

# Der Compton-Effekt an relativistischen Elektronen

EBERHARD HAUG

Lehrstuhl für Theoretische Astrophysik der Universität Tübingen

(Z. Naturforsch. 23 a, 1295—1301 [1968]; eingegangen am 1. Juni 1968)

Für den Compton-Effekt an bewegten Elektronen wird der differentielle Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/dk_2$  ( $k_2$  = Energie der gestreuten Photonen) als Funktion des Winkels  $\Theta_1$  zwischen dem einfallenden Photon und Elektron berechnet. Mit Hilfe einer daraus gewonnenen Näherungsformel für hohe Elektronenenergien  $\varepsilon_1$  und Photonenenergien  $k_1 \ll \varepsilon_1$  wird der mittlere effektive Wirkungsquerschnitt  $\bar{\sigma}(\varepsilon_1, k_1, k_2)$  bei isotroper Photonenverteilung abgeleitet. Man erhält eine Verallgemeinerung der Formel von GINZBURG und SIROVATSKIJ. Der Wirkungsquerschnitt ist für verschiedene Elektronenenergien, die auch in der Astrophysik von Bedeutung sind, graphisch dargestellt.

## 1. Einleitung

Mit Hilfe des Compton-Effekts an relativistischen Elektronen können aus sichtbarem Licht oder anderen niederenergetischen Photonen  $\gamma$ -Strahlen erzeugt werden, deren Energie von derselben Größenordnung wie die der Elektronen ist. Während sich ARUTYUNIAN und TUMANIAN<sup>1</sup> auf den Fall beschränkt haben, daß die primären Elektronen und Photonen in entgegengesetzter Richtung fliegen, wird im folgenden das  $\gamma$ -Spektrum für beliebige Winkel zwischen den Impulsrichtungen der einfallenden Elektronen und Quanten berechnet. Außerdem wird der mittlere effektive Wirkungsquerschnitt für isotrope Photonenverteilung angegeben. Die Ergebnisse können vor allem für astrophysikalische Untersuchungen von Bedeutung sein.

## 2. Die Kinematik des Prozesses

Aus der Erhaltung des Viererimpulses erhält man für die Energie des gestreuten Photons:

$$k_2 = k_1 \frac{\varepsilon_1 - p_1 \cos \Theta_1}{\varepsilon_1 - p_1 \cos \Theta_2 + k_1 (1 - \cos \Theta)} \quad (1)$$

Dabei sind  $\varepsilon_1$  und  $p_1$  Energie bzw. Impuls des einfallenden Elektrons,  $k_1$  die Energie des einfallenden Photons,  $\Theta_1$  und  $\Theta_2$  die Winkel zwischen der Bewegungsrichtung des primären Elektrons und der Flugrichtung des einfallenden bzw. gestreuten Photons, sowie  $\Theta$  der Ablenkungswinkel des Photons (Abb. 1). Die Energien werden in Einheiten der Elektronenruheenergie  $m c^2$ , die Impulse in Einheiten von  $m c$  ausgedrückt.

<sup>1</sup> F. R. ARUTYUNIAN u. V. A. TUMANIAN, Phys. Letters 4, 176 [1963].

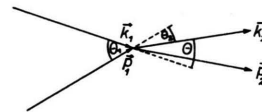


Abb. 1. Bezeichnung der Impulse und Winkel beim Compton-Effekt.

Führt man den Azimutwinkel  $\varphi$  zwischen den von den Vektoren  $\mathbf{p}_1$  und  $\mathbf{k}_1$  bzw.  $\mathbf{p}_1$  und  $\mathbf{k}_2$  aufgespannten Ebenen ein, so hat  $\cos \Theta$  die Form

$$\cos \Theta = \cos \Theta_1 \cos \Theta_2 + \sin \Theta_1 \sin \Theta_2 \cos \varphi. \quad (2)$$

Die Photonenenergie  $k_2$  nimmt bei festem Winkel  $\Theta_1$  ihre Extremalwerte für

$$\sin \Theta_{2 \text{ extr.}} = \pm \frac{k_1 \sin \Theta_1}{[p_1^2 + k_1^2 + 2 p_1 k_1 \cos \Theta_1]^{1/2}},$$

$$\cos \Theta_{2 \text{ extr.}} = \pm \frac{p_1 + k_1 \cos \Theta_1}{[p_1^2 + k_1^2 + 2 p_1 k_1 \cos \Theta_1]^{1/2}}$$

und  $\varphi = 0$  an.

Der größte bzw. kleinste Wert von  $k_2$  ist

$$k_{2 \text{ max}}(\Theta_1) = \frac{k_1 (\varepsilon_1 - p_1 \cos \Theta_1)}{\varepsilon_1 + k_1 - [p_1^2 + k_1^2 + 2 p_1 k_1 \cos \Theta_1]^{1/2}} \quad (3)$$

bzw.

$$k_{2 \text{ min}}(\Theta_1) = \frac{k_1 (\varepsilon_1 - p_1 \cos \Theta_1)}{\varepsilon_1 + k_1 + [p_1^2 + k_1^2 + 2 p_1 k_1 \cos \Theta_1]^{1/2}}. \quad (4)$$

Ihr absolutes Maximum erreicht die Photonenenergie  $k_2$  für  $k_1 \leq \frac{1}{2} (p_1 + 1 - \varepsilon_1)$ , wenn das primäre Elektron und Photon in entgegengesetzter Richtung fliegen ( $\Theta_1 = \pi$ ) und das Lichtquant um  $180^\circ$  gestreut wird ( $\Theta_2 = 0$ ). Aus (3) folgt dafür

$$k_{2 \text{ max}} = \frac{k_1 (\varepsilon_1 + p_1)}{\varepsilon_1 - p_1 + 2 k_1}; \quad k_1 \leq (p_1 + 1 - \varepsilon_1). \quad (5 a)$$

Ist  $\varepsilon_1 \gg 1$ , so gilt

$$k_{2 \text{ max}} \approx \varepsilon_1 \frac{4 \varepsilon_1 k_1}{1 + 4 \varepsilon_1 k_1}; \quad k_1 < \frac{1}{2}. \quad (5 b)$$



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

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

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

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

Diese Energie ist ungefähr gleich  $4 \varepsilon_1^2 k_1$  für  $4 \varepsilon_1 k_1 \ll 1$  und nähert sich für  $4 \varepsilon_1 k_1 \gg 1$  der Elektronenanzugsenergie  $\varepsilon_1$ .

Im Fall  $k_1 \geq \frac{1}{2}(p_1 + 1 - \varepsilon_1)$  ist der Winkel maximaler Energie  $k_2$  gegeben durch

$$\cos \Theta_1 = \frac{(\varepsilon_1 - 1) \cdot (k_1 - 1)}{p_1 k_1},$$

und es ist

$$k_{2 \max} = \varepsilon_1 + k_1 - 1; k_1 \geq \frac{1}{2}(p_1 + 1 - \varepsilon_1). \quad (6)$$

Das absolute Minimum von  $k_2$  erhält man aus (4) für  $\Theta_1 = 0$ :

$$k_{2 \min} = k_1 \frac{\varepsilon_1 - p_1}{\varepsilon_1 + p_1 + 2 k_1} < k_1. \quad (7)$$

$k_{2 \min}$  ist für  $\varepsilon_1 \gg 1$  praktisch gleich Null.

Wählt man den Azimutwinkel  $\varphi = \pi/2$ , so ist bei vorgegebenem  $\Theta_1$  für  $p_1 + k_1 \cos \Theta_1 \geq 0$  der größte bzw. kleinste Wert von  $k_2$

$$k_{2 \max}'(\Theta_1) = \frac{k_1(\varepsilon_1 - p_1 \cos \Theta_1)}{\varepsilon_1 - p_1 + k_1(1 - \cos \Theta_1)} \quad (8)$$

bzw.

$$k_{2 \min}'(\Theta_1) = \frac{k_1(\varepsilon_1 - p_1 \cos \Theta_1)}{\varepsilon_1 + p_1 + k_1(1 + \cos \Theta_1)}. \quad (9)$$

Für  $p_1 \gg k_1$  ist in sehr guter Näherung

$$k_{2 \max}'(\Theta_1) \approx k_{2 \min}'(\Theta_1),$$

d. h. die Photonenenergie  $k_2$  ist praktisch unabhängig von  $\varphi$ .

An den Stellen  $\Theta_1 = 0$  und  $\Theta_1 = \pi$  ist  $k_{2 \max}'(\Theta_1)$  bzw.  $k_{2 \min}'(\Theta_1)$  sogar genau gleich  $k_{2 \max}(\Theta_1)$  bzw.  $k_{2 \min}(\Theta_1)$ .

### 3. Wirkungsquerschnitte

Der differentielle Wirkungsquerschnitt für den Compton-Effekt an bewegten Elektronen ist<sup>2</sup>

$$d\sigma = \frac{2 r_0^2}{x_1^2} \left\{ \frac{x_1}{x_2} + \frac{x_2}{x_1} + 4 \left( \frac{1}{x_1} - \frac{1}{x_2} \right) + 4 \left( \frac{1}{x_1} - \frac{1}{x_2} \right)^2 \right\} \cdot k_2^2 d\Omega_2. \quad (10)$$

$r_0$  ist der klassische Elektronenradius,

$$d\Omega_2 = \sin \Theta_2 d\Theta_2 d\varphi = -d(\cos \Theta_2) d\varphi \quad (11)$$

der infinitesimale Raumwinkel in Richtung des ge-

streten Lichtquants und

$$x_1 = 2 k_1 (\varepsilon_1 - p_1 \cos \Theta_1), \quad (12)$$

$$x_2 = 2 k_2 (\varepsilon_1 - p_1 \cos \Theta_2). \quad (13)$$

Das Energiespektrum der gestreuten Photonen errechnet sich nach der Gleichung

$$\frac{d\sigma}{dk_2} = \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma}{d(\cos \Theta_2) d\varphi} \frac{d(\cos \Theta_2)}{dk_2} d\varphi. \quad (14)$$

Aus (1) und (2) folgt

$$C \sin \Theta_2 = A - B \cos \Theta_2 \quad (15)$$

$$\text{mit} \quad A = (\varepsilon_1 + k_1) k_2 - \frac{1}{2} x_1, \quad (16)$$

$$B = k_2(p_1 + k_1 \cos \Theta_1) \quad (17)$$

$$\text{und} \quad C = k_1 k_2 \sin \Theta_1 \cos \varphi. \quad (18)$$

Daraus ergibt sich

$$\cos \Theta_2 = \frac{A B \mp C [B^2 + C^2 - A^2]^{1/2}}{B^2 + C^2} \quad (19 a)$$

$$\text{und} \quad \sin \Theta_2 = \frac{A C \pm B [B^2 + C^2 - A^2]^{1/2}}{B^2 + C^2}, \quad (19 b)$$

wobei  $B^2 + C^2 - A^2 \geq 0$  vorausgesetzt ist. In den Gln. (19) kann man ohne Einschränkung der Allgemeinheit das obere Vorzeichen wählen; dann ist für  $B^2 - A^2 \geq 0$ :

$$\sin \Theta_2 \geq 0 \quad (0 \leq \Theta_2 \leq \pi).$$

Durch Differentiation von  $\cos \Theta_2$  nach  $k_2$  erhält man

$$\frac{d(\cos \Theta_2)}{dk_2} = \frac{x_1}{2 k_2 (B^2 + C^2)} \left\{ B + \frac{A C}{[B^2 + C^2 - A^2]^{1/2}} \right\}. \quad (20)$$

Nun werden die Gln. (10) und (20) in (14) eingesetzt:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dk_2} = r_0^2 \frac{k_2}{x_1} \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{x_1}{x_2} + \frac{x_2}{x_1} + 4 \left( \frac{1}{x_1} - \frac{1}{x_2} \right) + 4 \left( \frac{1}{x_1} - \frac{1}{x_2} \right)^2 \right\} \\ \cdot \frac{1}{B^2 + C^2} \left\{ B + \frac{A C}{[B^2 + C^2 - A^2]^{1/2}} \right\} d\varphi. \end{aligned} \quad (21)$$

für  $B^2 - A^2 \geq 0$ .

$x_2$  hat die Gestalt

$$x_2 = 2 k_2 \left\{ \varepsilon_1 + \frac{p_1}{B^2 + C^2} (C [B^2 + C^2 - A^2]^{1/2} - A B) \right\}. \quad (13 a)$$

Setzt man dies in (21) ein, so gilt aus Symmetriegründen ( $C \sim \cos \varphi$ )

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dk_2} = 4 r_0^2 \frac{k_2}{x_1} \int_0^{\pi/2} \left\{ \frac{2}{x_1} \left( \frac{2}{x_1} + 2 + \varepsilon_1 k_2 \right) \frac{B}{B^2 + C^2} - \frac{2 p_1 k_2}{x_1} \frac{A (B^2 - C^2)}{(B^2 + C^2)^2} - \frac{1}{k_2} \left( \frac{4}{x_1} + 2 - \frac{x_1}{2} \right) \frac{\varepsilon_1 B - p_1 A}{(\varepsilon_1 B - p_1 A)^2 + C^2} \right. \\ \left. + \frac{B [(\varepsilon_1 B - p_1 A)^2 - C^2] + 2 \varepsilon_1 C^2 (\varepsilon_1 B - p_1 A)}{k_2^2 [(\varepsilon_1 B - p_1 A)^2 + C^2]^2} \right\} d\varphi \end{aligned} \quad (22)$$

für  $B^2 - A^2 \geq 0$ .

<sup>2</sup> A. J. ACHESON u. W. B. BERESTEZKI, Quantenelektrodynamik, Leipzig 1962. § 28, Gln. 28.15 und 28.16'.

Führt man die Abkürzung

$$D = k_1 k_2 \sin \Theta_1 \quad (23)$$

ein, so daß

$$C = D \cos \varphi \quad (18 \text{ a})$$

gilt, ergibt die Integration in Gl. (22)

$$\frac{d\sigma}{dk_2} = 2\pi r_0^2 \frac{k_2}{x_1} \left\{ \frac{4}{x_1^2} \frac{1+x_1}{[B^2+D^2]^{1/2}} + \frac{2k_2}{x_1} \frac{B(\varepsilon_1 B - p_1 A) + \varepsilon_1 D^2}{(B^2+D^2)^{3/2}} \right. \\ \left. - \frac{1}{k_2} \left( \frac{4}{x_1} + 2 - \frac{x_1}{2} \right) \frac{1}{[(\varepsilon_1 B - p_1 A)^2 + D^2]^{1/2}} + \frac{1}{k_2^2} \frac{B(\varepsilon_1 B - p_1 A) + \varepsilon_1 D^2}{[(\varepsilon_1 B - p_1 A)^2 + D^2]^{1/2}} \right\}. \quad (24)$$

Die Bedingung  $B^2 - A^2 \geq 0$  bedeutet für  $p_1 + k_1 \cos \Theta_1 \geq 0$

$$k_{2\min}'(\Theta_1) = \frac{k_1(\varepsilon_1 - p_1 \cos \Theta_1)}{\varepsilon_1 + p_1 + k_1(1 + \cos \Theta_1)} \leq k_2 \leq k_{2\max}'(\Theta_1) \\ = \frac{k_1(\varepsilon_1 - p_1 \cos \Theta_1)}{\varepsilon_1 - p_1 + k_1(1 - \cos \Theta_1)}. \quad (24 \text{ a})$$

Das Photonenspektrum für

$$k_{2\min}(\Theta_1) \leq k_2 \leq k_{2\max}(\Theta_1)$$

erhält man, wenn in Gl. (22) als obere Integrationsgrenze nicht  $\pi/2$ , sondern  $\varphi_0$  eingesetzt wird, wobei  $\varphi_0$  durch

$$\cos \varphi_0 = \begin{cases} 0 & \text{für } B^2 - A^2 \geq 0 \\ \left[ \frac{A^2 - B^2}{D^2} \right]^{1/2} & \text{für } 0 \leq A^2 - B^2 \leq D^2, \quad 0 \leq \varphi_0 \leq \frac{1}{2}\pi \end{cases} \quad (25)$$

definiert ist. Dann gilt

$$\frac{d\sigma}{dk_2} = 4\pi r_0^2 \frac{k_2}{x_1} \left\{ \frac{2}{x_1 [B^2+D^2]^{1/2}} \arctg \left( \frac{B \operatorname{tg} \varphi_0}{[B^2+D^2]^{1/2}} \right) \left[ \frac{2}{x_1} (1+x_1) + k_2 \frac{B(\varepsilon_1 B - p_1 A) + \varepsilon_1 D^2}{B^2+D^2} \right] \right. \\ + \frac{2p_1 k_2}{x_1} \frac{A D^2 \sin \varphi_0 \cos \varphi_0}{(B^2+D^2)(B^2+D^2 \cos^2 \varphi_0)} + \frac{1}{k_2 [(\varepsilon_1 B - p_1 A)^2 + D^2]^{1/2}} \\ \cdot \arctg \left[ \frac{(\varepsilon_1 B - p_1 A) \operatorname{tg} \varphi_0}{\sqrt{(\varepsilon_1 B - p_1 A)^2 + D^2}} \right] \left[ \frac{x_1}{2} - 2 - \frac{4}{x_1} + \frac{1}{k_2} \frac{B(\varepsilon_1 B - p_1 A) + \varepsilon_1 D^2}{(\varepsilon_1 B - p_1 A) + D^2} \right] \\ \left. - \frac{1}{k_2^2} \frac{D^2 [\varepsilon_1 (\varepsilon_1 B - p_1 A) + B] \sin \varphi_0 \cos \varphi_0}{[(\varepsilon_1 B - p_1 A)^2 + D^2] [(\varepsilon_1 B - p_1 A)^2 + D^2 \cos^2 \varphi_0]} \right\} \quad (26)$$

$0 \leq A^2 - B^2 \leq D^2$  bedeutet

$$\left. \begin{aligned} k_{2\min}(\Theta_1) &\leq k_2 \leq k_{2\min}'(\Theta_1) \\ k_{2\max}'(\Theta_1) &\leq k_2 \leq k_{2\max}(\Theta_1) \end{aligned} \right\}. \quad (27)$$

len – Energiebereichen das Abfallen des Wirkungsquerschnittes auf Null wieder. Für  $\varphi_0 = \pi/2$  geht (26) in (24) über.

In dem Spezialfall  $\Theta_1 = \pi$  erhält man aus (24)

Gl. (26) gibt in diesen – für  $p_1 \gg k_1$  sehr schma- mit den Gln. (16), (17) und (23)

$$\left( \frac{d\sigma}{dk_2} \right)_{\Theta_1=\pi} = \pi r_0^2 \frac{\varepsilon_1 - p_1}{k_1(p_1 - k_1)} \left\{ \frac{p_1 - k_1}{p_1 - k_2} + \frac{p_1 - k_2}{p_1 - k_1} - 2 \frac{(\varepsilon_1 - p_1)(k_2 - k_1)}{k_1(p_1 - k_2)} + \left[ \frac{(\varepsilon_1 - p_1)(k_2 - k_1)}{k_1(p_1 - k_2)} \right]^2 \right\} \quad (28)$$

für  $k_1 \leq k_2 \leq k_{2\max}$ .

Bei relativistischen Elektronenenergien, d. h. für  $\varepsilon_1 \gg 1$ , und mit den zusätzlichen Voraussetzungen  $\varepsilon_1 \gg k_1$  und  $\Theta_1 \gg 1/\varepsilon_1$  vereinfacht sich Gl. (24) zu

$$\frac{d\sigma}{dk_2} = \frac{2\pi r_0^2}{\varepsilon_1 x_1} \left\{ \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 - k_2} + \frac{\varepsilon_1 - k_2}{\varepsilon_1} - \frac{4k_2}{(\varepsilon_1 - k_2)x_1} + \left[ \frac{2k_2}{(\varepsilon_1 - k_2)x_1} \right]^2 \right\}, \quad (29)$$

gültig für

$$\frac{x_1}{4\varepsilon_1} \leq k_2 \leq k_{2\max}'(\Theta_1) = \frac{\varepsilon_1 x_1}{1 + 2\varepsilon_1 k_1(1 - \cos \Theta_1)} \approx \frac{\varepsilon_1 x_1}{1 + x_1}. \quad (29 \text{ a})$$

Dieser Ausdruck geht für  $\Theta_1 = \pi$  in die Formel (4) und (29 a) von ARUTYUNIAN und TUMANIAN<sup>1</sup> über.

Hält man  $\frac{k_2}{k_{2\max}(\Theta_1)}$  konstant, d. h. setzt man  $k_2 = \delta \frac{\varepsilon_1 x_1}{1+x_1}$  mit  $\delta \leq 1$ , so folgt aus Gl. (29) für  $x_1 \ll 1$

$$\frac{d\sigma}{dk_2} \approx \frac{4\pi r_0^2}{\varepsilon_1 x_1} \{1 - 2\delta(1-\delta)\}. \quad (30)$$

Das bedeutet, daß die Photonenpektren für  $x_1 \ll 1$  zu der Geraden  $k_2 = \frac{1}{2} k_{2\max}(\Theta_1)$  symmetrisch sind. Wegen der Annahme  $\Theta_1 \gg 1/\varepsilon_1$  ist

$$x_1 \approx 2\varepsilon_1 k_1 (1 - \cos \Theta_1).$$

Das heißt, der Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/dk_2$  ist für feste Winkel  $\Theta_1$ , die nicht sehr nahe bei Null liegen, proportional zu  $1/\varepsilon_1^2 k_1$ .

Im Falle der Photonenstreuung an bewegten Teilchen ist die Stromdichte der Lichtquanten

$$I = \varrho c \left(1 - \frac{p_1}{\varepsilon_1} \cos \Theta_1\right), \quad (31)$$

wobei  $\varrho$  die Photonendichte ist. Deshalb ist es sinnvoll, als effektiven Wirkungsquerschnitt für den Compton-Effekt

$$\Phi(\varepsilon_1, k_1, k_2, \Theta_1) = \frac{d\sigma}{dk_2} \left(1 - \frac{p_1}{\varepsilon_1} \cos \Theta_1\right) \quad (32)$$

zu definieren. Wegen

$$\frac{x_1}{2\varepsilon_1 k_1} = 1 - \frac{p_1}{\varepsilon_1} \cos \Theta_1$$

folgt für  $\varepsilon_1 \gg 1$  und  $k_1 \ll \varepsilon_1$  aus Gl. (29)

$$\Phi(\varepsilon_1, k_1, k_2, \Theta_1) = \frac{\pi r_0^2}{\varepsilon_1^2 k_1} \left\{ \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 - k_2} + \frac{\varepsilon_1 - k_2}{\varepsilon_1} - \frac{4k_2}{(\varepsilon_1 - k_2)x_1} + \left[ \frac{2k_2}{(\varepsilon_1 - k_2)x_1} \right]^2 \right\}. \quad (33)$$

Wird noch zusätzlich  $x_1 \ll 1$  vorausgesetzt, so ergibt Gl. (30)

$$\Phi(\varepsilon_1, k_1, k_2, \Theta_1) \approx \frac{2\pi r_0^2}{\varepsilon_1^2 k_1} \{1 - 2\delta(1-\delta)\}. \quad (34)$$

Hier ist also der effektive Wirkungsquerschnitt unabhängig vom Winkel  $\Theta_1$ .

Integriert man  $d\sigma/dk_2$  über die Photonenenergie  $k_2$ , so erhält man den totalen Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  für den Compton-Effekt an bewegten Elektronen. Für  $\varepsilon_1 \gg 1$  und  $k_1 \ll \varepsilon_1$  folgt aus den Gln. (29)

$$\sigma = \int_{\frac{x_1}{4\varepsilon_1}}^{\frac{\varepsilon_1 x_1}{1+x_1}} \frac{d\sigma}{dk_2} dk_2 = \frac{2\pi r_0^2}{x_1} \left\{ \frac{8}{x_1} + \frac{x_1}{1+x_1} - \frac{x_1^2}{2(1+x_1)^2} + \left(1 - \frac{4}{x_1} - \frac{8}{x_1^2}\right) \ln(1+x_1) \right\}. \quad (35)$$

Dieser Ausdruck nimmt für  $x_1 \ll 1$  die Form

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \left\{ 1 - x_1 + 1,3 x_1^2 - \frac{133}{80} x_1^3 + \dots \right\} \quad (35 a)$$

an, d. h. der totale Wirkungsquerschnitt nähert sich dem Thomson-Wirkungsquerschnitt  $\sigma_0 = \frac{8\pi}{3} r_0^2$ .

Die für astrophysikalische Untersuchungen wichtigste Größe beim Compton-Effekt an bewegten Elektronen ist der mittlere effektive Wirkungsquerschnitt

$$\bar{\Phi}(\varepsilon_1, k_1, k_2) \equiv \int_{\cos \Theta_u}^{\cos \Theta_0} \Phi(\varepsilon_1, k_1, k_2, \Theta_1) f(\Theta_1) d\Omega_1 = 2\pi \int_{\cos \Theta_u}^{\cos \Theta_0} \Phi(\varepsilon_1, k_1, k_2, \Theta_1) f(\Theta_1) d(\cos \Theta_1), \quad (36)$$

wobei  $f(\Theta_1)$  die Verteilungsfunktion der Winkel zwischen den einfallenden Elektronen und Photonen mit  $\int f(\Theta_1) d\Omega_1 = 1$  ist. Die Grenzwinkel  $\Theta_u$  und  $\Theta_0$  lassen sich aus der Bedingung  $B^2 - A^2 \geq 0$ , unter der Gl. (24) gilt, gewinnen: Mit der Voraussetzung  $k_1 \leq \frac{1}{2}(p_1 + 1 - \varepsilon_1)$  gilt

$$\cos \Theta_u = \begin{cases} -1 & \text{für } k_1 \leq k_2 \leq k_{2\max} \\ \frac{\varepsilon_1 - k_2}{p_1 + k_2} - \frac{k_2(\varepsilon_1 + p_1)}{k_1(p_1 + k_2)} & \text{für } k_{2\min} \leq k_2 \leq k_1 \end{cases}, \quad (37)$$

$$\cos \Theta_0 = \begin{cases} \frac{\varepsilon_1 - k_2}{p_1 - k_2} - \frac{k_2(\varepsilon_1 - p_1)}{k_1(p_1 - k_2)} & \text{für } k_1 \leq k_2 \leq k_{2\max} \\ 1 & \text{für } k_{2\min} \leq k_2 \leq k_1 \end{cases}. \quad (38)$$

Für  $\varepsilon_1 \gg 1$  und  $k_1 \ll \varepsilon_1$  wird

$$\cos \Theta_u = \begin{cases} -1 & \text{für } k_1 \leq k_2 \leq k_{2\max} \\ 1 - \frac{2k_2}{k_1} & \text{für } k_{2\min} \leq k_2 \leq k_1 \end{cases},$$

$$\cos \Theta_0 = \begin{cases} 1 - \frac{k_2}{2\varepsilon_1 k_1 (\varepsilon_1 - k_2)} & \text{für } k_1 \leq k_2 \leq k_{2\max} \\ 1 & \text{für } k_{2\min} \leq k_2 \leq k_1 \end{cases}.$$

Nimmt man eine isotrope Verteilung der Winkel  $\Theta_1$  an, d. h.

$$f(\Theta_1) = 1/4\pi, \quad (39)$$

so folgt aus Gl. (33)

$$\bar{\Phi}(\varepsilon_1, k_1, k_2) = \frac{\pi r_0^2}{\varepsilon_1^2 k_1} \left\{ \frac{\varepsilon_1 - k_2}{\varepsilon_1} + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 - k_2} - \frac{k_2}{4\varepsilon_1^2 k_1} + \frac{k_2}{\varepsilon_1 k_1 (\varepsilon_1 - k_2)} \cdot \left[ 1 + \ln \frac{k_2}{4\varepsilon_1 k_1 (\varepsilon_1 - k_2)} \right] - \frac{k_2}{4k_1 (\varepsilon_1 - k_2)^2} \cdot \left( 1 + \frac{k_2}{\varepsilon_1^2 k_1} \right) \right\} \quad (40)$$

$$\text{für } k_1 \leq k_2 \leq k_{2\max} = \frac{4 \varepsilon_1^2 k_1}{1 + 4 \varepsilon_1 k_1}. \quad (40 \text{ a})$$

Gl. (40) ist eine Verallgemeinerung der Formel von GINZBURG und SIROVATSKIJ<sup>3</sup>. Setzt man nämlich  $4 \varepsilon_1 k_1 \ll 1$  voraus, so wird  $k_{2\max} \ll \varepsilon_1$ , und es gilt

$$\bar{\Phi}(\varepsilon_1, k_1, k_2) \approx \frac{\pi r_0^2}{4 \varepsilon_1^3 k_1^2} \cdot \left\{ 8 \varepsilon_1 k_1 + \frac{2 k_2}{\varepsilon_1} - \frac{k_2^2}{\varepsilon_1^3 k_1} + \frac{4 k_2}{\varepsilon_1} \ln \frac{k_2}{4 \varepsilon_1^2 k_1} \right\}. \quad (41)$$

Der totale effektive Wirkungsquerschnitt

$$\bar{\Phi}(\varepsilon_1, k_1) = \int_{k_{2\min}}^{k_{2\max}} \bar{\Phi}(\varepsilon_1, k_1, k_2) dk_2 \quad (42)$$

für die Compton-Streuung isotrop verteilter Photonen an hochenergetischen Elektronen ist

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}(\varepsilon_1, k_1) = & \frac{\pi r_0^2}{\varepsilon_1^2 k_1^2} \left\{ \frac{2 \varepsilon_1^2 k_1^2}{1 + 4 \varepsilon_1 k_1} \right. \\ & + \left( \frac{1}{2 \varepsilon_1 k_1} + \frac{5}{4} + \varepsilon_1 k_1 \right) \ln(1 + 4 \varepsilon_1 k_1) \\ & \left. - 2 - \varepsilon_1 k_1 + \frac{1}{\varepsilon_1} \int_{k_1}^{k_{2\max}} \frac{k_2}{\varepsilon_1 - k_2} \ln \frac{k_2}{4 \varepsilon_1 k_1 (\varepsilon_1 - k_2)} dk_2 \right\}. \end{aligned} \quad (43)$$

Dieser Ausdruck wird für  $\varepsilon_1 k_1 \ll 1$  wieder gleich dem Thomson-Wirkungsquerschnitt  $\sigma_0 = \frac{8 \pi}{3} r_0^2$ .

<sup>3</sup> V. L. GINZBURG u. S. I. SIROVATSKIJ, The Origin of Cosmic Rays; Pergamon Press, New York 1964, Gl. (19.39).

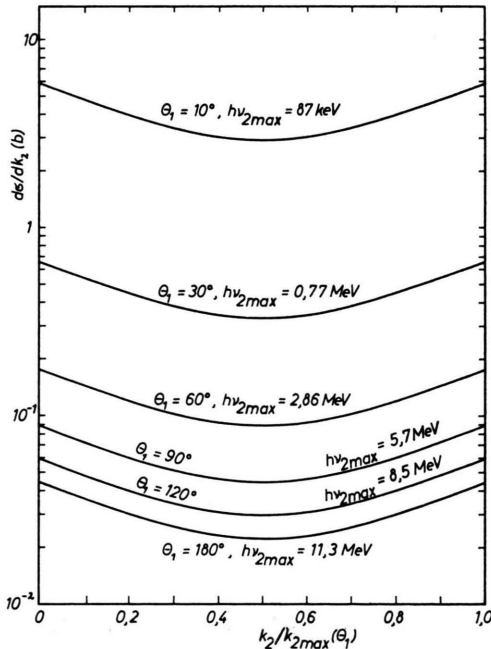


Abb. 3. Energieverteilung der gestreuten Photonen für  $E_1 = 500 \text{ MeV}$ ;  $h \nu_1 = 3 \text{ eV}$ .

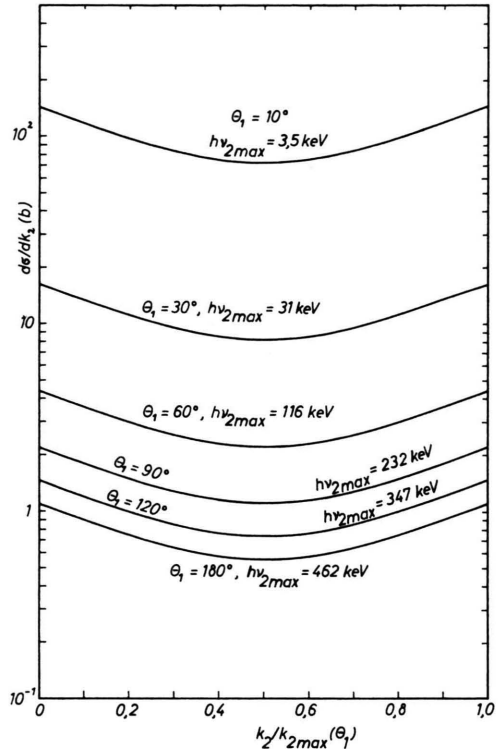


Abb. 2. Energieverteilung der gestreuten Photonen für  $E_1 = 100 \text{ MeV}$ ,  $h \nu_1 \equiv m c^2 \cdot k_1 = 3 \text{ eV}$ ;  $h \nu_{2\max} = m c^2 \cdot k_{2\max}(\theta_1)$ .

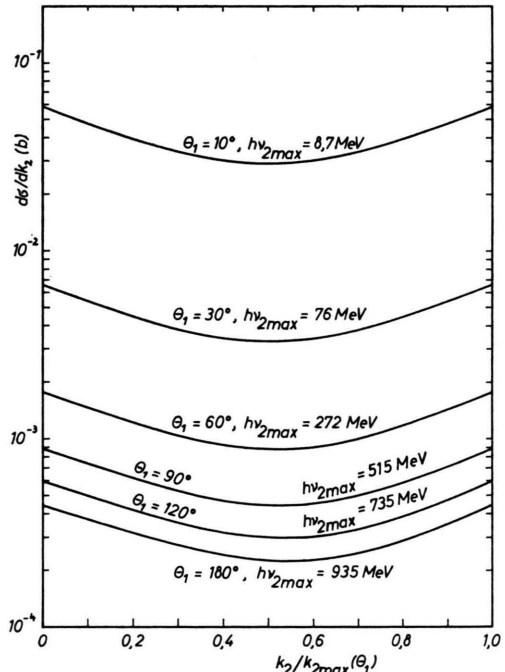


Abb. 4. Energieverteilung der gestreuten Photonen für  $E_1 = 5000 \text{ MeV}$ ;  $h \nu_1 = 3 \text{ eV}$ .

#### 4. Ergebnisse

Die Abb. 2–4 zeigen die Photonenspektren für die Streuung von sichtbarem Licht der Energie  $h\nu_1 = 3 \text{ eV}$  (das entspricht der Wellenlänge  $\lambda_1 = 4133 \text{ \AA}$ ) an Elektronen der kinetischen Energie  $E_1 = 100 \text{ MeV}$ ,  $E_1 = 500 \text{ MeV}$  und  $E_1 = 5000 \text{ MeV}$ ; Parameter ist der Winkel  $\Theta_1$  zwischen den einfallenden Elektronen und Photonen. Je kleiner  $\Theta_1$  ist, desto geringer wird nach Gl. (24 a) die Photonenenergie  $h\nu_2 = m c^2 k_2$ . Da die Voraussetzung  $x_1 \ll 1$  gut erfüllt ist, sind die Spektren fast genau sym-

metrisch zu  $k_2 = \frac{1}{2} k_{2\text{max}}'(\Theta_1)$ . Beim Vergleich der Abb. 2–4 sieht man die Abnahme des Wirkungsquerschnittes mit  $1/\varepsilon_1^2$  für konstantes  $k_1$ ,  $k_2/k_{2\text{max}}'(\Theta_1)$  und  $\Theta_1$ . Der effektive Wirkungsquerschnitt ist bei den gewählten Energien nahezu unabhängig von  $\Theta_1$ . Er entspricht den Kurven für  $\Theta_1 = 90^\circ$ .

In den Abb. 5 und 6 ist die Photonenenergie  $k_2$  als Funktion des Winkels  $\Theta_2$  zwischen der Flugrichtung des einfallenden Elektrons und des gestreuten Quants dargestellt. Nach den Gln. (1), (2) und (8) ist

$$\frac{k_2}{k_{2\text{max}}'(\Theta_1)} = \frac{\varepsilon_1 - p_1 + k_1(1 - \cos \Theta_1)}{\varepsilon_1 - p_1 \cos \Theta_2 + k_1(1 - \cos \Theta_1 \cos \Theta_2 - \sin \Theta_1 \sin \Theta_2 \cos \varphi)}. \quad (44)$$

Dieses Verhältnis ist für  $k_1 \ll \varepsilon_1$  unabhängig von  $\varphi$  und nimmt für  $\varepsilon_1 \gg 1$  und  $4\varepsilon_1 k_1 \ll 1$  den Wert

$$\frac{k_2}{k_{2\text{max}}'(\Theta_1)} = \frac{\varepsilon_1 - p_1}{\varepsilon_1 - p_1 \cos \Theta_2} \approx \frac{1}{1 + 2\varepsilon_1^2(1 - \cos \Theta_2)} \quad (44 \text{ a})$$

an, ist also auch unabhängig von  $k_1$  und  $\Theta_1$ . Deshalb ist die Kurve in Abb. 5 ( $E_1 = 100 \text{ MeV}$ ) für alle Energien  $k_1$  und alle Winkel  $\Theta_1$  und  $\varphi$  gültig, solange  $4\varepsilon_1 k_1 \ll 1$  ist, d. h.

$$h\nu_1 \ll 10^{-3} m c^2 \approx 500 \text{ eV}.$$

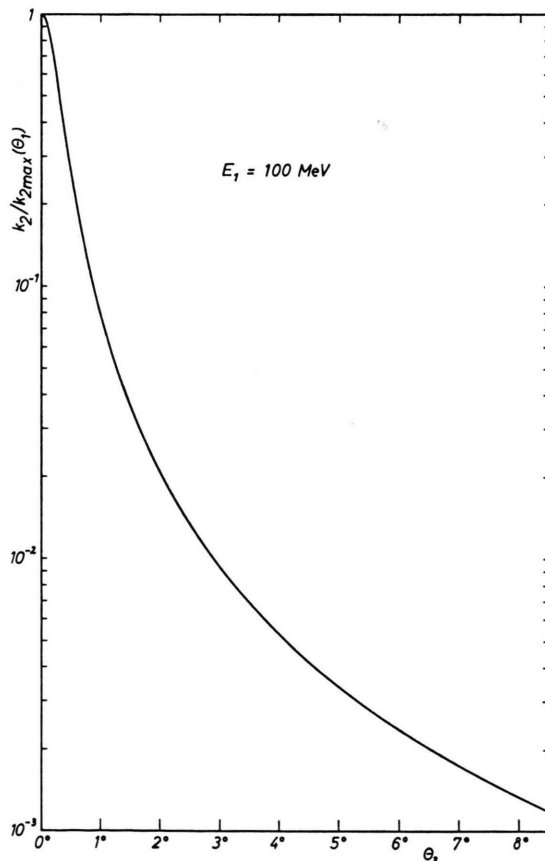


Abb. 5. Energie der gestreuten Photonen als Funktion des Winkels  $\Theta_2$  für  $E_1 = 100 \text{ MeV}$  und  $4\varepsilon_1 k_1 \ll 1$ .

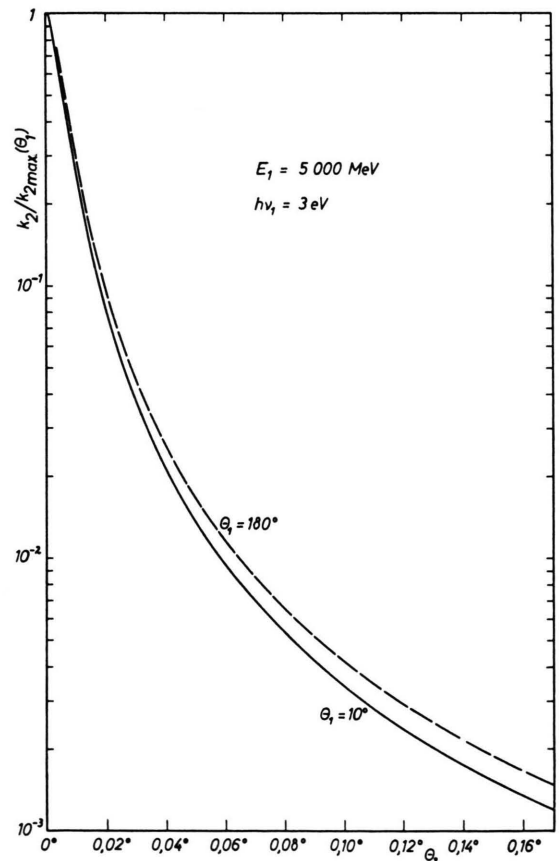


Abb. 6. Energie der gestreuten Photonen als Funktion des Winkels  $\Theta_2$  für  $E_1 = 5000 \text{ MeV}$  und  $h\nu_1 = 3 \text{ eV}$ .



Man sieht, daß die Photonenenergie  $k_2$  nur dann in der Nähe ihres größtmöglichen Wertes ist, wenn das gestreute Quant fast in die gleiche Richtung wie das einfallende Elektron fliegt. Schon bei Abweichungen von ungefähr  $3^\circ$  ist  $k_2$  nur noch  $\frac{1}{100} k_{2\max}(\Theta_1)$ . Für  $E_1 = 5000$  MeV und  $h\nu_1 = 3$  eV ist  $4\varepsilon_1 k_1 \approx 0,23$  und somit nicht mehr klein gegen eins. Es zeigt sich deshalb eine schwache Abhängigkeit des Verhältnisses  $k_2/k_{2\max}'(\Theta_1)$  vom Winkel  $\Theta_1$  (Abb. 6). Bei

diesen extrem hohen Elektronenenergien ist die Energie des gestreuten Photons schon für  $\Theta_2 \approx 0,06^\circ$  auf  $1/100$  seines für einen festen Winkel  $\Theta_1$  möglichen Höchstwertes gesunken.

Herrn Prof. Dr. G. ELWERT danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit und sein förderndes Interesse. Dem Bundesministerium für wissenschaftliche Forschung gilt mein Dank für finanzielle Unterstützung.

## Numerische Lösung der 2- und 3-dimensionalen Schrödinger-Gleichung für beliebige Molekülpotentiale

IV. Transformation des Potentials in ein überall endliches und stetiges Pseudopotential. Rechenprogramm in verzerrten sphärischen bzw. elliptischen Koordinaten mit endlichem Definitionsbereich

FRIEDRICH FRANZ SEELIG

Physikalisch-Chemisches Institut der Universität Marburg

(Z. Naturforsch. **23 a**, 1301—1307 [1968]; eingegangen am 10. Juni 1968)

The method for the numerical solution of the 2- and 3-dimensional Schrödinger equation by iterative variation of numerical trial functions by a digital computer as given in previous sections of this series of papers is improved by two alterations:

1) The wave function is again formulated as a product of a state-specific part that is submitted to variations and a constant part (with respect to the states). The latter is now given in such a way that the cusps at the nuclei are rendered in the correct way.

2) The problem is treated in polar and spheroidal coordinates that are distorted in such a way that the infinite domains of ordinary space are transformed into finite domains of these distorted coordinates. Two programs in FORTRAN IV are sketched, one 2-dimensional for molecules with cylindrical symmetry and the other 3-dimensional for the normal case. Both programs are suited for both types of coordinates. Some states of  $H_2^+$  and  $HeH^{2+}$  are treated as tests. Error in energy is about 0.13 per cent for  $H_2^+$  and about 0.11 per cent for  $HeH^{2+}$  in a relatively coarse mesh ( $20 \times 10$  and  $25 \times 20$  resp.).

Im vorangegangenen Teil I<sup>1</sup> dieser Reihe wurde aus dem Variationsprinzip eine auf rein numerische Testfunktionen anwendbare Methode zur Lösung der Schrödinger-Gleichung formuliert und für den 2-dimensionalen Fall ein Programm beschrieben. Im Teil II<sup>2</sup> wurde diese Methode abgewandelt; es wurde ein Produktansatz für die Funktionen verwendet, bei dem der eine Faktor eine vorgegebene, für alle Orbitale gleiche Exponentialfunktion darstellte, die Spitzen an den Keimen erzeugte, während der andere Faktor für das jeweilige Orbital spezifisch war und aus einer numerischen Ausgangsfunktion durch Punkt-für-Punkt-Variation zum Energieminimum erhalten wurde. Durch diesen Ansatz ergab sich eine Transformation des an den Kernen unendlichen Po-

tentials in ein überall endliches, an den Kernen im allgemeinen jedoch unstetiges Pseudopotential. Ein vorläufiges Rechenprogramm für 3-dimensionale kartesische Koordinaten lieferte befriedigende Resultate. Im Teil III<sup>3</sup> wurde dieses zuletzt genannte Verfahren auf den Spezialfall zylindersymmetrischer Potentiale angewendet, das, in Zylinderkoordinaten formuliert, die Eliminierung der Winkelkoordinate erlaubte und dadurch zu einem 2-dimensionalen Rechenprogramm führte. Inzwischen wurde auch der noch ausstehende eindimensionale Fall von STRATMANN und SEELIG<sup>4</sup> für eindimensionale, verzweigte Systeme, wie sie im eindimensionalen Elektronengasmodell<sup>5</sup> auftreten, behandelt, und zwar nach einem Verfahren, das der ursprünglichen, rein nu-

<sup>1</sup> F. F. SEELIG, Z. Naturforsch. **20 a**, 416 [1965].

<sup>2</sup> F. F. SEELIG, Z. Naturforsch. **21 a**, 1358 [1966].

<sup>3</sup> F. F. SEELIG, Z. Naturforsch. **21 a**, 1368 [1966].

<sup>4</sup> W. STRATMANN u. F. F. SEELIG, Z. Naturforsch. **22 a**, 998 [1967].

<sup>5</sup> Zusammenfassende Darstellung dieser Methode: H. KUHN, in: Optische Anregung organischer Systeme, 2. Internat. Farbensymposium 1964, Verlag Chemie, Weinheim 1966, S. 55.