

nungs- und Deformationsfelder besitzen, die die ferroelektrische Polarisation in a -Richtung beeinflussen. Somit liegt der Schluß nahe, daß es sich vorwiegend um Stufenversetzungen handelt. Die Piezoeffizienten nämlich, die die dabei auftretenden Deformationen S_1 , S_2 und S_6 mit der Polarisation P_1 in der ferroelektrischen Richtung koppeln, verschwinden im paraelektrischen Bereich ganz; im ferroelektrischen Bereich verschwinden sie zum Teil ebenfalls, oder sie sind außerordentlich klein.

Die Bildung von Schraubenversetzungen in c -Richtung ist aus energetischen Gründen weniger wahrscheinlich. Die Polarisation P_1 , die durch die Scherung S_4 hervorgerufen wird, müßte entspre-

chend dem Deformationsfeld am Ort der Versetzung ihr Vorzeichen umkehren, wodurch starke Raumladungen mit Streufeldern entstünden.

Die dielektrischen Messungen machen überdies deutlich, daß die Wachstumsgebiete durch relativ scharfe Grenzen ohne Übergangszonen voneinander getrennt sind. Ihre unterschiedlichen Eigenschaften können nicht auf einen Einfluß der oben genannten Fehler zurückgeführt werden.

Herrn Prof. Dr. H. E. MÜSER danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit und die Bereitstellung von Institutsmitteln, Herrn Dr. G. BERNDEN für seine Hilfe bei der Durchführung der Untersuchungen.

Berechnung der komplexen atomaren Streufaktoren für schnelle Elektronen unter Verwendung von Hartree-Fock-Atompotentialen

(2. Mitteilung)

JOACHIM HAASE

Lehrstuhl für Physikalische Chemie der Universität Ulm *, Ulm

(Z. Naturforsch. 23 a, 1000—1019 [1968]; eingegangen am 9. Januar 1968)

In der vorliegenden Arbeit wird über die Berechnung der komplexen Streufaktoren für schnelle Elektronen an sechs Atomen unter Verwendung von Hartree-Fock-Potentialen bei fünf verschiedenen Beschleunigungsspannungen nach der Partialwellenmethode berichtet. Zur Berechnung der Werte wurde ein Näherungsverfahren verwendet, das sich aus der WBK-Methode ableiten läßt. Konvergenzkorrekturen für die Reihensummierung des Real- und Imaginärteils der komplexen Streufaktoren sind angegeben. Die Einflüsse des Näherungsverfahrens, der Anzahl der zur Summierung verwendeten Partialwellenphasen, sowie der Konvergenzkorrekturen werden diskutiert. Um die in Tabellenform vorliegenden Werte der komplexen Streufaktoren zur Auswertung von Elektronenbeugungsaufnahmen von Molekülen im Gaszustand besser verwenden zu können, wurden Beträge und Phasen der Streufaktoren durch analytische Ausdrücke angepaßt und die zur Approximation notwendigen Koeffizienten angegeben.

Zur Strukturbestimmung freier Moleküle mit Hilfe der Methode der Elektronenbeugung an Gasen benötigt man, wie erstmals von SCHOMAKER und GLAUBER¹ gezeigt werden konnte, genaue Werte der komplexen atomaren Streufaktoren. Wie diese Autoren zeigen konnten, gelang es unter Verwendung der Streufaktoren in erster Bornscher Näherung² nicht, bei der Bestimmung der Struktur des gasförmigen UF_6 zu einem eindeutigen Ergebnis zu kommen.

Führt man an Stelle der Formfaktoren in erster Bornscher Näherung $f^B(s)$ die komplexen Streufak-

toren $f(s) = |f(s)| \exp(i\eta(s))$ in den Ausdruck für die molekulare Intensitätsfunktion, die, aus der kinematischen Streutheorie folgend, die Winkelabhängigkeit der an gasförmigen Molekülen gestreuten Elektronen angibt, ein, so erhält man folgende Formel

$$I_m(s) = \sum_i \sum_j |f_i(s)| |f_j(s)| \cos(\eta_i(s) - \eta_j(s)) \cdot \exp\left(-l_{ij}^2 \frac{s^2}{2}\right) \cdot \frac{\sin s \cdot r_{ij}}{s r_{ij}}. \quad (1)$$

* Derzeitige Anschrift: 75 Karlsruhe, Hertzstr. 16, Bau 35.

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

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



In dieser Gleichung bedeuten $s = \frac{4\pi}{\lambda} \cdot \sin \frac{\vartheta}{2}$ (λ die Elektronenwellenlänge), r_{ij} die Abstände der Atome i und j im Molekül, l_{ij} die mittleren Schwingungsamplituden der Atome i und j , $|f_i(s)|$ und $\eta_i(s)$ sind Betrag und Phase des komplexen Streufaktors des i -ten Atoms.

Die komplexen Streufaktoren einzelner Atome sind von einer ganzen Reihe von Autoren³⁻¹² berechnet worden, nachdem für die Potentiale der Atome des periodischen Systems, sowohl für Hartree-Fock-Felder¹³ als auch für Thomas-Fermi-Dirac-Felder¹⁴, geschlossene analytische Ausdrücke vorliegen. Von diesen Autoren wurden die Streufaktoren hauptsächlich bei einer Beschleunigungsspannung von 40 kV berechnet, eine Ausnahme machen KIMURA, KONAKA und OGASAWARA¹¹, die ihre Berechnungen neben kleineren Beschleunigungsspannungen auch bei 50 kV durchgeführt haben. Nach Fertigstellung dieser Arbeit erschien eine Publikation von COX und BONHAM¹⁵, die die komplexen Streufaktoren nach der Partialwellenmethode unter Verwendung der ersten und zweiten Bornschen Näherung und entsprechenden Konvergenzkorrekturen berechnet haben. Die Ergebnisse dieser beiden Autoren sind in guter Übereinstimmung mit den hier vorgelegten Werten der komplexen Streufaktoren. Für die von uns¹⁶⁻²¹ mit Hilfe der Methode der Elektronenbeugung an Gasen durchgeführten Arbeiten ist es jedoch von großem Interesse die komplexen Streufaktoren außer bei 40 kV noch bei 60 kV und, für eine spätere Erweiterung unserer Anlage, bis zu Beschleunigungsspannungen von 120 kV zu kennen. Aus diesem Grunde wurden die komplexen Streufaktoren zunächst für die Kernladungszahlen $Z=1-36$ unter Verwendung von Hartree-Fock-Potentialen bei Beschleunigungsspannungen von 40, 60, 80, 100 und 120 kV berechnet.

Theorie

Nach der Partialwellenmethode kann man die winkelabhängige Amplitude von an einem Atom gestreuten Elektronen folgendermaßen darstellen

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

wobei $k = 2\pi/\lambda$ den Betrag des Wellenvektors, $P_l(\cos \vartheta)$ die Legendre-Polynome erster Art und δ_l die Phase der l -ten Partialwelle bedeuten. Die angegebene Beziehung gilt unter Vernachlässigung des Einflusses des Spins, des Elektronenaustausches, sowie unter Vernachlässigung des Einflusses der inelastischen Streuung auf den elastischen Wirkungsquerschnitt.

Die Berechnung der Partialwellenphasen δ_l erfolgt aus der Schrödinger-Gleichung des Streuproblems nach verschiedenen Näherungsmethoden^{5, 6, 11}. In der vorliegenden Arbeit wurden die Phasen der Partialwellen nach der WBK-Methode gemäß folgender Gleichung berechnet:

$$\delta_l = \int_{r_0(l)}^{\infty} \sqrt{k^2 - U(r) - \frac{(l+\frac{1}{2})^2}{r^2}} dr - \int_{r_1(l)}^{\infty} \sqrt{k^2 - \frac{(l+\frac{1}{2})^2}{r^2}} dr \quad (3)$$

In der Formel bedeuten $r_0(l)$ und $r_1(l)$ die Nullstellen der zugehörigen Integranden, $U(r) = 2m/\hbar^2 \cdot V(r)$, wobei $V(r)$ das Potential des streuenden Atoms darstellt. Die Hartree-Fock-Potentiale der Atome mit den Kernladungszahlen $Z=1-36$ lassen sich durch folgenden Ausdruck beschreiben:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \left\{ \sum_i a_i \exp(-b_i r) + r \sum_j c_j \exp(-d_j r) \right\} \quad (4)$$

Die für jedes Atom bestimmten Parameter a, b, c, d findet man bei STRAND und BONHAM¹³ tabelliert.

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

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

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

⁶ J. HAASE, Z. Naturforsch. **21a**, 187 [1966].

⁷ T. G. STRAND, J. Chem. Phys. **44**, 1611 [1966].

⁸ T. G. STRAND u. H. L. COX JR., J. Chem. Phys. **44**, 2426 [1966].

⁹ S. KONAKA, T. ITO u. Y. MORINO, Bull. Chem. Soc. Japan **39**, 1146 [1966].

¹⁰ S. KONAKA, Y. MURATA, K. KUCHITSU u. Y. MORINO, Bull. Chem. Soc. Japan **39**, 1134 [1966].

¹¹ M. KIMURA, S. KONAKA u. M. OGASAWARA, J. Chem. Phys. **46**, 2599 [1967].

¹² J. L. PEACHER u. J. C. WILLS, J. Chem. Phys. **46**, 4809 [1967].

¹³ T. G. STRAND u. R. A. BONHAM, J. Chem. Phys. **40**, 1686 [1964].

¹⁴ R. A. BONHAM u. T. G. STRAND, J. Chem. Phys. **39**, 2200 [1963].

¹⁵ H. L. COX JR. u. R. A. BONHAM, J. Chem. Phys. **47**, 2599 [1967].

¹⁶ J. HAASE u. W. ZEIL, Z. Phys. Chem. NF **45**, 202 [1965].

¹⁷ W. ZEIL, J. HAASE u. L. WEGMANN, Z. Instrumentenkunde **74**, 84 [1966].

¹⁸ J. HAASE, W. STEINGROSS u. W. ZEIL, Z. Naturforsch. **22a**, 195 [1967].

¹⁹ J. HAASE, H. D. KAMPHUSMANN u. W. ZEIL, Z. Phys. Chem. NF **55**, 225 [1967].

²⁰ W. ZEIL, J. HAASE u. M. DAKKOURI, Z. Naturforsch. **22a**, 1644 [1967].

²¹ B. HAAS, J. HAASE u. W. ZEIL, Z. Naturforsch. **22a**, 1646 [1967].

Berechnung der Partialwellenphasen

Die Berechnung der Partialwellenphasen δ_l mittels der WBK-Methode erfolgt nach einem von HOERNI und IBERS³ angegebenen Verfahren. Hiernach werden die Integrale der Gl. (3) wie folgt aufgespalten:

$$\delta_r = I_1 - I_2 + I_3 = \int_{r_0(l)}^R G(r) dr - \int_{r_1(l)}^R G_0(r) dr + \int_R^\infty (G(r) - G_0(r)) dr, \quad (5)$$

wobei hier mit $G(r)$ und $G_0(r)$ die Integranden der Gl. (3) bezeichnet sind. Das Integral I_1 läßt sich numerisch berechnen, I_2 ist geschlossen auswertbar. Die Integrationsgrenze R wird so bestimmt, daß sich $G(r)$ und $G_0(r)$ an der Stelle $r=R$ nur noch um einen bestimmten Prozentsatz unterscheiden, in der vorliegenden Arbeit wurde R so gewählt, daß sich die Integranden bei $r=R$ nur noch um 10% unterscheiden. Für das Integral I_3 läßt sich schließlich eine Näherungsformel angeben. Man erhält nach einigen Umformungen für I_3 :

$$I_3 = -\frac{1}{2} \int_R^\infty \frac{U(r)}{G_0(r)} dr = \frac{Z}{a} \left\{ \sum_i a_i \int_R^\infty \frac{\exp(-b_i r)}{N} dr + \sum_j c_j \int_R^\infty \frac{r \cdot \exp(-d_j r)}{N} dr \right\} \quad (6)$$

mit $N = \sqrt{k^2 r^2 - (l + \frac{1}{2})^2}$, Z der Kernladungszahl des jeweiligen Atoms und a dem relativistischen Bohrschen Radius. Für die beiden Teilintegrale von I_3 gelangt man über eine Reihenentwicklung zu folgender Gleichung für I_3 :

$$I_3 = \frac{Z}{a k} \left[\sum_i a_i \{ K_0(u_i) - S(u_i, m) \} + \frac{l + \frac{1}{2}}{k} \sum_j c_j \{ K_1(v_j) - T(v_j, m) \} \right]. \quad (7)$$

Dabei haben $S(u_i, m)$ und $T(v_j, m)$ folgende Bedeutung:

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

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

$$u_i = b_i(l + \frac{1}{2})/k; v_j = d_j(l + \frac{1}{2})/k; m = \operatorname{arcosh} \frac{Rk}{l + \frac{1}{2}}.$$

K_0 und K_1 bedeuten die modifizierten Bessel-Funktionen zweiter Art, für deren Berechnung Näherungsformeln aus dem "Handbook of Mathematical Functions"²² benutzt worden sind.

Beachtet man nun, daß sich für große Werte von l $r_0(l) \approx r_1(l) \approx R$ ergibt, so kann man die Gln. (5) und (7) vereinfachen und erhält für die Partialwellenphasen δ_l folgende Näherung:

$$\delta_l \approx I_3 = \frac{Z}{a k} \left[\sum_i a_i K_0(u_i) + \frac{l + \frac{1}{2}}{k} \sum_j c_j K_1(v_j) \right]. \quad (8)$$

Diese Berechnungsmethode der numerischen Werte der δ_l ist sehr zeitraubend und aufwendig. Man kann aber aus den vorstehenden Formeln eine Näherungsmethode ableiten. Sind die Werte für die Partialwellenphasen klein, so kann man sie in Bornscher Näherung berechnen nach:

$$\delta_l^B = -\frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) (j_l(kr))^2 r^2 dr, \quad (9)$$

wobei $j_l(kr)$ die l -te sphärische Bessel-Funktion erster Art ist. Für diesen Ausdruck kann man aber näherungsweise Gl. (7) verwenden. Für große Werte von l geht Gl. (7) in (8) über, so daß man durch Anwendung der Gln. (7) und (8) eine einfache und schnelle Methode zur Berechnung der Werte von δ_l zur Verfügung hat. Für die hier gegebene Auswahl der Atome, deren komplexe Streufaktoren berechnet wurden, sind bei 40 und 120 kV Beschleunigungsspannung die Partialwellenphasen δ_l für $l=1$ bis $l=25$ sowohl nach Gl. (3) bzw. (5), als auch nach den Gln. (7) und (8) berechnet worden. Die Partialwellenphasen für $l \geq 26$ wurden nur nach den Gln. (7) und (8) ermittelt. In Tab. 1 sind für die Atome Wasserstoff, Argon und Krypton die Werte der δ_l nach Gl. (3) den Näherungswerten der Gl. (7) gegenübergestellt. Die Partialwellenphase für $l=0$, δ_0 , wurde in allen Fällen nach Gl. (3) bestimmt.

Ein Vergleich der nach den beiden genannten Formeln berechneten δ_l -Werte zeigt für Wasserstoff, daß die Werte für größere l ($l \geq 10$) erheblich voneinander abweichen und zwar so, daß die Näherungswerte immer höher liegen als die nach dem WBK-Verfahren berechneten Werte. Die Erklärung hierfür ist, daß, da die δ_l in diesem Fall sehr klein sind, die Integration der Gl. (3) bzw. (5) ungenaue Werte liefern muß, da die δ_l als Differenz zweier nahezu

²² Handbook of Mathematical Functions, NBS Applied Math. Series 55.

l	Wasserstoff				Argon				Krypton			
	40 kV		120 kV		40 kV		120 kV		40 kV		120 kV	
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b
0	0,08481	—	0,05082	—	1,3038	—	0,9554	—	2,4239	—	1,8059	—
1	0,06596	0,06889	0,04360	0,05121	0,9364	0,9505	0,7237	0,7353	1,7857	1,7426	1,3750	1,3669
2	0,05674	0,05893	0,03905	0,04485	0,7663	0,7775	0,6111	0,6224	1,4473	1,4021	1,1561	1,1434
3	0,05058	0,05238	0,03581	0,04067	0,6570	0,6670	0,5382	0,5491	1,2256	1,1852	1,0108	0,9989
4	0,04595	0,04750	0,03329	0,03755	0,5791	0,5869	0,4849	0,4953	1,0652	1,0286	0,9040	0,8930
5	0,04224	0,04362	0,03123	0,03505	0,5213	0,5247	0,4435	0,4530	0,9408	0,9081	0,8203	0,8100
6	0,03915	0,04039	0,02948	0,03298	0,4723	0,4743	0,4098	0,4184	0,8415	0,8116	0,7521	0,7422
7	0,03651	0,03764	0,02797	0,03121	0,4313	0,4323	0,3815	0,3892	0,7593	0,7323	0,6946	0,6852
8	0,03420	0,03525	0,02663	0,02966	0,3963	0,3967	0,3572	0,3641	0,6904	0,6655	0,6462	0,6363
9	0,03216	0,03313	0,02543	0,02829	0,3659	0,3658	0,3361	0,3422	0,6315	0,6084	0,6030	0,5937
10	0,03032	0,03124	0,02435	0,02706	0,3392	0,3388	0,3194	0,3227	0,5801	0,5589	0,5650	0,5562
12	0,02715	0,02797	0,02245	0,02492	0,2954	0,2940	0,2869	0,2896	0,4954	0,4768	0,5010	0,4931
14	0,02449	0,02523	0,02093	0,02310	0,2595	0,2583	0,2600	0,2622	0,4280	0,4113	0,4490	0,4416
16	0,02220	0,02288	0,01941	0,02153	0,2302	0,2293	0,2372	0,2391	0,3722	0,3579	0,4056	0,3988
18	0,02020	0,02084	0,01816	0,02015	0,2059	0,2053	0,2177	0,2193	0,3268	0,3139	0,3688	0,3623
20	0,01844	0,01905	0,01704	0,01892	0,1855	0,1851	0,2007	0,2021	0,2889	0,2772	0,3370	0,3308
22	0,01688	0,01746	0,01602	0,01781	0,1681	0,1678	0,1857	0,1871	0,2572	0,2465	0,3092	0,3033
24	0,01548	0,01603	0,01510	0,01680	0,1530	0,1529	0,1726	0,1739	0,2292	0,2206	0,2846	0,2791

Tab. 1. Gegenüberstellung der Partialwellenphasen δ_l für Wasserstoff, Argon und Krypton bei 40 und 120 kV Beschleunigungsspannung. a) Berechnet nach dem WBK-Verfahren, Gl. (3). b) Berechnet nach der Näherungsformel, Gl. (7) bzw. (8).

gleicher Größen gebildet werden. Bei den Werten für Argon liefern beide Methoden recht gut übereinstimmende Werte. Für Krypton liegen die Näherungswerte unter den WBK-Werten, was seine Erklärung im Einfluß des großen Atompotentials fin-

det, das bei der Berechnung nach Gl. (7) bzw. (8) nicht genügend berücksichtigt wird. Hier erhält man erst für große Werte von l ($l > 20$) befriedigende Übereinstimmung beider Berechnungsverfahren. Man kann daraus schließen, daß es sinnvoll sein wird,

l	a	b	c	d	e	f	g	h
0	1,3038	—	1,3228	1,2898	1,3314	1,3292	1,2967	1,3250
1	0,9364	0,9505	0,9550	0,9486	0,9627	0,9611	0,9549	0,9441
2	0,7663	0,7775	0,7802	0,7754	0,7867	0,7859	0,7836	0,7715
3	0,6570	0,6670	0,6678	0,6644	0,6735	0,6735	0,6725	0,6610
4	0,5791	0,5869	0,5863	0,582	0,5912	0,5921	0,5917	0,5808
5	0,5213	0,5247	0,5232	0,519	0,5275	0,5290	0,5291	0,5187
6	0,4723	0,4743	0,4722	0,468	0,4759	0,4780	0,4782	0,4685
7	0,4313	0,4324	0,4298		0,4332	0,4354	0,4358	
8	0,3963	0,3967	0,3939		0,3969	0,3993	0,3996	
9	0,3659	0,3658	0,3629		0,3656	0,3680	0,3683	
10	0,3392	0,3388	0,3359		0,3383	0,3408	0,3411	0,3339
11	0,3156	0,3151	0,3120		0,3142			
12	0,2954	0,2940	0,2808		0,2928			
13	0,2765	0,2752	0,2718		0,2737			
14	0,2595	0,2583	0,2547		0,2563			0,2536
15	0,2441	0,2431			0,2408			
16	0,2302	0,2293			0,2266			
17	0,2175	0,2168			0,2136			
18	0,2059	0,2053			0,2017			
19	0,1953	0,1948			0,1907			
20	0,1855	0,1851			0,1807			

Tab. 2. Gegenüberstellung der Partialwellenphasen δ_l für Argon bei 40 kV Beschleunigungsspannung. a) Diese Arbeit, berechnet nach Gln. (3), (7) und (8). b) Diese Arbeit, berechnet nach Gln. (7) und (8). c) J. KARLE u. R. A. BONHAM⁵. δ_l berechnet für Thomas-Fermi-Dirac-Potential nach der WBK-Methode. d) J. KARLE u. R. A. BONHAM⁵. δ_l berechnet für Thomas-Fermi-Dirac-Potential durch numerische Integration der Schrödinger-Gleichung. e) J. HAASE⁶. δ_l berechnet für Thomas-Fermi-Dirac-Potential nach der WBK-Methode. f) J. L. PEACHER u. J. G. WILLS¹². δ_l berechnet für Hartree-Fock-Potential nach der WBK-Methode. g) J. L. PEACHER u. J. G. WILLS¹². δ_l berechnet für Hartree-Fock-Potential durch numerische Integration der Schrödinger-Gleichung. h) M. KIMURA et al.¹¹. δ_l berechnet für Thomas-Fermi-Dirac-Potential nach einer Näherungsmethode, die der Gl. (8) dieser Arbeit entspricht.

beim Übergang von kleinen zu größeren Kernladungszahlen eine immer zunehmende Anzahl von WBK-Partialwellenphasen zur Berechnung der δ_l zu berücksichtigen und jeweils erst entsprechende Partialwellenphasen für große l -Werte nach den Näherungsformeln zu ermitteln. Das hat aber zur Folge, daß man für hohe Kernladungszahlen einen erheblichen Mehraufwand an Rechenzeit in Kauf nehmen muß.

In Tab. 2 werden die nach Gl. (3) und Gl. (8) ermittelten Werte für die δ_l für Argon (40 kV Beschleunigungsspannung) den Ergebnissen von KARLE und BONHAM⁵, PEACHER¹² und KIMURA et al.¹¹ gegenübergestellt. Dabei ist noch zu bemerken, daß KIMURA¹¹ zur Berechnung der Partialwellenphasen auch für kleine Werte von l nur die Gl. (8) verwendet haben. Die auftretenden Unterschiede in den Werten resultieren aus den verschiedenen Berechnungsmethoden.

Über die Genauigkeit der berechneten δ_l -Werte ist es sehr schwer eine Aussage zu machen, zumal durch die numerische Berechnung des ersten Integrals der Gl. (3) ein nicht einfach abzuschätzender Fehler in das Ergebnis eingebracht wird. Zur Veranschaulichung ist in Abb. 1 und 2 der Verlauf der beiden Integranden der Gl. (3) für die Atome Argon und Krypton für $l=0, 1, 2$ dargestellt. Der Flächeninhalt zwischen den beiden Kurven $G(r)$ und $G_0(r)$ stellt den Wert der jeweiligen Partialwellenphase δ_l dar. Man sieht, daß die Integration im Falle $l=0$ mit der größten Ungenauigkeit behaftet sein wird, da sich die Funktion $G(r)$ in der Nähe der Nullstelle dieser Funktion sehr stark ändert und daher auch bei der Integration, die ja mit einer endlichen Schrittweite durchgeführt werden muß, ein ziemlicher Fehler für den Wert von δ_0 berücksichtigt werden muß. Diese Ungenauigkeit tritt bei der späteren Berechnung der komplexen Streufaktoren nicht so sehr in den Vordergrund, da δ_0 nur einen kleinen Beitrag zu den Werten von $f(s)$ liefert.

Berechnung der komplexen Streufaktoren

Nachdem die Partialwellenphasen δ_l berechnet sind, werden die Beträge und Phasen der komplexen Streufaktoren nach Gl. (2) ermittelt. Zu diesem Zweck spaltet man die Gl. (2) in Real- und Imaginärteil auf und berechnet daraus die gewünschten

Größen. Man erhält dann:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2k} \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin(2\delta_l) P_l(\cos \vartheta) - i \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (\cos(2\delta_l) - 1) P_l(\cos \vartheta) \right\}. \quad (10)$$

Da nur endlich viele Partialwellenphasen δ_l berechnet werden können, in dieser Arbeit waren es 126 pro Atom, muß man für die beiden Teilsummen der Gl. (10) Konvergenzverbesserungen durchführen. Für den Realteil des Streufaktors kann man zu diesem Zweck wie folgt vorgehen:

Angenommen, die Partialwellenphasen sind bis zu einem Index $l=a$ berechnet worden, dann kann man die Summe, die den Realteil des Streufaktors darstellt, folgendermaßen aufspalten:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(f(\vartheta)) &= \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin(2\delta_l) P_l(\cos \vartheta) \\ &= \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^a (2l+1) \sin(2\delta_l) P_l(\cos \vartheta) \\ &\quad + \frac{1}{2k} \sum_{l=a+1}^{\infty} (2l+1) 2\delta_l P_l(\cos \vartheta). \end{aligned} \quad (11)$$

Dabei wird angenommen, daß vom Index $l=a+1$ ab die Partialwellenphasen δ_l schon so klein sind, daß $\sin(2\delta_l)$ durch das Argument ersetzt werden und daß $\delta_l \approx \delta_l^B$ gesetzt werden kann, wobei δ_l^B die Partialwellenphasen in Bornscher Näherung sein sollen. Aus Gl. (11) erhält man dann durch Hinzufügen und Abziehen von

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2k} \sum_{l=0}^a (2l+1) \cdot 2\delta_l^B P_l(\cos \vartheta): \\ \operatorname{Re}(f(\vartheta)) &= \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^a (2l+1) (\sin(2\delta_l) - 2\delta_l^B) P_l(\cos \vartheta) \\ &\quad + \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \delta_l^B P_l(\cos \vartheta). \end{aligned} \quad (12)$$

Die zweite Summe dieser Entwicklung stellt aber, wie man leicht zeigen kann, den Streufaktor des betreffenden Atoms in erster Bornscher Näherung dar, so daß man schließlich für den Realteil erhält:

$$\operatorname{Re}(f(\vartheta)) = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^a (2l+1) (\sin(2\delta_l) - 2\delta_l^B) P_l(\cos \vartheta) + f^B(\vartheta). \quad (13)$$

Die Streufaktoren kann man in erster Bornscher Näherung mit den hier verwendeten Ausdrücken für die Atompotentiale (vgl. Gl. (4)) wie folgt darstellen¹³, wenn man an Stelle der Winkelvariablen ϑ

die Variable $s = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\vartheta}{2}$ verwendet:

$$f^B(s) = \frac{2Z}{a} \left\{ \sum_i \frac{a_i}{b_i^2 + s^2} + 2 \sum_j \frac{c_j d_j}{(d_j^2 + s^2)^2} \right\}. \quad (14)$$

Für den Imaginärteil der Gl. (10) ist die Konvergenzkorrektur nicht ganz so einfach darstellbar. Zunächst jedoch spaltet man auch hier die zweite Summe der Gl. (10) in zwei Anteile auf:

$$\begin{aligned} \text{Im}(f(\vartheta)) &= \\ &- \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (\cos(2\delta_l) - 1) P_l(\cos \vartheta) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l P_l(\cos \vartheta) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^a (2l+1) \sin^2 \delta_l P_l(\cos \vartheta) \\ &+ \frac{1}{k} \sum_{l=a+1}^{\infty} (2l+1) \delta_l^2 P_l(\cos \vartheta). \end{aligned} \quad (15)$$

Durch Abziehen und Hinzufügen von

$$\frac{1}{k} \sum_{l=0}^a (2l+1) \delta_l^2 P_l(\cos \vartheta)$$

erhält man weiter

$$\begin{aligned} \text{Im}(f(\vartheta)) &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^a (2l+1) (\sin^2 \delta_l - \delta_l^2) P_l(\cos \vartheta) \\ &+ \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \delta_l^2 P_l(\cos \vartheta). \end{aligned} \quad (16)$$

Um den Korrekturterm der Gl. (16) geschlossen auswerten zu können, benutzt man für die Berechnung der Partialwellenphasen in diesem Ausdruck die Gl. (8), wobei man für die modifizierten Bessel-Funktionen K_0 und K_1 folgenden asymptotischen Ausdruck verwendet:

$$K_{0,1}(x) \approx \sqrt{\frac{2x}{\pi}} e^{-x}. \quad (17)$$

Diese Näherung, bei der höhere Glieder vernachlässigt worden sind, liefert für große Werte des Argumentes, das im vorliegenden Fall außer von den Potentialkonstanten und der Wellenzahl auch vom Index l abhängt, eine brauchbare Darstellung der gewünschten Partialwellenphasen. Für kleinere Werte von l weichen die so berechneten δ_l -Werte sehr stark von den nach dem WBK-Verfahren, oder den nach der Gl. (7) bzw. (8) ermittelten Werten ab. Diese Abweichung kann man aber kompensieren, wenn man im ersten Term der Gl. (16) für δ_l^2 ebenfalls die genäherten Werte verwendet, so daß in dem l -Bereich, in dem die im ersten Term abgezogenen

Größen durch die Glieder im zweiten Term wieder hinzugefügt werden. Diese Näherungswerte für die Partialwellenphasen sollen im folgenden mit $\bar{\delta}_l$ bezeichnet werden, so daß man für die Gl. (16) besser schreibt:

$$\begin{aligned} \text{Im}(f(\vartheta)) &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^a (2l+1) (\sin^2 \delta_l - \bar{\delta}_l^2) P_l(\cos \vartheta) \\ &+ \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \bar{\delta}_l^2 P_l(\cos \vartheta). \end{aligned} \quad (18)$$

Für die $\bar{\delta}_l$ hat man folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} \bar{\delta}_l &\approx \frac{Z}{ak\sqrt{2l+1}} \left\{ \sum_i a_i \sqrt{\frac{k\pi}{b_i}} \exp(-b_i(l + \frac{1}{2})/k) \right. \\ &\left. + \frac{l+\frac{1}{2}}{k} \sum_j c_j \sqrt{\frac{k\pi}{d_j}} \exp(-d_j(l + \frac{1}{2})/k) \right\}. \end{aligned} \quad (19)$$

Setzt man den Ausdruck für die $\bar{\delta}_l$ aus (19) in den zweiten Term der Gl. (18) ein und rechnet den Faktor der Legendre-Polynome $(2l+1) \bar{\delta}_l^2$ des Korrekturterms der Gl. (18) aus, so findet man, daß sich dafür folgende Form ergibt:

$$\begin{aligned} (2l+1) \bar{\delta}_l^2 &= \sum_m g_m(i, i') h_m^l(i, i') \\ &+ \sum_n (l + \frac{1}{2}) g_n(i, j) h_n^l(i, j) \\ &+ \sum_p (l + \frac{1}{2})^2 g_p(j, j') h_p^l(j, j'). \end{aligned} \quad (20)$$

Hierbei beziehen sich die Indizes i und i' auf die Potentialkonstanten a und b , die Indizes j und j' auf die Potentialkonstanten c und d . Für die Koeffizienten g und h ergeben sich folgende Ausdrücke:

$$\begin{aligned} g(i, i') &= \left(\frac{Z}{ak}\right)^2 \pi k a_i a_{i'} \sqrt{\exp(-(b_i + b_{i'})/k)/b_i b_{i'}}; \\ h(i, i') &= \exp(-(b_i + b_{i'})/k), \\ g(i, j) &= 2 \left(\frac{Z}{ak}\right)^2 \pi \cdot a_i c_j \sqrt{\exp(-(b_i + d_j)/k)/b_i d_j}; \\ h(i, j) &= \exp(-(b_i + d_j)/k), \\ g(j, j') &= \left(\frac{Z}{ak}\right)^2 \frac{\pi}{k} c_j c_{j'} \sqrt{\exp(-(d_j + d_{j'})/k)/d_j d_{j'}}; \\ h(j, j') &= \exp(-(d_j + d_{j'})/k). \end{aligned} \quad (21)$$

Damit erhält man schließlich für den Korrekturterm der Gl. (18)

$$\begin{aligned} &\frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \bar{\delta}_l^2 P_l(\cos \vartheta) \\ &= \frac{1}{k} \left\{ \sum_m g_m(i, i') \sum_{l=0}^{\infty} h_m^l(i, i') P_l(\cos \vartheta) \right. \\ &+ \sum_n g_n(i, j) \sum_{l=0}^{\infty} (l + \frac{1}{2}) h_n^l(i, j) P_l(\cos \vartheta) \\ &\left. + \sum_p g_p(j, j') \sum_{l=0}^{\infty} (l + \frac{1}{2})^2 h_p^l(j, j') P_l(\cos \vartheta) \right\}. \end{aligned} \quad (22)$$

Beachtet man weiterhin, daß sich die Legendre-Polynome erster Art mittels der erzeugenden Funktion $(1 - 2zr + r^2)^{-1/2}$ aus der Entwicklung

$$(1 - 2zr + r^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} r^n P_n(z)$$

ergeben²³, so kann man die Summation über l ausführen und erhält für den Korrekturterm

$$\begin{aligned} & \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \bar{\delta}_l^2 P_l(\cos \vartheta) \\ &= \frac{1}{k} \left\{ \sum_m g_m(i, i') \cdot F(h_m(i, i')) \right. \\ &+ \sum_n g_n(i, j) [h_n(i, j) F'(h_n(i, j)) + \frac{1}{2} F(h_n(i, j))] \\ &+ \sum_p g_p(j, j') [h_p^2(j, j') F''(h_p(j, j')) \\ &+ 2h_p(j, j') \cdot F'(h_p(j, j')) + \frac{1}{4} F(h_p(j, j'))] \left. \right\}, \end{aligned} \quad (23)$$

wobei $F(h) = (1 - 2h \cos \vartheta + h^2)^{-1/2}$ ist. Die gestrichelten Funktionen $F'(h)$ und $F''(h)$ bedeuten die Ableitungen von F nach dem entsprechend indizierten h .

Ergebnisse

In den Tabellen 3(a–f) und 4(a–f) sind die Ergebnisse der Berechnung der komplexen Streufaktoren für Wasserstoff, Fluor, Chlor, Argon, Kobalt und Krypton für Beschleunigungsspannungen von 40, 60, 80, 100 und 120 kV zusammengestellt. Zu den Beträgen der Streufaktoren sind jeweils noch die Streuamplituden in erster Bornscher Näherung angegeben. Da bei der Auswertung von Elektronenbeugungsdiagrammen freier Moleküle im allgemeinen die Variable $s = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\vartheta}{2}$ verwendet wird, wurden die einzelnen Streufaktoren gleich in Abhängigkeit von s , an Stelle wie üblich in Abhängigkeit vom Beugungswinkel ϑ berechnet.

Zur Berechnung der Streufaktoren wurden jeweils 126 Partialwellenphasen δ_l verwendet, von denen nur die erste nach der WBK-Methode, alle anderen nach den Gln. (7) bzw. (8) ermittelt wurden. Die Berechnung erfolgte auf der Rechenanlage IBM 7094 des Deutschen Rechenzentrums in Darmstadt. Zur

s	$U_B = 40 \text{ kV}$		$U_B = 60 \text{ kV}$		$U_B = 80 \text{ kV}$		$U_B = 100 \text{ kV}$		$U_B = 120 \text{ kV}$	
	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $
0	0,5706	0,5705	0,5913	0,5912	0,6120	0,6119	0,6327	0,6326	0,6534	0,6533
2	0,3970	0,3969	0,4114	0,4114	0,4258	0,4258	0,4402	0,4402	0,4546	0,4546
4	0,1980	0,1980	0,2052	0,2052	0,2124	0,2124	0,2196	0,2196	0,2268	0,2268
6	0,1041	0,1040	0,1078	0,1078	0,1116	0,1116	0,1154	0,1154	0,1192	0,1192
8	0,0616	0,0616	0,0638	0,0638	0,0660	0,0660	0,0683	0,0683	0,0705	0,0705
10	0,0401	0,0401	0,0416	0,0416	0,0430	0,0430	0,0445	0,0445	0,0459	0,0459
12	0,0281	0,0281	0,0291	0,0291	0,0301	0,0301	0,0311	0,0311	0,0321	0,0321
14	0,0207	0,0207	0,0214	0,0214	0,0222	0,0222	0,0229	0,0229	0,0237	0,0237
16	0,0159	0,0159	0,0165	0,0165	0,0170	0,0170	0,0176	0,0176	0,0182	0,0182
18	0,0126	0,0126	0,0130	0,0130	0,0135	0,0135	0,0139	0,0139	0,0144	0,0144
20	0,0102	0,0102	0,0105	0,0105	0,0109	0,0109	0,0113	0,0113	0,0117	0,0117
22	0,0084	0,0084	0,0087	0,0087	0,0090	0,0090	0,0093	0,0093	0,0096	0,0096
24	0,0071	0,0071	0,0073	0,0073	0,0076	0,0076	0,0078	0,0078	0,0081	0,0081
26	0,0060	0,0060	0,0062	0,0062	0,0065	0,0065	0,0067	0,0067	0,0069	0,0069
28	0,0052	0,0052	0,0054	0,0054	0,0056	0,0056	0,0058	0,0058	0,0060	0,0060
30	0,0045	0,0045	0,0047	0,0047	0,0049	0,0049	0,0050	0,0050	0,0052	0,0052
32	0,0040	0,0040	0,0041	0,0041	0,0043	0,0043	0,0044	0,0044	0,0046	0,0046
34	0,0035	0,0035	0,0037	0,0037	0,0038	0,0038	0,0039	0,0039	0,0040	0,0040
36	0,0031	0,0031	0,0033	0,0033	0,0034	0,0034	0,0035	0,0035	0,0036	0,0036
38	0,0028	0,0028	0,0029	0,0029	0,0030	0,0030	0,0031	0,0031	0,0032	0,0032
40	0,0025	0,0025	0,0026	0,0026	0,0027	0,0027	0,0028	0,0028	0,0029	0,0029
42	0,0023	0,0023	0,0024	0,0024	0,0025	0,0025	0,0026	0,0026	0,0026	0,0026
44	0,0021	0,0021	0,0022	0,0022	0,0023	0,0023	0,0023	0,0023	0,0024	0,0024
46	0,0019	0,0019	0,0020	0,0020	0,0021	0,0021	0,0021	0,0021	0,0022	0,0022
48	0,0018	0,0018	0,0018	0,0018	0,0019	0,0019	0,0020	0,0020	0,0020	0,0020
50	0,0016	0,0016	0,0017	0,0017	0,0017	0,0017	0,0018	0,0018	0,0019	0,0019
52	0,0015	0,0015	0,0016	0,0016	0,0016	0,0016	0,0017	0,0017	0,0017	0,0017
54	0,0014	0,0014	0,0015	0,0015	0,0015	0,0015	0,0015	0,0015	0,0016	0,0016
56	0,0013	0,0013	0,0014	0,0014	0,0014	0,0014	0,0014	0,0014	0,0015	0,0015
58	0,0012	0,0012	0,0013	0,0013	0,0013	0,0013	0,0013	0,0013	0,0014	0,0014

Tab. 3 a. Beträge der Streufaktoren $|f(s)|$ für Wasserstoff. $f_B(s)$ sind die Streufaktoren in erster Bornscher Näherung.

²³ JAHNKE-EMDE-LÖSCH, Tafeln höherer Funktionen, B. G. Teubner, Stuttgart 1960.

s	$U_B = 40 \text{ kV}$		$U_B = 60 \text{ kV}$		$U_B = 80 \text{ kV}$		$U_B = 100 \text{ kV}$		$U_B = 120 \text{ kV}$	
	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $
0	1,9402	1,9256	2,0106	1,9999	2,0809	2,0722	2,1513	2,1438	2,2217	2,2149
2	1,6222	1,6087	1,6810	1,6712	1,7399	1,7318	1,7987	1,7917	1,8576	1,8513
4	1,0750	1,0642	1,1140	1,1061	1,1530	1,1466	1,1920	1,1864	1,2310	1,2260
6	0,6748	0,6671	0,6993	0,6937	0,7238	0,7192	0,7483	0,7443	0,7728	0,7691
8	0,4357	0,4305	0,4515	0,4477	0,4673	0,4642	0,4831	0,4804	0,4989	0,4965
10	0,2959	0,2936	0,3066	0,3042	0,3173	0,3154	0,3281	0,3264	0,3388	0,3373
12	0,2116	0,2096	0,2193	0,2178	0,2269	0,2257	0,2346	0,2335	0,2423	0,2413
14	0,1583	0,1571	0,1641	0,1631	0,1698	0,1690	0,1756	0,1749	0,1813	0,1807
16	0,1230	0,1223	0,1275	0,1269	0,1320	0,1315	0,1364	0,1360	0,1409	0,1405
18	0,0986	0,0981	0,1021	0,1017	0,1057	0,1054	0,1093	0,1090	0,1129	0,1126
20	0,0809	0,0806	0,0838	0,0836	0,0868	0,0865	0,0897	0,0895	0,0926	0,0924
22	0,0677	0,0675	0,0702	0,0700	0,0726	0,0725	0,0751	0,0749	0,0776	0,0774
24	0,0576	0,0574	0,0597	0,0595	0,0618	0,0616	0,0639	0,0637	0,0659	0,0658
26	0,0496	0,0495	0,0514	0,0513	0,0532	0,0531	0,0550	0,0549	0,0568	0,0567
28	0,0432	0,0432	0,0448	0,0447	0,0464	0,0463	0,0479	0,0478	0,0495	0,0494
30	0,0380	0,0380	0,0394	0,0393	0,0407	0,0407	0,0421	0,0421	0,0435	0,0434
32	0,0337	0,0337	0,0349	0,0348	0,0361	0,0361	0,0373	0,0373	0,0385	0,0385
34	0,0300	0,0300	0,0311	0,0311	0,0322	0,0322	0,0333	0,0333	0,0344	0,0344
36	0,0270	0,0270	0,0279	0,0279	0,0289	0,0289	0,0299	0,0299	0,0309	0,0309
38	0,0243	0,0243	0,0252	0,0252	0,0261	0,0261	0,0270	0,0270	0,0279	0,0278
40	0,0221	0,0221	0,0229	0,0229	0,0237	0,0237	0,0245	0,0245	0,0253	0,0252
42	0,0201	0,0202	0,0208	0,0208	0,0216	0,0216	0,0223	0,0223	0,0230	0,0230
44	0,0184	0,0185	0,0191	0,0191	0,0197	0,0197	0,0204	0,0204	0,0210	0,0210
46	0,0169	0,0170	0,0175	0,0175	0,0181	0,0181	0,0187	0,0187	0,0193	0,0193
48	0,0155	0,0156	0,0161	0,0161	0,0167	0,0167	0,0172	0,0172	0,0178	0,0178
50	0,0144	0,0144	0,0149	0,0149	0,0154	0,0154	0,0159	0,0159	0,0164	0,0164
52	0,0133	0,0134	0,0138	0,0138	0,0143	0,0143	0,0148	0,0148	0,0152	0,0152
54	0,0124	0,0125	0,0128	0,0129	0,0133	0,0133	0,0137	0,0137	0,0142	0,0142
56	0,0115	0,0116	0,0119	0,0120	0,0124	0,0124	0,0128	0,0128	0,0132	0,0132
58	0,0108	0,0108	0,0111	0,0112	0,0115	0,0116	0,0119	0,0119	0,0123	0,0123

Tab. 3 b. Beträge der Streufaktoren $|f(s)|$ für Fluor. $f_B(s)$ sind die Streufaktoren in erster Bornscher Näherung.

s	$U_B = 40 \text{ kV}$		$U_B = 60 \text{ kV}$		$U_B = 80 \text{ kV}$		$U_B = 100 \text{ kV}$		$U_B = 120 \text{ kV}$	
	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $
0	5,3130	5,2219	5,5057	5,4379	5,6985	5,6424	5,8912	5,8423	6,0839	6,0396
2	3,8185	3,7390	3,9570	3,8977	4,0956	4,0465	4,2341	4,1911	4,3726	4,3337
4	1,9765	1,9230	2,0482	2,0079	2,1200	2,0864	2,1916	2,1622	2,2633	2,2365
6	1,0768	1,0470	1,1159	1,0929	1,1549	1,1356	1,1940	1,1768	1,2330	1,2172
8	0,6793	0,6631	0,7040	0,6910	0,7286	0,7175	0,7533	0,7433	0,7779	0,7687
10	0,4793	0,4697	0,4967	0,4886	0,5141	0,5069	0,5315	0,5250	0,5489	0,5428
12	0,3610	0,3549	0,3741	0,3687	0,3872	0,3823	0,4003	0,3957	0,4134	0,4090
14	0,2823	0,2785	0,2926	0,2890	0,3028	0,2994	0,3131	0,3098	0,3233	0,3201
16	0,2263	0,2242	0,2345	0,2322	0,2427	0,2404	0,2509	0,2487	0,2591	0,2569
18	0,1847	0,1838	0,1914	0,1901	0,1981	0,1967	0,2048	0,2034	0,2115	0,2101
20	0,1530	0,1531	0,1586	0,1581	0,1642	0,1634	0,1697	0,1688	0,1753	0,1744
22	0,1285	0,1292	0,1332	0,1333	0,1378	0,1376	0,1425	0,1421	0,1472	0,1466
24	0,1092	0,1104	0,1132	0,1137	0,1171	0,1173	0,1211	0,1211	0,1250	0,1249
26	0,0938	0,0953	0,0972	0,0980	0,1006	0,1010	0,1040	0,1042	0,1074	0,1075
28	0,0814	0,0830	0,0843	0,0853	0,0873	0,0879	0,0902	0,0906	0,0932	0,0935
30	0,0712	0,0730	0,0738	0,0749	0,0764	0,0771	0,0790	0,0795	0,0815	0,0819
32	0,0628	0,0646	0,0651	0,0663	0,0674	0,0682	0,0697	0,0703	0,0720	0,0724
34	0,0559	0,0577	0,0579	0,0590	0,0599	0,0607	0,0619	0,0626	0,0640	0,0645
36	0,0500	0,0517	0,0518	0,0530	0,0536	0,0545	0,0554	0,0561	0,0572	0,0578
38	0,0420	0,0467	0,0466	0,0478	0,0483	0,0491	0,0499	0,0505	0,0515	0,0521
40	0,0407	0,0423	0,0422	0,0433	0,0437	0,0445	0,0452	0,0458	0,0466	0,0471
42	0,0371	0,0385	0,0384	0,0394	0,0397	0,0405	0,0411	0,0417	0,0424	0,0429
44	0,0339	0,0352	0,0351	0,0361	0,0363	0,0371	0,0376	0,0381	0,0388	0,0393
46	0,0311	0,0324	0,0322	0,0331	0,0333	0,0340	0,0345	0,0350	0,0356	0,0361
48	0,0286	0,0298	0,0297	0,0305	0,0307	0,0314	0,0317	0,0323	0,0328	0,0332
50	0,0264	0,0276	0,0274	0,0282	0,0284	0,0290	0,0293	0,0298	0,0303	0,0307
52	0,0245	0,0255	0,0254	0,0262	0,0263	0,0269	0,0272	0,0277	0,0281	0,0285
54	0,0228	0,0237	0,0236	0,0243	0,0244	0,0250	0,0253	0,0257	0,0261	0,0265
56	0,0212	0,0221	0,0220	0,0227	0,0228	0,0233	0,0236	0,0240	0,0243	0,0247
58	0,0199	0,0206	0,0206	0,0212	0,0213	0,0218	0,0220	0,0224	0,0227	0,0231

Tab. 3 c. Beträge der Streufaktoren $|f(s)|$ für Chlor. $f_B(s)$ sind die Streufaktoren in erster Bornscher Näherung.

s	$U_B = 40 \text{ kV}$		$U_B = 60 \text{ kV}$		$U_B = 80 \text{ kV}$		$U_B = 100 \text{ kV}$		$U_B = 120 \text{ kV}$	
	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $
0	5,0287	4,9282	5,2112	5,1361	5,3936	5,3315	5,5760	5,5217	5,7584	5,7091
2	3,7859	3,6965	3,9232	3,8564	4,0605	4,0052	4,1979	4,1494	4,3352	4,2912
4	2,0861	2,0231	2,1618	2,1143	2,2374	2,1979	2,3131	2,2784	2,3888	2,3571
6	1,1588	1,1221	1,2008	1,1726	1,2429	1,2191	1,2849	1,2639	1,3269	1,3076
8	0,7240	0,7044	0,7503	0,7346	0,7766	0,7631	0,8028	0,7908	0,8291	0,8179
10	0,5042	0,4934	0,5225	0,5134	0,5408	0,5327	0,5591	0,5517	0,5774	0,5705
12	0,3772	0,3709	0,3909	0,3851	0,4046	0,3993	0,4182	0,4133	0,4319	0,4272
14	0,2946	0,2910	0,3053	0,3016	0,3160	0,3125	0,3267	0,3233	0,3374	0,3340
16	0,2365	0,2347	0,2451	0,2429	0,2537	0,2514	0,2623	0,2600	0,2709	0,2685
18	0,1936	0,1931	0,2007	0,1995	0,2077	0,2063	0,2147	0,2132	0,2217	0,2202
20	0,1609	0,1614	0,1668	0,1664	0,1726	0,1719	0,1784	0,1776	0,1843	0,1834
22	0,1355	0,1366	0,1404	0,1407	0,1453	0,1452	0,1502	0,1499	0,1551	0,1546
24	0,1153	0,1170	0,1195	0,1203	0,1237	0,1240	0,1279	0,1280	0,1321	0,1320
26	0,0992	0,1012	0,1028	0,1039	0,1064	0,1070	0,1100	0,1104	0,1136	0,1138
28	0,0862	0,0883	0,0893	0,0906	0,0924	0,0932	0,0955	0,0961	0,0987	0,0991
30	0,0755	0,0777	0,0782	0,0796	0,0809	0,0819	0,0837	0,0844	0,0864	0,0869
32	0,0666	0,0689	0,0690	0,0705	0,0714	0,0725	0,0738	0,0746	0,0763	0,0768
34	0,0592	0,0615	0,0613	0,0629	0,0635	0,0646	0,0656	0,0665	0,0678	0,0685
36	0,0530	0,0552	0,0549	0,0564	0,0568	0,0579	0,0587	0,0596	0,0607	0,0614
38	0,0477	0,0498	0,0494	0,0509	0,0511	0,0522	0,0529	0,0537	0,0546	0,0553
40	0,0431	0,0452	0,0447	0,0461	0,0463	0,0474	0,0478	0,0487	0,0494	0,0501
42	0,0392	0,0411	0,0407	0,0420	0,0421	0,0431	0,0435	0,0444	0,0449	0,0456
44	0,0358	0,0376	0,0372	0,0384	0,0385	0,0395	0,0398	0,0406	0,0411	0,0417
46	0,0329	0,0345	0,0341	0,0353	0,0353	0,0362	0,0365	0,0372	0,0377	0,0383
48	0,0303	0,0318	0,0314	0,0325	0,0325	0,0334	0,0336	0,0343	0,0347	0,0353
50	0,0280	0,0294	0,0290	0,0301	0,0300	0,0309	0,0310	0,0317	0,0320	0,0326
52	0,0259	0,0272	0,0269	0,0279	0,0278	0,0286	0,0287	0,0294	0,0297	0,0302
54	0,0241	0,0253	0,0250	0,0259	0,0258	0,0266	0,0267	0,0273	0,0276	0,0281
56	0,0225	0,0236	0,0233	0,0241	0,0241	0,0248	0,0249	0,0255	0,0257	0,0262
58	0,0210	0,0220	0,0217	0,0226	0,0225	0,0232	0,0233	0,0238	0,0240	0,0245

Tab. 3 d. Beträge der Streufaktoren $|f(s)|$ für Argon. $f_B(s)$ sind die Streufaktoren in erster Bornscher Näherung.

s	$U_B = 40 \text{ kV}$		$U_B = 60 \text{ kV}$		$U_B = 80 \text{ kV}$		$U_B = 100 \text{ kV}$		$U_B = 120 \text{ kV}$	
	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $
0	7,7432	7,4642	8,0241	7,8112	8,1687	7,9987	8,4450	8,2950	8,7212	8,5846
2	4,6220	4,3911	4,7897	4,6134	4,8423	4,7013	5,0060	4,8817	5,1698	5,0564
4	2,5761	2,4095	2,6695	2,5421	2,6885	2,5864	2,7794	2,6894	2,8703	2,7882
6	1,6623	1,5404	1,7226	1,6287	1,7406	1,6645	1,7995	1,7323	1,8583	1,7971
8	1,1242	1,0387	1,1650	1,0986	1,1823	1,1276	1,2223	1,1737	1,2623	1,2177
10	0,7882	0,7317	0,8168	0,7725	0,8321	0,7950	0,8603	0,8271	0,8884	0,8577
12	0,5749	0,5399	0,5957	0,5676	0,6088	0,5847	0,6293	0,6078	0,6499	0,6299
14	0,4360	0,4158	0,4519	0,4351	0,4629	0,4478	0,4785	0,4648	0,4942	0,4815
16	0,3426	0,3318	0,3551	0,3456	0,3644	0,3555	0,3767	0,3681	0,3890	0,3809
18	0,2773	0,2723	0,2873	0,2824	0,2953	0,2903	0,3053	0,3003	0,3153	0,3101
20	0,2298	0,2283	0,2381	0,2361	0,2450	0,2423	0,2533	0,2506	0,2616	0,2586
22	0,1940	0,1948	0,2010	0,2009	0,2070	0,2059	0,2140	0,2127	0,2210	0,2196
24	0,1661	0,1684	0,1722	0,1733	0,1775	0,1776	0,1835	0,1831	0,1895	0,1889
26	0,1440	0,1470	0,1492	0,1512	0,1539	0,1549	0,1591	0,1595	0,1643	0,1643
28	0,1260	0,1297	0,1306	0,1332	0,1347	0,1363	0,1393	0,1404	0,1438	0,1444
30	0,1111	0,1152	0,1152	0,1181	0,1189	0,1209	0,1229	0,1244	0,1269	0,1280
32	0,0987	0,1030	0,1023	0,1055	0,1056	0,1080	0,1029	0,1109	0,1127	0,1142
34	0,0882	0,0925	0,0914	0,0949	0,0944	0,0970	0,0976	0,0996	0,1008	0,1024
36	0,0792	0,0836	0,0821	0,0857	0,0848	0,0875	0,0877	0,0899	0,0905	0,0923
38	0,0715	0,0758	0,0741	0,0777	0,0765	0,0794	0,0791	0,0815	0,0817	0,0836
40	0,0648	0,0691	0,0672	0,0708	0,0694	0,0724	0,0718	0,0742	0,0741	0,0762
42	0,0590	0,0631	0,0611	0,0648	0,0632	0,0662	0,0653	0,0678	0,0675	0,0697
44	0,0539	0,0579	0,0559	0,0594	0,0578	0,0607	0,0597	0,0623	0,0617	0,0638
46	0,0495	0,0533	0,0513	0,0548	0,0530	0,0560	0,0548	0,0573	0,0566	0,0587
48	0,0445	0,0491	0,0472	0,0506	0,0488	0,0517	0,0504	0,0529	0,0521	0,0543
50	0,0420	0,0445	0,0436	0,0468	0,0450	0,0478	0,0466	0,0490	0,0481	0,0503
52	0,0389	0,0422	0,0403	0,0435	0,0417	0,0444	0,0431	0,0455	0,0445	0,0467
54	0,0361	0,0392	0,0375	0,0405	0,0387	0,0414	0,0400	0,0424	0,0414	0,0434
56	0,0337	0,0365	0,0349	0,0377	0,0361	0,0386	0,0373	0,0395	0,0385	0,0405
58	0,0314	0,0341	0,0325	0,0353	0,0357	0,0361	0,0348	0,0369	0,0359	0,0379

Tab. 3 e. Beträge der Streufaktoren $|f(s)|$ für Kobalt. $f_B(s)$ sind die Streufaktoren in erster Bornscher Näherung.

s	$U_B = 40 \text{ kV}$		$U_B = 60 \text{ kV}$		$U_B = 80 \text{ kV}$		$U_B = 100 \text{ kV}$		$U_B = 120 \text{ kV}$	
	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $	$f_B(s)$	$ f(s) $
0	7,9320	7,4867	8,2197	7,8708	8,5075	8,2110	8,7952	8,5313	9,0829	8,8408
2	5,7016	5,3043	5,9085	5,5968	6,1153	5,8504	6,3221	6,0862	6,5289	6,3124
4	3,0989	2,8079	3,2113	2,9823	3,3237	3,1287	3,4361	3,2623	3,5485	3,3889
6	1,8744	1,6739	1,9424	1,7836	2,0104	1,8746	2,0784	1,9570	2,1463	2,0348
8	1,2911	1,1463	1,3380	1,2224	1,3848	1,2854	1,4316	1,3423	1,4785	1,3959
10	0,9535	0,8450	0,9881	0,9010	1,0227	0,9476	1,0572	0,9895	1,0918	1,0289
12	0,7296	0,6487	0,7560	0,6908	0,7825	0,7261	0,8090	0,7581	0,8354	0,7881
14	0,5711	0,5126	0,5918	0,5446	0,6126	0,5712	0,6333	0,5958	0,6540	0,6193
16	0,4556	0,4154	0,4722	0,4396	0,4887	0,4599	0,5052	0,4787	0,5217	0,4969
18	0,3699	0,3442	0,3834	0,3623	0,3968	0,3781	0,4102	0,3927	0,4236	0,4067
20	0,3055	0,2907	0,3165	0,3044	0,3276	0,3166	0,3387	0,3283	0,3498	0,3395
22	0,2562	0,2493	0,2655	0,2600	0,2748	0,2695	0,2841	0,2789	0,2934	0,2882
24	0,2180	0,2165	0,2259	0,2252	0,2339	0,2328	0,2418	0,2402	0,2497	0,2480
26	0,1879	0,1901	0,1948	0,1974	0,2016	0,2036	0,2084	0,2097	0,2152	0,2158
28	0,1638	0,1685	0,1698	0,1747	0,1757	0,1798	0,1817	0,1851	0,1876	0,1901
30	0,1442	0,1505	0,1495	0,1559	0,1547	0,1602	0,1599	0,1647	0,1652	0,1692
32	0,1281	0,1351	0,1327	0,1401	0,1374	0,1439	0,1420	0,1476	0,1466	0,1517
34	0,1145	0,1218	0,1187	0,1266	0,1228	0,1300	0,1270	0,1332	0,1311	0,1367
36	0,1031	0,1103	0,1068	0,1151	0,1105	0,1181	0,1143	0,1211	0,1180	0,1239
38	0,0933	0,1004	0,0966	0,1050	0,1000	0,1078	0,1034	0,1105	0,1068	0,1130
40	0,0848	0,0917	0,0879	0,0962	0,0909	0,0988	0,0940	0,1011	0,0971	0,1036
42	0,0774	0,0839	0,0802	0,0884	0,0830	0,0909	0,0858	0,0930	0,0886	0,0953
44	0,0709	0,0770	0,0735	0,0814	0,0761	0,0838	0,0787	0,0859	0,0812	0,0878
46	0,0652	0,0707	0,0676	0,0752	0,0700	0,0776	0,0723	0,0795	0,0747	0,0812
48	0,0602	0,0652	0,0624	0,0697	0,0642	0,0720	0,0667	0,0737	0,0689	0,0754
50	0,0557	0,0602	0,0577	0,0647	0,0597	0,0669	0,0617	0,0685	0,0638	0,0702
52	0,0517	0,0557	0,0535	0,0602	0,0554	0,0623	0,0573	0,0639	0,0591	0,0655
54	0,0480	0,0516	0,0498	0,0561	0,0515	0,0582	0,0533	0,0598	0,0550	0,0611
56	0,0448	0,0478	0,0464	0,0523	0,0480	0,0544	0,0496	0,0559	0,0513	0,0572
58	0,0418	0,0444	0,0433	0,0489	0,0449	0,0510	0,0464	0,0524	0,0479	0,0537

Tab. 3 f. Beträge der Streufaktoren $|f(s)|$ für Krypton. $f_B(s)$ sind die Streufaktoren in erster Bornscher Näherung.

s	$U_B=40 \text{ kV}$	$U_B=60 \text{ kV}$	$U_B=80 \text{ kV}$	$U_B=100 \text{ kV}$	$U_B=120 \text{ kV}$	s	$U_B=40 \text{ kV}$	$U_B=60 \text{ kV}$	$U_B=80 \text{ kV}$	$U_B=100 \text{ kV}$	$U_B=120 \text{ kV}$
0	0,0114	0,0096	0,0085	0,0078	0,0073	0	0,0874	0,0734	0,0652	0,0598	0,0559
2	0,0152	0,0127	0,0113	0,0103	0,0096	2	0,1009	0,0847	0,0753	0,0690	0,0645
4	0,0248	0,0207	0,0184	0,0169	0,0158	4	0,1382	0,1159	0,1030	0,0944	0,0882
6	0,0363	0,0303	0,0269	0,0247	0,0230	6	0,1911	0,1603	0,1423	0,1304	0,1218
8	0,0468	0,0392	0,0347	0,0318	0,0297	8	0,2511	0,2104	0,1868	0,1711	0,1598
10	0,0557	0,0466	0,0414	0,0379	0,0353	10	0,3110	0,2605	0,2312	0,2117	0,1978
12	0,0632	0,0528	0,0469	0,0429	0,0401	12	0,3668	0,3071	0,2725	0,2495	0,2331
14	0,0695	0,0581	0,0515	0,0472	0,0441	14	0,4167	0,3487	0,3093	0,2832	0,2645
16	0,0749	0,0626	0,0555	0,0507	0,0474	16	0,4606	0,3854	0,3417	0,3128	0,2922
18	0,0796	0,0665	0,0590	0,0539	0,0503	18	0,4992	0,4175	0,3702	0,3388	0,3164
20	0,0838	0,0699	0,0620	0,0568	0,0529	20	0,5335	0,4461	0,3954	0,3618	0,3379
22	0,0875	0,0731	0,0647	0,0592	0,0554	22	0,5644	0,4718	0,4180	0,3825	0,3571
24	0,0909	0,0758	0,0672	0,0614	0,0574	24	0,5926	0,4951	0,4387	0,4013	0,3747
26	0,0940	0,0784	0,0694	0,0634	0,0592	26	0,6186	0,5167	0,4576	0,4186	0,3909
28	0,0969	0,0807	0,0714	0,0654	0,0609	28	0,6429	0,5368	0,4753	0,4347	0,4059
30	0,0995	0,0828	0,0733	0,0671	0,0626	30	0,6657	0,5557	0,4919	0,4498	0,4199
32	0,1019	0,0848	0,0750	0,0685	0,0641	32	0,6873	0,5735	0,5076	0,4641	0,4332
34	0,1042	0,0867	0,0766	0,0700	0,0653	34	0,7078	0,5904	0,5225	0,4776	0,4458
36	0,1063	0,0883	0,0780	0,0714	0,0664	36	0,7273	0,6066	0,5366	0,4905	0,4579
38	0,1083	0,0899	0,0794	0,0726	0,0676	38	0,7460	0,6220	0,5502	0,5028	0,4693
40	0,1101	0,0914	0,0808	0,0737	0,0688	40	0,7640	0,6368	0,5631	0,5145	0,4802
42	0,1119	0,0928	0,0819	0,0747	0,0698	42	0,7813	0,6511	0,5756	0,5258	0,4907
44	0,1135	0,0940	0,0829	0,0758	0,0705	44	0,7980	0,6648	0,5875	0,5367	0,5009
46	0,1151	0,0953	0,0840	0,0767	0,0713	46	0,8141	0,6779	0,5990	0,5471	0,5106
48	0,1165	0,0964	0,0850	0,0775	0,0722	48	0,8296	0,6907	0,6101	0,5571	0,5199
50	0,1179	0,0974	0,0858	0,0782	0,0730	50	0,8447	0,7030	0,6209	0,5669	0,5289
52	0,1192	0,0984	0,0867	0,0790	0,0736	52	0,8592	0,7149	0,6312	0,5762	0,5377
54	0,1204	0,0994	0,0875	0,0798	0,0741	54	0,8734	0,7265	0,6412	0,5852	0,5461
56	0,1216	0,1002	0,0882	0,0803	0,0747	56	0,8871	0,7376	0,6509	0,5940	0,5543
58	0,1227	0,1011	0,0888	0,0808	0,0745	58	0,9005	0,7485	0,6603	0,6025	0,5621

Tab. 4 a. Phasen $\eta(s)$ der Streufaktoren für Wasserstoff.

Tab. 4 b. Phasen $\eta(s)$ der Streufaktoren für Fluor.

s	$U_B=40\text{ kV}$	$U_B=60\text{ kV}$	$U_B=80\text{ kV}$	$U_B=100\text{ kV}$	$U_B=120\text{ kV}$
0	0,1257	0,1058	0,0941	0,0863	0,0808
2	0,1642	0,1381	0,1228	0,1125	0,1052
4	0,2703	0,2268	0,2014	0,1844	0,1722
6	0,4053	0,3396	0,3013	0,2757	0,2573
8	0,5247	0,4395	0,3899	0,3568	0,3331
10	0,6183	0,5179	0,4593	0,4204	0,3926
12	0,6954	0,5828	0,5168	0,4728	0,4413
14	0,7642	0,6407	0,5685	0,5201	0,4851
16	0,8284	0,6950	0,6168	0,5646	0,5268
18	0,8893	0,7467	0,6627	0,6067	0,5667
20	0,9473	0,7959	0,7068	0,6468	0,6042
22	1,0023	0,8428	0,7488	0,6854	0,6398
24	1,0544	0,8872	0,7885	0,7222	0,6741
26	1,1035	0,9291	0,8259	0,7566	0,7069
28	1,1497	0,9685	0,8614	0,7888	0,7375
30	1,1931	1,0056	0,8947	0,8194	0,7657
32	1,2339	1,0404	0,9257	0,8483	0,7923
34	1,2723	1,0730	0,9550	0,8752	0,8179
36	1,3084	1,1037	0,9826	0,9002	0,8420
38	1,3425	1,1327	1,0085	0,9240	0,8642
40	1,3747	1,1600	1,0328	0,9467	0,8847
42	1,4054	1,1858	1,0506	0,9679	0,9046
44	1,4346	1,2104	1,0780	0,9878	0,9239
46	1,4625	1,2338	1,0988	1,0068	0,9421
48	1,4892	1,2561	1,1187	1,0252	0,9589
50	1,5149	1,2776	1,1378	1,0428	0,9748
52	1,5397	1,2981	1,1562	1,0593	0,9907
54	1,5636	1,3179	1,1737	1,0752	1,0062
56	1,5867	1,3371	1,1906	1,0908	1,0207
58	1,6092	1,3556	1,2071	1,1059	1,0342

Tab. 4 c. Phasen $\eta(s)$ der Streufaktoren für Chlor.

s	$U_B=40\text{ kV}$	$U_B=60\text{ kV}$	$U_B=80\text{ kV}$	$U_B=100\text{ kV}$	$U_B=120\text{ kV}$
0	0,1384	0,1166	0,1038	0,0952	0,0891
2	0,1741	0,1465	0,1304	0,1195	0,1118
4	0,2742	0,2303	0,2046	0,1874	0,1751
6	0,4093	0,3432	0,3046	0,2789	0,2603
8	0,5385	0,4514	0,4006	0,3667	0,3423
10	0,6435	0,5395	0,4787	0,4381	0,4091
12	0,7283	0,6109	0,5421	0,4960	0,4630
14	0,8014	0,6726	0,5970	0,5463	0,5098
16	0,8680	0,7290	0,6473	0,5925	0,5530
18	0,9305	0,7821	0,6946	0,6359	0,5939
20	0,9897	0,8326	0,7398	0,6772	0,6326
22	1,0461	0,8807	0,7829	0,7168	0,6694
24	1,0995	0,9265	0,8239	0,7548	0,7048
26	1,1502	0,9699	0,8628	0,7906	0,7387
28	1,1981	1,0110	0,8998	0,8244	0,7707
30	1,2433	1,0497	0,9346	0,8564	0,8005
32	1,2859	1,0862	0,9674	0,8868	0,8287
34	1,3260	1,1206	0,9983	0,9153	0,8557
36	1,3640	1,1530	1,0275	0,9419	0,8811
38	1,3998	1,1836	1,0550	0,9672	0,9048
40	1,4338	1,2125	1,0809	0,9912	0,9269
42	1,4661	1,2399	1,1055	1,0138	0,9481
44	1,4969	1,2659	1,1288	1,0351	0,9685
46	1,5263	1,2907	1,1510	1,0553	0,9878
48	1,5545	1,3143	1,1721	1,0748	1,0058
50	1,5815	1,3370	1,1923	1,0934	1,0229
52	1,6076	1,3587	1,2117	1,1110	1,0397
54	1,6328	1,3796	1,2302	1,1279	1,0559
56	1,6572	1,3997	1,2481	1,1443	1,0713
58	1,6810	1,4192	1,2655	1,1602	1,0858

Tab. 4 d. Phasen $\eta(s)$ der Streufaktoren für Argon.

s	$U_B=40\text{ kV}$	$U_B=60\text{ kV}$	$U_B=80\text{ kV}$	$U_B=100\text{ kV}$	$U_B=120\text{ kV}$
0	0,1510	0,1290	0,1130	0,1039	0,0973
2	0,2421	0,2063	0,1816	0,1670	0,1565
4	0,3876	0,3295	0,2909	0,2677	0,2508
6	0,5208	0,4415	0,3883	0,3572	0,3347
8	0,6608	0,5595	0,4903	0,4504	0,4214
10	0,8053	0,6818	0,5973	0,5484	0,5126
12	0,9455	0,8005	0,7015	0,6444	0,6028
14	1,0733	0,9100	0,7974	0,7325	0,6858
16	1,1861	1,0071	0,8836	0,8110	0,7591
18	1,2847	1,0920	0,9595	0,8810	0,8240
20	1,3710	1,1670	1,0246	0,9435	0,8826
22	1,4481	1,2342	1,0857	0,9988	0,9354
24	1,5178	1,2949	1,1410	1,0490	0,9828
26	1,5820	1,3512	1,1920	1,0962	1,0264
28	1,6420	1,4039	1,2395	1,1409	1,0679
30	1,6985	1,4534	1,2846	1,1826	1,1080
32	1,7522	1,5006	1,3277	1,2221	1,1460
34	1,8036	1,5456	1,3686	1,2603	1,1815
36	1,8530	1,5886	1,4076	1,2972	1,2156
38	1,9003	1,6300	1,4453	1,3323	1,2490
40	1,9459	1,6697	1,4817	1,3657	1,2814
42	1,9901	1,7079	1,5165	1,3980	1,3120
44	2,0329	1,7447	1,5499	1,4294	1,3410
46	2,0745	1,7801	1,5820	1,4593	1,3691
48	2,1146	1,8143	1,6130	1,4879	1,3965
50	2,1538	1,8475	1,6428	1,5155	1,4229
52	2,1919	1,8793	1,6716	1,5423	1,4479
54	2,2290	1,9102	1,6993	1,5680	1,4719
56	2,2657	1,9404	1,7261	1,5926	1,4952
58	2,3013	1,9695	1,7522	1,6165	1,5179

Tab. 4 e. Phasen $\eta(s)$ der Streufaktoren für Kobalt.

s	$U_B=40\text{ kV}$	$U_B=60\text{ kV}$	$U_B=80\text{ kV}$	$U_B=100\text{ kV}$	$U_B=120\text{ kV}$
0	0,2033	0,1752	0,1580	0,1460	0,1371
2	0,2713	0,2335	0,2103	0,1943	0,1825
4	0,4490	0,3851	0,3463	0,3196	0,3002
6	0,6467	0,5531	0,4962	0,4576	0,4296
8	0,8134	0,6947	0,6227	0,5736	0,5378
10	0,9583	0,8183	0,7335	0,6755	0,6329
12	1,0949	0,9354	0,8386	0,7727	0,7244
14	1,2276	1,0500	0,9414	0,8676	0,8139
16	1,3556	1,1614	1,0421	0,9603	0,9007
18	1,4765	1,2674	1,1387	1,0499	0,9844
20	1,5880	1,3664	1,2291	1,1345	1,0643
22	1,6895	1,4574	1,3125	1,2125	1,1388
24	1,7811	1,5400	1,3890	1,2838	1,2066
26	1,8635	1,6147	1,4585	1,3493	1,2683
28	1,9377	1,6825	1,5216	1,4091	1,3251
30	2,0048	1,7441	1,5791	1,4637	1,3775
32	2,0662	1,8005	1,6320	1,5137	1,4257
34	2,1232	1,8524	1,6808	1,5602	1,4700
36	2,1763	1,9007	1,7263	1,6034	1,5114
38	2,2258	1,9460	1,7689	1,6441	1,5506
40	2,2726	1,9886	1,8090	1,6824	1,5875
42	2,3175	2,0292	1,8471	1,7188	1,6225
44	2,3613	2,0681	1,8836	1,7534	1,6559
46	2,4040	2,1052	1,9183	1,7865	1,6879
48	2,4452	2,1410	1,9516	1,8185	1,7186
50	2,4852	2,1759	1,9840	1,8493	1,7480
52	2,5249	2,2096	2,0152	1,8787	1,7765
54	2,5649	2,2426	2,0452	1,9072	1,8042
56	2,6052	2,2751	2,0746	1,9351	1,8308
58	2,6448	2,3068	2,1035	1,9622	1,8563

Tab. 4 f. Phasen $\eta(s)$ der Streufaktoren für Krypton.

Berechnung der komplexen Streufaktoren eines Atoms für s -Werte von $s=0$ bis $s=60$ in einer Schrittweite von $\Delta s=1$ wurden ca. 2 min benötigt. Das Programm ist so aufgebaut, daß es neben der ersten Bornschen Näherung und den unkorrigierten Streufaktoren, die man erhält, wenn man in Gl. (2) nur von $l=0$ bis $l=125$ summiert, die Streufaktoren, bei denen nur der Realteil mit einer Konvergenzkorrektur verbessert ist und die Streufaktoren, bei denen sowohl Real- als auch Imaginärteil korrigiert sind, ausdrückt. Daraus gewinnt man einen Einblick in den Einfluß der Konvergenzkorrekturen, der im folgenden diskutiert werden soll.

Diskussion der erhaltenen Ergebnisse

Bei der Durchsicht der Tabellen 3 (a–f) der Beträge der komplexen Streufaktoren findet man, daß sich die Beträge bei leichten Atomen, wie Wasserstoff und Fluor, kaum von den Streufaktoren in erster Bornscher Näherung unterscheiden. Das läßt sich auch leicht erklären: Das Potential dieser Atome ist bei den hier zur Berechnung der Streufaktoren verwendeten Beschleunigungsspannungen als kleine Störung des Streuproblems aufzufassen und die Streufaktoren können entsprechend gut durch die erste Bornsche Näherung dargestellt werden. Bei Atomen mit höheren Kernladungszahlen findet man (z. B. in der vorliegenden Arbeit vom Fluor aufwärts), daß für kleine Streuwinkel ϑ , d. h. für kleine s -Werte, die Beträge der komplexen Streufaktoren kleiner bleiben als die nach der ersten Bornschen Näherung errechneten Werte. Für große Streuwinkel ϑ jedoch werden die Beträge der Streufaktoren größer als durch die Bornsche Näherung angegebenen Werte. Die Berechnungen bestätigen einige Experimente, die ARNOT²⁴ durch Streuung von Elektronen an Edelgasen gemacht hat. Diese Streuversuche wurden bei sehr niedrigen Elektronenenergien durchgeführt und zeigen, daß für leichte Atome die Streuintensität durch die erste Bornsche Näherung gut dargestellt werden kann. Für Atome höherer Kernladungszahlen jedoch fand Arnot für große Streuwinkel, daß die experimentell ermittelten Werte über den Werten liegen, die nach der ersten Bornschen Näherung berechnet werden können. Eine Erklärung ist im Einfluß des Streupotentials der Atome zu fin-

den. Für Atome hoher Kernladungszahlen muß man, wenn man mit der ersten Bornschen Näherung rechnet, Korrekturglieder berücksichtigen, die von den Partialwellenphasen δ_l abhängen. Man muß zur richtigen Berechnung der komplexen Streufaktoren von Atomen um so mehr Partialwellenphasen zur Korrektur berücksichtigen, je höhere Kernladungszahlen betrachtet werden²⁵. Um hierüber zu einer qualitativen Aussage zu kommen, wurden in Abb. 1 und 2 die Integranden der Gl. (3) für Argon und Krypton bei 40, 80 und 120 kV Beschleunigungsspannung für $l=0, 1, 2$ als Funktion von r aufgetragen. Man sieht, daß für $l=0$ in beiden Fällen das Potential des streuenden Atoms groß gegenüber der Energie der Elektronen (Kurve $G(r)$) ist und damit ein Übersteigen der Linie, die die der jeweiligen Beschleunigungsspannung entsprechende Wellenzahl k angibt, auftritt. Für große r -Werte nähert sich $G(r)$ asymptotisch von großen Funktionswerten dem Wert k . Für $l=1$ ist das Übersteigen der k -Linie beim Argon nicht mehr all zu groß und für $l=2$ bleiben die Werte der Funktion $G(r)$ immer unter dem entsprechenden k -Wert. Beim Krypton liegen die Werte der Funktion $G(r)$ für $l=1$ und $l=2$ immer noch über den eingetragenen k -Werten. Man kann daraus folgern, daß eine richtige Beschreibung der Winkelabhängigkeit der Beträge der komplexen Streufaktoren erst dann vorliegt, wenn man bei Atomen höherer Kernladungszahlen jeweils entsprechend viele Partialwellenphasen δ_l berücksichtigt, wie es in der vorliegenden Arbeit geschehen ist. In den Abbildungen sind vertikale Linien $r=R$ hervorgehoben, die den r -Wert angeben, bis zu dem das erste Integral der Gl. (3) bei der Berechnung der Partialwellenphasen δ_l nach der WBK-Methode numerisch ausgewertet worden ist.

In Tab. 5 ist eine Zusammenstellung der Werte der komplexen atomaren Streufaktoren für einzelne Atome wiedergegeben, die von verschiedenen Autoren berechnet worden sind. Als Vergleich dazu sind die für die entsprechenden Atome in dieser Arbeit berechneten Werte der Streufaktoren angegeben. Die Zahlenwerte stellen das Verhältnis $f^B(s)/|f(s)|$ dar. Man sieht, daß bei den von den verschiedenen Autoren errechneten Daten die Werte der Beträge der komplexen Streufaktoren für den angegebenen Winkelbereich immer kleiner bleiben als die Werte der

²⁴ H. ARNOT, Proc. Roy. Soc. London A **133**, 615 [1931].

²⁵ N. F. MOTT u. H. S. W. MASSEY, The Theory of Atomic Collision. 3. Auflage, Clarendon Press, Oxford 1965.

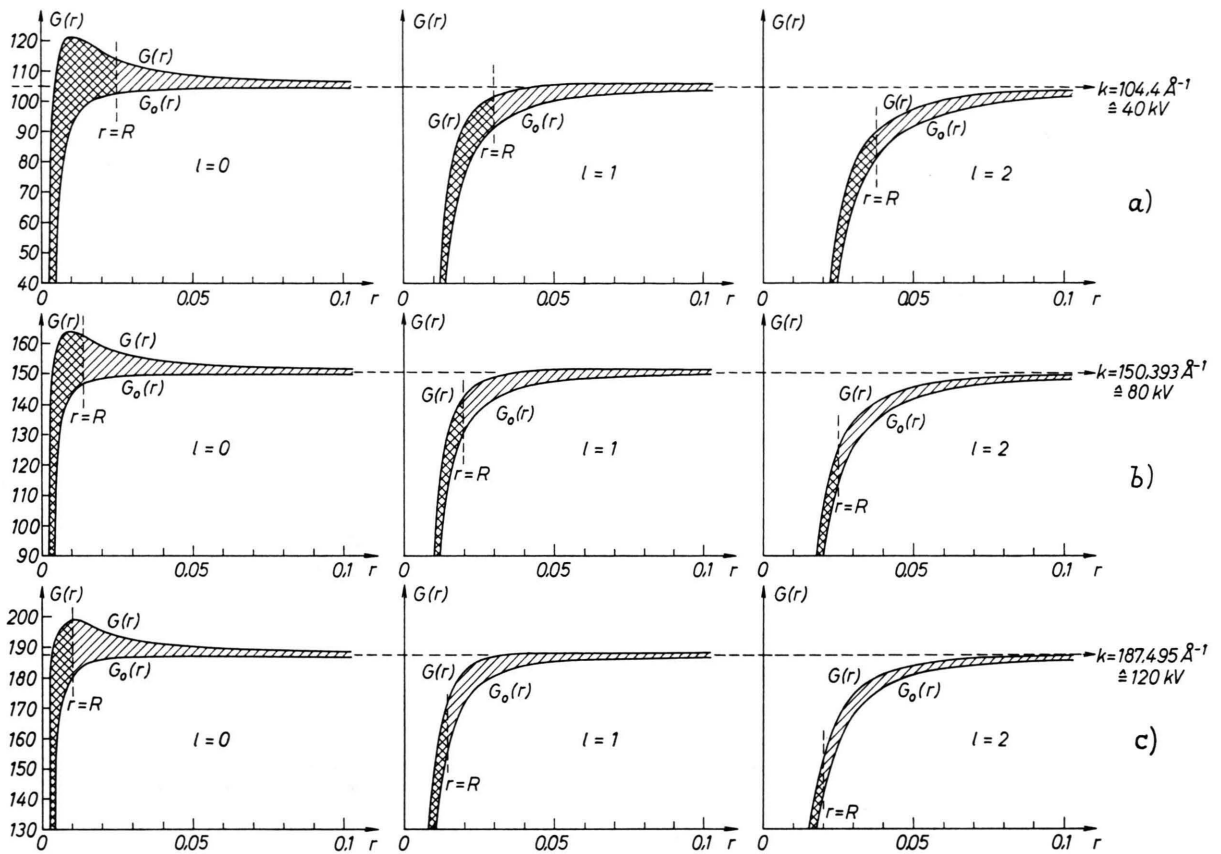


Abb. 1. Darstellung der Integranden $G(r)$ und $G_0(r)$ der Gl. (3) für Argon bei 40 kV (a), 80 kV (b) und 120 kV (c) Beschleunigungsspannung. $l=0, 1, 2$; r in Å, $G(r)$ und $G_0(r)$ in Å⁻¹.

ersten Bornschen Näherung und sich dieser für große Winkel asymptotisch nähern.

Um über die Güte der berechneten Ergebnisse eine Aussage machen zu können, wurden folgende drei Punkte näher untersucht:

1. Der Einfluß der Anzahl der nach der WBK-Methode berechneten, zur Ermittlung der Streufaktoren verwendeten Partialwellenphasen δ_l , d. h. der Einfluß des hier neben der WBK-Methode verwendeten Näherungsverfahrens.

s	Kohlenstoff				Chlor				Argon			
	$V(s)$	$\eta(s)$	$V(s)$	$\eta(s)$	$V(s)$	$\eta(s)$	$V(s)$	$\eta(s)$	$V(s)$	$\eta(s)$	$V(s)$	$\eta(s)$
0	1,003	0,054	1,042	0,054	1,018	0,122	1,018	0,126	0,999	0,135	1,021	0,138
5,47	1,005	0,157	1,008	0,159	1,034	0,356	1,028	0,371	1,033	0,361	1,032	0,375
10,93	1,004	0,285	1,004	0,293	1,037	0,629	1,020	0,658	1,029	0,661	1,020	0,688
16,38	1,004	0,361	1,002	0,370	1,038	0,809	1,010	0,840	1,028	0,853	1,008	0,880
21,83	1,003	0,417	1,001	0,420	1,033	0,966	0,999	0,999	1,022	1,015	0,992	1,046
27,26	1,003	0,464	1,001	0,475	1,026	1,103	0,984	1,132	1,022	1,158	0,977	1,189
32,67	1,002	0,504	1,000	0,517	1,020	1,219	0,970	1,247	1,016	1,282	0,965	1,299
38,06	1,002	0,539	1,000	0,553	1,015	1,318	0,964	1,343	1,021	1,388	0,960	1,400
43,42	1,001	0,570	1,000	0,584	1,012	1,403	0,962	1,426	1,000	1,479	0,955	1,487
48,75	1,001	0,597	1,000	0,614	1,009	1,476	0,962	1,498	1,000	1,559	0,951	1,558

Tab. 5. Vergleich der von verschiedenen Autoren berechneten Beträge und Phasen der komplexen Streufaktoren einzelner Atome mit den im Rahmen dieser Arbeit berechneten entsprechenden Werten. $V(s) = f_B(s) / |f(s)|$.

a) T. G. STRAND, Ref. ⁷. b) T. G. STRAND u. H. J. COX, Ref. ⁸. c) J. L. PEACHER u. J. G. WILLS, Ref. ¹². d) Werte dieser Arbeit.

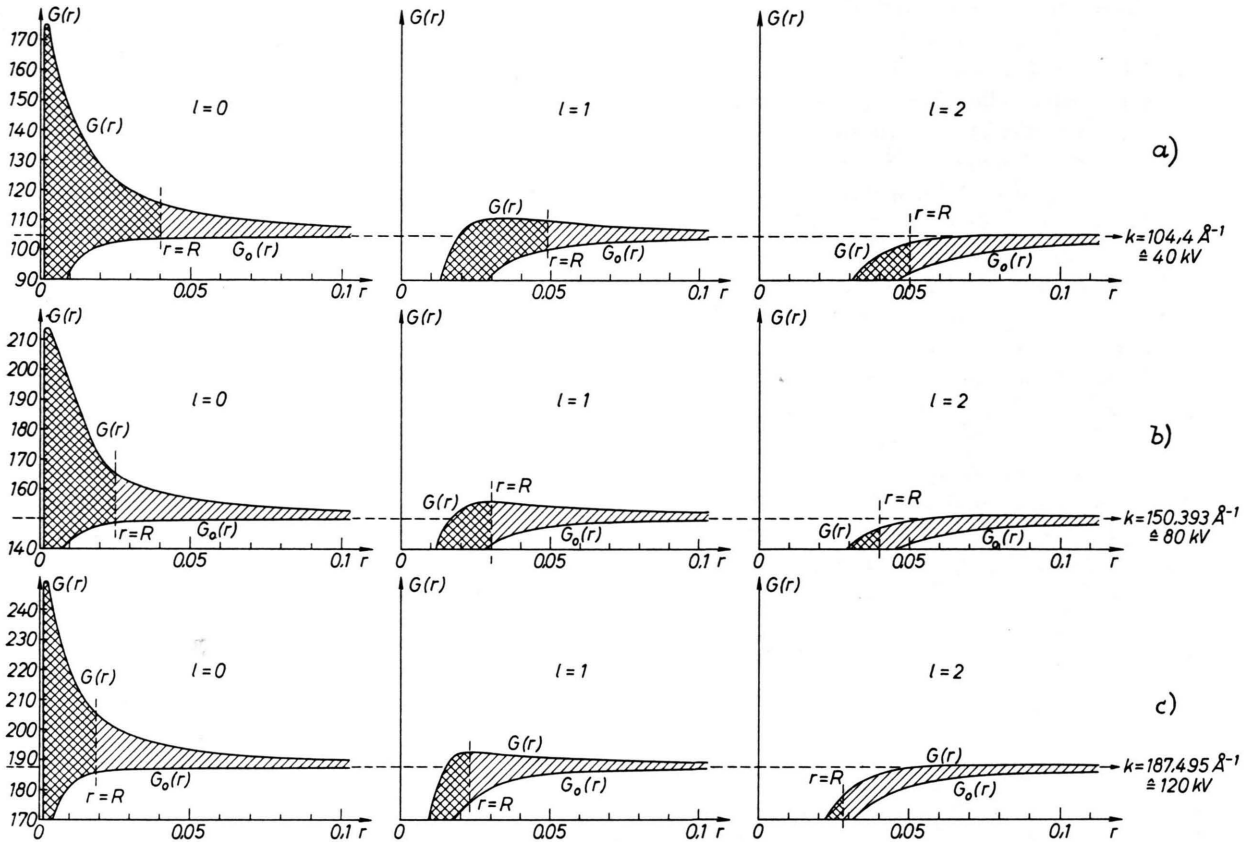


Abb. 2. Darstellung der Integranden $G(r)$ und $G_0(r)$ der Gl. (3) für Krypton bei 40 kV (a), 80 kV (b) und 120 kV (c) Beschleunigungsspannung. $l=0, 1, 2$; r in Å, $G(r)$ und $G_0(r)$ in Å⁻¹.

2. Der Einfluß der zur Summierung in Gl. (2) benutzten Anzahl der Partialwellenphasen δ_l .

3. Der Einfluß der Konvergenzkorrekturen.

Die Diskussion dieser eben genannten Punkte wird am Beispiel des Argons und Kryptions durchgeführt. Die Untersuchungen dazu wurden bei zwei verschiedenen Beschleunigungsspannungen (40 und 120 kV) gemacht.

Bei dem hier verwendeten Näherungsverfahren werden, wie schon mehrfach beschrieben, alle Partialwellenphasen für $l \geq 1$ nach Gl. (7) bzw. (8) ermittelt, nur δ_0 wird nach der WBK-Methode Gl. (3) berechnet. Es wurden nun außerdem zur Untersuchung der Güte der Resultate für 40 und 120 kV Beschleunigungsspannung für die beiden oben erwähnten Atome die ersten 25 Partialwellenphasen nach dem WBK-Verfahren berechnet. Das Ergebnis der Berechnung ist in Abb. 3 für Argon (40 kV Beschleunigungsspannung) dargestellt. Es ist $(|f| - f^B)$

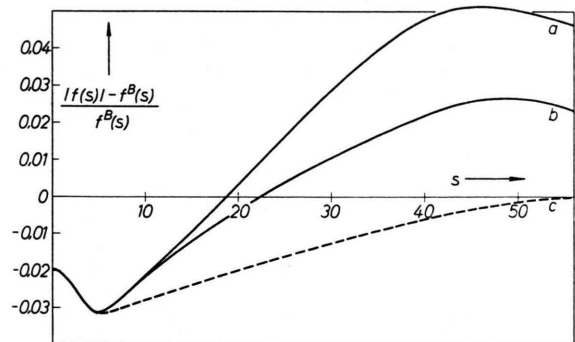


Abb. 3. Abhängigkeit des Verhältnisses $(|f| - f^B)/f^B$ von s für Argon. a: $|f(s)|$ berechnet mit 126 Partialwellenphasen, davon δ_0 nach WBK-Verfahren (Konvergenzkorrekturen für Real- und Imaginärteil berücksichtigt). b: $|f(s)|$ berechnet mit 126 Partialwellenphasen, davon $\delta_0 - \delta_{25}$ nach WBK-Verfahren (Konvergenzkorrekturen für Real- und Imaginärteil berücksichtigt). c: $|f(s)|$ berechnet mit 126 Partialwellenphasen, davon $\delta_0 - \delta_{25}$ nach WBK-Verfahren (Konvergenzkorrektur nur für den Realteil berücksichtigt).

f_B als Funktion der Winkelvariablen s aufgetragen. Für kleine s -Werte ($s < 20$) kann man praktisch keinen Einfluß der nach dem WBK-Verfahren berechneten Partialwellenphasen gegenüber den nach dem Näherungsverfahren ermittelten Werten auf den Betrag des komplexen Streufaktors feststellen, die Abweichungen sind durch Rundungsfehler zu erklären. Für große s -Werte ($s > 20$) jedoch liegen die Beträge der komplexen Streufaktoren, die unter Verwendung von 25 nach dem WBK-Verfahren berechneten Partialwellenphasen ermittelt worden sind, bei kleineren Werten gegenüber den mit nur einer WBK-Partialwellenphase bestimmten Daten. Für sehr große s -Werte nähern sich die Beträge der Streufaktoren in beiden Fällen asymptotisch den Werten, die durch die erste Bornsche Näherung angegeben werden. In Tab. 6 sind die Ergebnisse der Untersuchung noch für Argon 120 kV und Krypton bei 40 und 120 kV Beschleunigungsspannung zusammengestellt.

Als nächstes wurde der Einfluß der Anzahl der zur Summierung in Gl. (2) mitgenommenen Glieder auf die Werte der komplexen Streufaktoren untersucht. Es wurden außer den zur Berechnung verwendeten 126 Partialwellenphasen zusätzlich Berechnungen unter Verwendung von 50 und 200 Partialwellenphasen durchgeführt. Zu bemerken ist noch, daß in jedem Falle die Partialwellenphasen außer der für $l=0$ nach Gl. (7) bzw. (8) berechnet wurden. In Tab. 7 sind die Ergebnisse der Berechnung zusammengestellt. Es zeigt sich, daß die Anzahl der zur Berechnung der komplexen Streufaktoren verwendeten Partialwellenphasen keinen großen Einfluß auf die Werte der Beträge der Streufaktoren hat, wenn man die notwendigen Konvergenzkorrekturen bei Real- und Imaginärteil anbringt. Bei dem Ergebnis, das unter Verwendung von 50 Partialwellenphasen erhalten wurde, bemerkt man ein leichtes Oszillieren der Werte um die Werte, die unter Verwendung von 126 Partialwellenphasen berechnet worden sind. Die

s	Argon						Krypton					
	$U_B = 40 \text{ kV}$			$U_B = 120 \text{ kV}$			$U_B = 40 \text{ kV}$			$U_B = 120 \text{ kV}$		
	$f_B(s)$	$ f(s)_1 $	$ f(s)_2 $	$f_B(s)$	$ f(s)_1 $	$ f(s)_2 $	$f_B(s)$	$ f(s)_1 $	$ f(s)_2 $	$f_B(s)$	$ f(s)_1 $	$ f(s)_2 $
0	5,0287	4,9282	4,9299	5,7584	5,7091	5,7109	7,9320	7,4867	7,4497	9,0829	8,8408	8,8326
2	3,7859	3,6965	3,6982	4,3352	4,2912	4,2928	5,7016	5,3043	5,2728	6,5289	6,3124	6,3052
4	2,0861	2,0231	2,0246	2,3888	2,3571	2,3584	3,0989	2,8079	2,7909	3,5485	3,3889	3,3841
6	1,1588	1,1221	1,1233	1,3269	1,3076	1,3084	1,8744	1,6739	1,6712	2,1463	2,0348	2,0325
8	0,7240	0,7044	0,7052	0,8291	0,8179	0,8182	1,2911	1,1463	1,1532	1,4785	1,3959	1,3957
10	0,5042	0,4934	0,4938	0,5774	0,5705	0,5704	0,9535	0,8450	0,8568	1,0918	1,0289	1,0302
12	0,3772	0,3709	0,3709	0,4319	0,4272	0,4269	0,7296	0,6487	0,6622	0,8354	0,7881	0,7906
14	0,2946	0,2910	0,2907	0,3374	0,3340	0,3335	0,5711	0,5126	0,5256	0,6540	0,6193	0,6227
16	0,2365	0,2347	0,2341	0,2709	0,2685	0,2679	0,4556	0,4154	0,4265	0,5217	0,4969	0,5009
18	0,1936	0,1931	0,1922	0,2217	0,2202	0,2195	0,3699	0,3442	0,3532	0,4236	0,4067	0,4109
20	0,1609	0,1614	0,1603	0,1843	0,1834	0,1836	0,3055	0,2907	0,2976	0,3498	0,3395	0,3436
22	0,1355	0,1366	0,1354	0,1551	0,1546	0,1538	0,2562	0,2493	0,2546	0,2934	0,2882	0,2920
24	0,1153	0,1170	0,1156	0,1321	0,1320	0,1311	0,2180	0,2165	0,2210	0,2497	0,2480	0,2513
26	0,0992	0,1012	0,0997	0,1136	0,1138	0,1130	0,1879	0,1901	0,1944	0,2152	0,2158	0,2186
28	0,0862	0,0883	0,0868	0,0987	0,0991	0,0982	0,1638	0,1685	0,1729	0,1876	0,1901	0,1922
30	0,0755	0,0777	0,0762	0,0864	0,0869	0,0861	0,1442	0,1505	0,1551	0,1652	0,1692	0,1707
32	0,0666	0,0689	0,0675	0,0763	0,0768	0,0761	0,1281	0,1351	0,1400	0,1466	0,1517	0,1526
34	0,0592	0,0615	0,0601	0,0678	0,0685	0,0678	0,1145	0,1218	0,1267	0,1311	0,1367	0,1371
36	0,0530	0,0552	0,0539	0,0607	0,0614	0,0606	0,1031	0,1103	0,1149	0,1180	0,1239	0,1239
38	0,0477	0,0498	0,0486	0,0546	0,0553	0,0547	0,0933	0,1004	0,1044	0,1068	0,1130	0,1128
40	0,0431	0,0452	0,0440	0,0494	0,0501	0,0495	0,0848	0,0917	0,0948	0,0971	0,1036	0,1032
42	0,0392	0,0411	0,0401	0,0449	0,0456	0,0450	0,0774	0,0839	0,0862	0,0886	0,0953	0,0948
44	0,0358	0,0376	0,0367	0,0411	0,0417	0,0412	0,0709	0,0770	0,0785	0,0812	0,0878	0,0873
46	0,0329	0,0345	0,0337	0,0377	0,0383	0,0378	0,0652	0,0707	0,0716	0,0747	0,0812	0,0808
48	0,0303	0,0318	0,0310	0,0347	0,0353	0,0348	0,0602	0,0652	0,0656	0,0689	0,0754	0,0752
50	0,0280	0,0294	0,0287	0,0320	0,0326	0,0321	0,0557	0,0602	0,0604	0,0638	0,0702	0,0702
52	0,0259	0,0272	0,0266	0,0297	0,0302	0,0298	0,0517	0,0557	0,0559	0,0591	0,0655	0,0656
54	0,0241	0,0253	0,0247	0,0276	0,0281	0,0277	0,0480	0,0516	0,0519	0,0550	0,0611	0,0614
56	0,0225	0,0236	0,0230	0,0257	0,0258	0,0258	0,0448	0,0478	0,0482	0,0513	0,0572	0,0576
58	0,0210	0,0220	0,0215	0,0240	0,0245	0,0241	0,0418	0,0444	0,0449	0,0479	0,0537	0,0543

Tab. 6. Gegenüberstellung der Werte der Streufaktoren, die nach verschiedenen Näherungsmethoden berechnet worden sind. $f_B(s)$ Streufaktoren in erster Bornsche Näherung.

$|f(s)_1|$ Beträge der komplexen Streufaktoren mit δ_0 berechnet nach dem WBK-Verfahren.
 $|f(s)_2|$ Beträge der komplexen Streufaktoren mit δ_l für $l=0-25$ berechnet nach dem WBK-Verfahren.

s	Argon						Krypton					
	$U_B = 40 \text{ kV}$			$U_B = 120 \text{ kV}$			$U_B = 40 \text{ kV}$			$U_B = 120 \text{ kV}$		
	a	b	c	a	b	c	a	b	c	a	b	c
0	4,9299	4,9282	4,9278	5,7157	5,7091	5,7064	7,4851	7,4867	7,4850	8,8433	8,8408	8,8326
2	3,6978	3,6965	3,6960	4,2975	4,2912	4,2878	5,3023	5,3042	5,3020	6,3125	6,3124	6,3052
4	2,0233	2,0231	2,0223	2,3620	2,3571	2,3524	2,8082	2,8079	2,8046	3,3861	3,3889	3,3841
6	1,1211	1,1221	1,1210	1,3094	1,3076	1,3012	1,6775	1,6739	1,6701	2,0344	2,0348	2,0325
8	0,7035	0,7044	0,7034	0,8161	0,8179	0,8106	1,1487	1,1463	1,1425	1,4002	1,3959	1,3957
10	0,4934	0,4934	0,4925	0,5664	0,5705	0,5631	0,8441	0,8450	0,8417	1,0355	1,0289	1,0302
12	0,3716	0,3709	0,3701	0,4229	0,4272	0,4203	0,6460	0,6487	0,6457	0,7940	0,7881	0,7906
14	0,2916	0,2910	0,2902	0,3310	0,3340	0,3279	0,5109	0,5126	0,5099	0,6227	0,6193	0,6227
16	0,2347	0,2347	0,2339	0,2675	0,2685	0,2632	0,4159	0,4154	0,4129	0,4975	0,4969	0,5009
18	0,1926	0,1931	0,1924	0,2211	0,2202	0,2155	0,3461	0,3442	0,3419	0,4046	0,4067	0,4109
20	0,1609	0,1614	0,1608	0,1856	0,1834	0,1793	0,2921	0,2907	0,2887	0,3353	0,3395	0,3436
22	0,1366	0,1366	0,1361	0,1574	0,1546	0,1511	0,2492	0,2493	0,2476	0,2834	0,2882	0,2920
24	0,1173	0,1170	0,1165	0,1343	0,1320	0,1286	0,2154	0,2165	0,2150	0,2443	0,2480	0,2513
26	0,1016	0,1012	0,1008	0,1151	0,1138	0,1105	0,1891	0,1901	0,1888	0,2143	0,2158	0,2186
28	0,0884	0,0883	0,0879	0,0990	0,0991	0,0958	0,1683	0,1685	0,1673	0,1907	0,1901	0,1922
30	0,0775	0,0777	0,0774	0,0858	0,0869	0,0837	0,1519	0,1505	0,1494	0,1713	0,1692	0,1707
32	0,0686	0,0689	0,0686	0,0751	0,0768	0,0737	0,1359	0,1351	0,1341	0,1545	0,1517	0,1526
34	0,0614	0,0615	0,0612	0,0667	0,0685	0,0655	0,1221	0,1218	0,1210	0,1396	0,1367	0,1371
36	0,0553	0,0552	0,0549	0,0600	0,0614	0,0586	0,1100	0,1103	0,1096	0,1260	0,1239	0,1239
38	0,0501	0,0498	0,0495	0,0547	0,0553	0,0529	0,0998	0,1004	0,0997	0,1137	0,1130	0,1128
40	0,0453	0,0452	0,0449	0,0504	0,0501	0,0480	0,0913	0,0917	0,0911	0,1029	0,1036	0,1032
42	0,0411	0,0411	0,0409	0,0466	0,0456	0,0437	0,0841	0,0839	0,0834	0,0935	0,0953	0,0948
44	0,0374	0,0376	0,0374	0,0430	0,0417	0,0400	0,0774	0,0770	0,0764	0,0857	0,0878	0,0873
46	0,0344	0,0345	0,0343	0,0395	0,0383	0,0367	0,0710	0,0707	0,0703	0,0793	0,0812	0,0808
48	0,0319	0,0318	0,0316	0,0361	0,0353	0,0337	0,0651	0,0652	0,0648	0,0742	0,0754	0,0752
50	0,0296	0,0294	0,0292	0,0329	0,0326	0,0310	0,0598	0,0602	0,0598	0,0699	0,0702	0,0702
52	0,0274	0,0272	0,0271	0,0299	0,0302	0,0286	0,0554	0,0557	0,0554	0,0661	0,0655	0,0656
54	0,0253	0,0253	0,0252	0,0273	0,0281	0,0264	0,0516	0,0516	0,0513	0,0624	0,0611	0,0614
56	0,0235	0,0236	0,0234	0,0252	0,0262	0,0246	0,0481	0,0478	0,0476	0,0588	0,0572	0,0576
58	0,0219	0,0220	0,0219	0,0236	0,0245	0,0229	0,0447	0,0444	0,0442	0,0550	0,0537	0,0534

Tab. 7. Zusammenstellung der Werte der Beträge der komplexen Streufaktoren für Argon und Krypton bei 40 und 120 kV Beschleunigungsspannung berechnet mit: a) 50 Partialwellenphasen und Konvergenzkorrekturen, b) 126 Partialwellenphasen und Konvergenzkorrekturen, c) 200 Partialwellenphasen und Konvergenzkorrekturen.

unter Verwendung von 200 Partialwellenphasen ermittelten Streuamplituden zeigen bei großen Streuwinkeln etwas kleinere Werte als die mit 126 Partialwellenphasen berechneten Werte.

Zur Untersuchung des Einflusses der Konvergenzkorrekturen wurden die verschiedenen möglichen Konvergenzkorrekturen berechnet und als Auswahl das Ergebnis für Argon und Krypton bei 40 kV Beschleunigungsspannung in Tab. 8 zusammengestellt. In der Tabelle bedeuten im einzelnen: $f^B(s)$ die Streufaktoren in erster Bornscher Näherung, $|f_U(s)|$ die Beträge der komplexen Streufaktoren ohne Konvergenzkorrektur, wie sie unter Verwendung von 126 Partialwellenphasen berechnet worden sind, $|f_R(s)|$ die Werte der Beträge der Streufaktoren unter Berücksichtigung der Konvergenzkorrektur für den Realteil allein und $|f_{RI}(s)|$ die Werte der Beträge der komplexen Streufaktoren, wie man sie erhält, wenn man Konvergenzkorrekturen sowohl für den Real- als auch für den Imaginärteil durch-

führt. Man erkennt zunächst, daß die unkorrigierten Werte immer unter den Werten liegen, die die erste Bornsche Näherung liefert, und daß sie um einen mittleren Verlauf oszillieren. Das rührt davon her, daß bei der Berechnung nach Gl. (2) zu wenig Summenglieder verwendet werden. Bei den Werten, für die nur die Konvergenzkorrektur des Realteils berücksichtigt worden ist, sieht man, daß sie für alle Beugungswinkel ϑ bzw. s -Werte kleiner bleiben als die Werte der ersten Bornschen Näherung, und daß diese Werte für große Beugungswinkel asymptotisch gegen diese konvergieren. Die beim Argon für den s -Bereich $s > 52$ auftretende Abweichung läßt sich durch Rundungsfehler der Maschine erklären. Führt man jedoch die Konvergenzkorrektur sowohl für den Realteil als auch für den Imaginärteil aus, so findet man, daß beim Argon vom s -Wert $s = 20$ und beim Krypton von $s = 26$ ab die erhaltenen Werte der Beträge der Streufaktoren über den Werten liegen, die sich nach der ersten Bornschen Näherung

s	$f_B(s)$	Argon $U_B = 40$ kV			$f_B(s)$	Krypton $U_B = 40$ kV		
		$ f_U(s) $	$ f_R(s) $	$ f_{RI}(s) $		$ f_U(s) $	$ f_R(s) $	$ f_{RI}(s) $
0	5,0287	4,7536	4,9254	4,9282	7,9320	7,1009	7,4782	7,4867
2	3,7859	3,7276	3,6932	3,6965	5,7016	5,3976	5,2938	5,3043
4	2,0861	2,0148	2,0181	2,0231	3,0989	2,7707	2,7927	2,8079
6	1,1588	1,1065	1,1152	1,2211	1,8744	1,6346	1,6553	1,6739
8	0,7240	0,7101	0,6963	0,7044	1,2911	1,1525	1,1264	1,1463
10	0,5042	0,4748	0,4848	0,4934	0,9535	0,8100	0,8241	0,8450
12	0,3772	0,3687	0,3624	0,3709	0,7296	0,6368	0,6272	0,6487
14	0,2946	0,2826	0,2829	0,2910	0,5711	0,4889	0,4903	0,5126
16	0,2365	0,2252	0,2271	0,2346	0,4556	0,3907	0,3925	0,4154
18	0,1936	0,1899	0,1860	0,1931	0,3699	0,3228	0,3212	0,3442
20	0,1609	0,1526	0,1548	0,1614	0,3055	0,2679	0,2676	0,2907
22	0,1355	0,1321	0,1307	0,1366	0,2562	0,2258	0,2266	0,2493
24	0,1153	0,1122	0,1116	0,1170	0,2180	0,1940	0,1944	0,2165
26	0,0992	0,0954	0,0962	0,1012	0,1879	0,1708	0,1688	0,1901
28	0,0862	0,0852	0,0838	0,0883	0,1638	0,1453	0,1482	0,1685
30	0,0755	0,0731	0,0736	0,0777	0,1442	0,1327	0,1312	0,1505
32	0,0666	0,0655	0,0652	0,0689	0,1281	0,1157	0,1170	0,1351
34	0,0592	0,0586	0,0581	0,0615	0,1145	0,1031	0,1050	0,1218
36	0,0530	0,0519	0,0522	0,0552	0,1031	0,0975	0,0947	0,1103
38	0,0477	0,0475	0,0471	0,0498	0,0933	0,0829	0,0860	0,1004
40	0,0431	0,0426	0,0427	0,0452	0,0848	0,0794	0,0785	0,0917
42	0,0392	0,0390	0,0389	0,0411	0,0774	0,0713	0,0719	0,0839
44	0,0358	0,0358	0,0357	0,0376	0,0709	0,0636	0,0661	0,0770
46	0,0329	0,0327	0,0328	0,0345	0,0652	0,0636	0,0610	0,0707
48	0,0303	0,0303	0,0302	0,0318	0,0602	0,0540	0,0565	0,0652
50	0,0280	0,0280	0,0280	0,0294	0,0557	0,0529	0,0525	0,0602
52	0,0259	0,0260	0,0260	0,0272	0,0517	0,0487	0,0489	0,0557
54	0,0241	0,0242	0,0242	0,0253	0,0480	0,0433	0,0457	0,0516
56	0,0225	0,0227	0,0226	0,0236	0,0448	0,0449	0,0428	0,0478
58	0,0210	0,0211	0,0212	0,0220	0,0418	0,0381	0,0401	0,0444

Tab. 8. Einfluß der Konvergenzkorrekturen auf die Beträge der Streufaktoren. Zusammenstellung der Werte für Argon und Krypton bei $U_B = 40$ kV Beschleunigungsspannung.

ergeben. Eine genaue Untersuchung des Verhaltens der Korrekturterme in Abhängigkeit von der Variablen s ergab, daß die Korrektur des Realteils schneller gegen Null geht als die Korrektur des Imaginärteils. Das bedeutet aber, daß erst bei sehr großen s -Werten eine asymptotische Annäherung der Werte der Beträge der komplexen Streufaktoren an die Werte der ersten Bornschen Näherung eintreten wird, und wobei je nach Verlauf der Korrekturfunktion für den Imaginärteil in Abhängigkeit von s auch das Übersteigen der Werte der ersten Bornschen Näherung durch die entsprechenden Beträge der komplexen Streufaktoren richtig wiedergegeben wird. Hier liegt auch die Erklärung dafür, daß bei den Streufaktoren, die von anderen Autoren berechnet worden sind, die Beträge der Streufaktoren immer kleiner bleiben als die nach der ersten Bornschen Näherung berechneten Werte (s. Tab. 5).

Der Einfluß der Konvergenzkorrekturen auf die Phasen der komplexen Streufaktoren ist in Abb. 4 für Argon in Abhängigkeit von der Beschleunigungsspannung und vom Beugungswinkel ϑ bzw. von der

Variablen s dargestellt. Die unkorrigierten Werte der Phasen (punktierter Linie) oszillieren um die Kurve, die von den nur mit der Korrektur des Realteils errechneten Werten (strichpunktierter Linie) dargestellt wird. Man erkennt hier ganz deutlich den Einfluß des Abbrechens der Reihe nach der Summierung von 126 Termen in Gl. (2). Die Hinzunahme der Korrektur des Imaginärteils hat nur noch ein geringes Anheben der Werte für die Phasen der komplexen Streufaktoren zur Folge. Diese letzten Werte werden durch die ausgezogene Kurve dargestellt. Der Verlauf der Funktionen $\eta(s)$ in Abhängigkeit von den Korrekturtermen ist in der Abbildung nur für eine Beschleunigungsspannung von 40 kV dargestellt, für die anderen Beschleunigungsspannungen ergibt sich der gleiche Verlauf der einzelnen Funktionen, die der Übersichtlichkeit wegen nicht dargestellt sind. Im Bild sind weiterhin nur die Werte der Phasen der komplexen Streufaktoren in Abhängigkeit von Beschleunigungsspannung und s -Wert gezeigt, wie sie sich nach Ausführung der Konvergenzkorrektur für Real- und Imaginärteil ergeben.

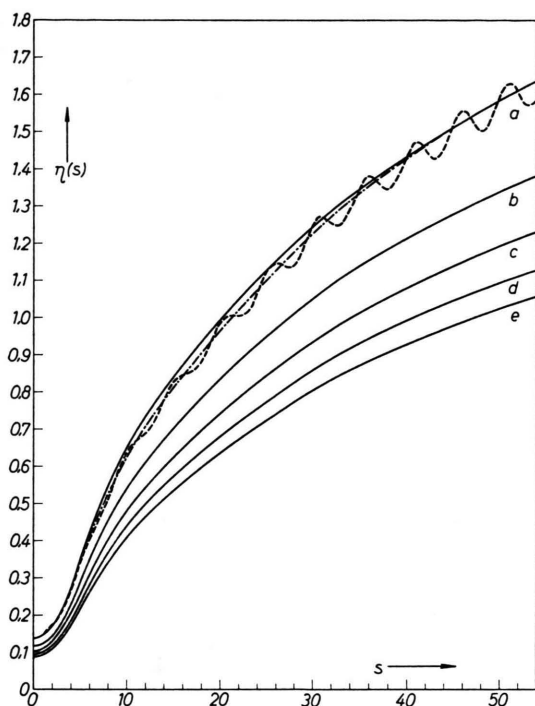


Abb. 4. Darstellung des Einflusses der Konvergenzkorrekturen auf die Phasen der komplexen Streufaktoren für Argon bei 40 (a), 60 (b), 80 (c), 100 (d) und 120 (e) kV Beschleunigungsspannung in Abhängigkeit von s . --- Phasen $\eta(s)$ ohne Konvergenzkorrekturen, -.-.- Phasen $\eta(s)$ mit Konvergenzkorrekturen des Realteils, — Phasen $\eta(s)$ mit Konvergenzkorrekturen des Real- und Imaginärteils berechnet. Die Kurven b–e stellen die Phasen $\eta(s)$ bei den entsprechenden Beschleunigungsspannungen dar, die mit Konvergenzkorrekturen für Real- und Imaginärteil berechnet worden sind. s in \AA^{-1} , $\eta(s)$ in rad.

Aus den erhaltenen komplexen Streuamplituden der hier aufgeführten Atome an der Stelle $s=0$ wurden die totalen Wirkungsquerschnitte nach folgender Gleichung

$$Q = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(0) \quad (24)$$

berechnet. Die Ergebnisse sind in Tab. 9 zusammengestellt.

Anpassung der Streufaktoren durch analytische Ausdrücke

Um die erhaltenen Werte der komplexen Streufaktoren zur Auswertung von Elektronenbeugungsmessungen an Gasen bequem verwerten zu können, wurden die Beträge und Phasen durch analytische Ausdrücke approximiert. Zu diesem Zweck wurden zwei verschiedene Funktionstypen eingehender untersucht. Zur Darstellung der Beträge der komplexen Streufaktoren $|f(s)|$ wurde, dem natürlichen Verlauf dieser Funktion ungefähr entsprechend, die Funktion $\exp(P^{(n)}(s))$ zur Anpassung gewählt. Hierbei soll $P^{(n)}(s)$ ein Polynom n -ten Grades in s bedeuten. Im Vergleich dazu wurden die Beträge der Streufaktoren auch durch reine Polynome n -ten Grades dargestellt. Es hat sich aber gezeigt, daß der Exponentialansatz wesentlich besser zur Approximation der betreffenden Werte geeignet ist, und daß man hiermit, im Gegensatz zur Approximation durch reine Polynome, mit Polynomen wesentlich kleineren Grades auskommen kann. Als Beispiel sind in Tab. 10 für die Beträge des Formfaktors des Urans⁶ bei 40 kV Beschleunigungsspannung die Werte für die Approximation durch $\exp(P^{(4)}(s))$ und $\exp(P^{(8)}(s))$ den numerisch ermittelten Werten gegenübergestellt. Es sind außerdem die jeweiligen prozentualen Abweichungen, sowie die vollständigen Ausdrücke der Näherungsfunktionen für $|f(s)|$ angegeben.

Die gleichen Funktionsansätze sind zur Darstellung der Phasen der komplexen Streufaktoren benutzt worden, wobei jetzt dem natürlichen Verlauf der Funktionen $\eta(s)$ Polynome n -ten Grades in s besser entsprechen als die zur Darstellung der Beträge der komplexen Streufaktoren verwendeten Exponentialansätze.

Für die hier berechneten sechs Atome wurden für die Darstellung der Beträge der komplexen Streufaktoren Funktionen $\exp(P^{(4)}(s))$ und zur Darstellung der Phasen der komplexen Streufaktoren

U_B	Q_H	Q_F	Q_{Cl}	Q_{Ar}	Q_{Co}	Q_{Kr}
40	0,000783	0,020257	0,078756	0,082753	0,135394	0,182211
60	0,000553	0,014020	0,055966	0,058309	0,098112	0,133041
80	0,000434	0,011289	0,044639	0,046240	0,075522	0,108126
100	0,000365	0,009495	0,037344	0,038935	0,063836	0,092257
120	0,000319	0,008298	0,032707	0,034093	0,055983	0,081236

Tab. 9. Wirkungsquerschnitte für die Atome Wasserstoff, Fluor, Chlor, Argon, Kobalt und Krypton bei verschiedenen Elektronenenergien. U_B in keV.

s	$ f(s) $	$\exp(P^{(4)}(s))^a$	$\Delta\%$	$\exp(P^{(8)}(s))^b$	$\Delta\%$
0	12,347	—	—	—	—
2	8,477	8,086	— 4,62	8,122	— 4,10
4	4,493	4,489	— 0,10	4,425	— 1,52
6	2,658	2,773	3,29	2,735	1,86
8	1,830	1,873	2,34	1,862	1,74
10	1,356	1,359	0,25	1,363	0,54
12	1,060	1,044	— 1,49	1,054	— 0,60
14	0,857	0,839	— 2,15	0,848	— 1,04
16	0,709	0,696	— 1,84	0,703	— 0,85
18	0,596	0,591	— 0,91	0,594	— 0,32
20	0,508	0,509	0,24	0,509	0,24
22	0,438	0,475	1,18	0,441	0,67
24	0,381	0,414	1,60	0,383	0,64
26	0,334	0,338	1,47	0,335	0,31
28	0,294	0,297	0,86	0,294	0,00
30	0,261	0,260	— 0,09	0,259	— 0,30

Tab. 10. Anpassung der Beträge der komplexen Streufaktoren für Uran bei 40 kV Beschleunigungsspannung durch zwei verschiedene Exponentialfunktionen der Form $\exp(P^{(n)}(s))$.

- a) $|f(s)| = \exp(2,806 - 0,3933 s + 1,862 \cdot 10^{-2} s^2 - 4,736 \cdot 10^{-4} s^3 + 4,54 \cdot 10^{-6} s^4)$.
b) $|f(s)| = \exp(2,865 - 0,4337 s + 2,611 \cdot 10^{-2} s^2 - 1,054 \cdot 10^{-3} s^3 + 2,472 \cdot 10^{-5} s^4 - 1,519 \cdot 10^{-7} s^5 - 1,11 \cdot 10^{-8} s^6 + 3,496 \cdot 10^{-10} s^7 - 3,248 \cdot 10^{-12} s^8)$.

reine Polynome $P^{(4)}(s)$ benutzt. Die Tab. 11 a und 11 b geben für diese Atome die Koeffizienten der entsprechenden Polynome bei den verschiedenen Beschleunigungsspannungen an. Zu bemerken ist noch, daß die Approximation bei kleinen s -Werten ziemlich von den vorgegebenen Werten abweicht. Es ergibt sich, daß die Beträge der Streufaktoren für s -Werte $s < 2 - 3$ und die Phasen der Streufaktoren für s -Werte $s < 1 - 2$ mit einem Fehler von ca. 1 bis 2% behaftet sind. Will man den Fehler kleiner halten, so muß man den Grad der Polynome erhöhen. Für den Bereich kleiner s -Werte, $0 \leq s \leq 3$, müßte man, um eine gute Approximation zu erzielen, gesonderte Rechnungen durchführen und die so erhaltenen Ergebnisse dann mit den Ergebnissen für große s -Werte zusammensetzen. Man hat jedoch dann den Nachteil, daß man die Streufaktoren nicht mit Hilfe einer einzigen Funktion über den ganzen Winkelbereich darstellen kann. Da aber bei dem heutigen Stand der Technik der Winkelbereich $s < 2 - 3$ nur sehr schwer zugänglich ist und die Genauigkeit, mit

	U_B	a_0	a_1	$a_2 \cdot 10^2$	$a_3 \cdot 10^4$	$a_4 \cdot 10^6$
H	40	— 0,2372	— 0,4026	1,296	— 2,176	1,394
	60	— 0,1961	— 0,4044	1,309	— 2,203	1,412
	80	— 0,1654	— 0,4030	1,296	— 2,164	1,372
	100	— 0,1314	— 0,4032	1,299	— 2,174	1,384
	120	— 0,0975	— 0,4041	1,308	— 2,203	1,413
F	40	1,032	— 0,2891	0,7419	— 1,025	0,5515
	60	1,071	— 0,2891	0,7421	— 1,027	0,5557
	80	1,107	— 0,2892	0,7421	— 1,028	0,5559
	100	1,140	— 0,2888	0,7385	— 1,016	0,5450
	120	1,173	— 0,2888	0,7386	— 1,018	0,5473
Cl	40	1,896	— 0,3622	1,237	— 2,207	1,480
	60	1,938	— 0,3618	1,230	— 2,189	1,467
	80	1,975	— 0,3615	1,225	— 2,177	1,458
	100	2,010	— 0,3613	1,223	— 2,173	1,456
	120	2,044	— 0,3612	1,221	— 2,170	1,454
Ar	40	1,889	— 0,3519	1,180	— 2,080	1,381
	60	1,931	— 0,3515	1,172	— 2,056	1,363
	80	1,968	— 0,3508	1,163	— 2,032	1,344
	100	2,005	— 0,3511	1,164	— 2,039	1,351
	120	2,074	— 0,3735	1,420	— 2,819	2,055
Co	40	2,061	— 0,3230	1,027	— 1,726	1,102
	60	2,110	— 0,3209	1,003	— 1,663	1,053
	80	2,124	— 0,3186	0,9895	— 1,637	1,035
	100	2,161	— 0,3176	0,9804	— 1,615	1,019
	120	2,195	— 0,3171	0,9751	— 1,603	1,011
Kr	40	2,182	— 0,3227	1,079	— 1,884	1,232
	60	2,229	— 0,3176	1,034	— 1,771	1,147
	80	2,268	— 0,3145	1,008	— 1,709	1,102
	100	2,306	— 0,3133	0,9989	— 1,693	1,095
	120	2,338	— 0,3110	0,9796	— 1,646	1,059

Tab. 11 a. Zusammenstellung der Anpassungsparameter für die Beträge der komplexen Streufaktoren $|f(s)|$ gemäß der Funktion $\exp(P^{(4)}(s))$ bei verschiedenen Beschleunigungsspannungen. U_B in kV.

	U_B	$a_0 \cdot 10^3$	$a_1 \cdot 10^3$	$a_2 \cdot 10^4$	$a_3 \cdot 10^6$	$a_4 \cdot 10^8$
H	40	1,904	7,003	— 1,962	2,878	— 1,652
	60	1,560	5,870	— 1,651	2,415	— 1,385
	80	1,347	5,231	— 1,486	2,189	— 1,267
	100	1,256	4,779	— 1,351	1,975	— 1,136
	120	1,205	4,453	— 1,254	1,822	— 1,041
F	40	25,65	33,00	— 4,060	— 0,2826	3,442
	60	21,66	27,66	— 3,454	— 0,1436	2,815
	80	19,32	24,57	— 3,099	— 0,07558	2,463
	100	17,73	22,51	— 3,855	— 0,04520	2,240
	120	16,57	21,04	— 2,679	— 0,02160	2,079
Cl	40	35,11	71,73	— 17,46	26,13	— 16,08
	60	31,32	59,43	— 14,07	20,69	— 12,65
	80	28,57	52,48	— 12,30	18,04	— 11,06
	100	26,59	47,90	— 11,18	16,36	— 10,04
	120	25,18	44,62	— 10,38	15,19	— 9,337
Ar	40	32,68	74,87	— 17,97	26,26	— 15,71
	60	29,02	62,23	— 14,61	21,19	— 12,74
	80	26,67	54,95	— 12,77	18,49	— 11,16
	100	24,91	50,16	— 11,61	16,79	— 10,16
	120	23,65	46,73	— 10,78	15,61	— 9,465
Co	40	49,06	91,62	— 15,29	10,47	0,4633
	60	45,23	76,42	— 12,00	7,175	1,247
	80	42,66	66,19	— 9,991	5,626	1,266
	100	39,99	60,62	— 9,088	5,165	1,050
	120	38,00	56,61	— 8,454	4,855	0,8974
Kr	40	87,36	99,99	— 13,23	1,621	7,973
	60	81,60	83,09	— 9,515	— 1,451	7,932
	80	76,80	73,38	— 7,765	— 2,256	7,327
	100	72,78	67,03	— 6,792	— 2,393	6,706
	120	69,48	62,53	— 6,200	— 2,265	6,121

Tab. 11 b. Zusammenstellung der Anpassungsparameter für die Phasen der komplexen Streufaktoren $\eta(s)$ gemäß der Funktion $P^{(4)}(s)$ bei verschiedenen Beschleunigungsspannungen. U_B in kV.

der die Intensitätsverteilung der Elektronen aus den photographischen Aufnahmen bestimmt wird, bei ungefähr $\pm 5 - 10\%$ liegt, dürften die hier angegebenen Näherungsfunktionen für die Beträge und Phasen der komplexen Streufaktoren zur Auswertung von Elektronenbeugungsmessungen zur Strukturbestimmung von Molekülen im Gaszustand über den ge-

samten experimentell zugänglichen Winkelbereich vollauf ausreichend sein.

Ich danke Herrn Prof. Dr. W. ZEIL für sein stets förderndes Interesse an dieser Arbeit. Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für finanzielle Unterstützung, die es ermöglichte, die Berechnungen am Deutschen Rechenzentrum in Darmstadt durchzuführen.