frac{h}{24} (8y_0 + 31y_1 + 21y_2 + 21y_3 + 31y_4 + 8y_5).$$

Als Schrittweite  $h$  wurde  $h = 2 \cdot 10^{-4}$  gewählt. Um den Einfluß der Schrittweite auf das Ergebnis zu untersuchen, wurde ein Beispiel (Uran, 40 kV) mit einer Schrittweite von  $h = 2 \cdot 10^{-3}$  gerechnet. Das Resultat ist in Tab. 5 dargestellt.

<sup>13</sup> R. ZURMÜHL, Praktische Mathematik, Springer-Verlag, Berlin 1963.

$s$	$ f(s) ^a$	$ f(s) ^b$	$\eta(s)^a$	$\eta(s)^b$
0	12,3468	12,3564	0,335	0,334
5	3,4072	3,4100	0,953	0,950
10	1,3555	1,3521	1,788	1,782
15	0,7774	0,7740	2,443	2,438
20	0,5080	0,5055	2,985	2,979
25	0,3562	0,3540	3,454	3,449
30	0,2605	0,2587	3,868	3,867
35	0,1960	0,1949	4,255	4,258

Tab. 5. Gegenüberstellung der bei zwei verschiedenen Integrations-schrittweiten erhaltenen Werte der Streuamplituden von Uran (40 kV), a) Schrittweite  $h=2 \cdot 10^{-4}$ , b) Schrittweite  $h=2 \cdot 10^{-3}$ .

Die Berechnung der Funktionen  $K_0(u)$  und  $K_1(v)$  wurde nach Näherungsformeln durchgeführt, die dem "Handbook of Mathematical Functions"<sup>14</sup> entnommen wurden.

<sup>14</sup> Handbook of Mathematical Functions, NBS Applied Math. Series 55.

Zur Berechnung der LEGENDRE-Polynome wurde die bekannte Rekursionsformel verwendet. Um die Konvergenz der Reihe für  $f(\vartheta)$ , Gl. (1), zu verbessern, wurden die von HOERNI und IBERS<sup>3</sup> angegebenen Konvergenzkorrekturen angewendet.

In der Weiterführung dieser Arbeit sollen zunächst für alle Elemente des periodischen Systems die Beträge und Phasen der Streufaktoren berechnet und dann durch analytische Ausdrücke angenähert werden, um sie bei ihrer weiteren Verwendung auf dem Gebiet der Elektronenbeugung an Gasen in möglichst einfacher Form vorliegen zu haben.

Ich danke Herrn Prof. Dr. W. ZEIL für anregende Diskussionen und sein stets förderndes Interesse an dieser Arbeit.

## Die Ionenladungsverteilung von unabgebremsten Spaltprodukten

E. KONECNY und G. SIEGERT

2. Physikalisches Institut der Justus-Liebig-Universität Gießen  
und Physik-Department der Technischen Hochschule München

(Z. Naturforschg. 21 a, 192—196 [1966]; eingegangen am 8. November 1965)

Eine frühere Arbeit über die Ionenladungsverteilung von Spaltprodukten<sup>1</sup> wurde in zwei Punkten ergänzt. Einmal wurden die Spaltprodukte aller natürlich vorkommenden Energien und Ionenladungen erfaßt und mit den integralen früheren Messungen von LASSEN<sup>2</sup> verglichen. Zum anderen wurden unter Benützung des gesamten Massenspektrographen am FRM in Garching bei München Ionenladungsverteilungen bei konstanter kinetischer Energie und Masse aufgenommen und die Abhängigkeit der mittleren Ionenladung als Funktion der Geschwindigkeit bei konstanter Masse untersucht.

In einer früheren Arbeit<sup>1</sup> wurde die Ionenladung von Spaltprodukten in Abhängigkeit von deren kinetischer Energie untersucht. Zur Analyse diente ein elektrostatisches Ablenkkfeld, das die Teilchen nach den Quotienten von kinetischer Energie  $E$  und Ionenladungszahl  $e$  sortiert. Aus technischen Gründen konnte damals die Ablenkkfeldstärke nicht genügend hoch gemacht werden, um den ganzen bei der Spaltung natürlicherweise auftretenden Energiebereich zu erfassen. Teilchen mit hohen Energien und tiefen Ionenladungen der leichten Spaltproduktgruppe konnten nicht mehr abgelenkt werden. Die hier aufgeführten Messungen sollen die Arbeit<sup>1</sup> in zweifacher Hinsicht ergänzen:

a) Auch die hochenergetischen Teilchen der leichten Gruppe werden einbezogen; unter Verwendung dieser Daten ist ein direkter Vergleich unserer Ergebnisse mit früheren Daten von LASSEN<sup>2</sup> für die jeweils über die leichte und schwere Gruppe integrierte Ionenladungsverteilung möglich.

b) Bei der Trennung nur durch ein elektrostatisches Feld kann man nur nach der Energie, nicht aber zusätzlich nach der Masse trennen. Unter zusätzlicher Benützung eines homogenen magnetischen Ablenkkfeldes wurden hier die Häufigkeitsverteilungen der Ionenladungen von Spaltprodukten einzelner diskreter Massen bei festen kinetischen Energien untersucht.

<sup>1</sup> H. OPOWER, E. KONECNY u. G. SIEGERT, Z. Naturforschg. 20 a, 131 [1965].

<sup>2</sup> N. O. LASSEN, Kgl. Danske Vidensk. Selskab, Mat. Fys. Medd. 26, Nr. 5 [1951].