

Höhere Bornsche Näherungen für die elastische Streuung von Elektronen an Atomen

WOLF-DIETER DUDENHAUSEN

Lehrstuhl für Theoretische Elektronenphysik der Universität Tübingen

(Z. Naturforsch. **24 a**, 747—761 [1969]; eingegangen am 21. Februar 1969)

Higher Born Approximations for Elastic Electron Scattering from Atoms. A theorem analogous to the unitarity relation by Glauber and Schomaker is derived for Born's approximations. For a given potential $\Phi(r) = \mu(\hbar^2/2m) V(r)$ of the scattering atom the n -th approximation f_n for the scattering amplitude is defined as the function resulting from the n -th iterative step of Born's approximation. If $|f_n|^2$ is expanded into a series of powers of the parameter μ , this series up to terms in μ^{n+1} is defined as the n -th approximation for the differential cross section $d\sigma_n/d\Omega$, and not $|f_n|^2$ itself. In this case an extension of the optical theorem $\text{Im } f_{n+1}(0) = (k/4\pi) \sigma_n$ can be derived.

For a potential $\Phi(r) = -(Z e^2/4\pi \epsilon_0 r) \cdot \exp(-r/R) \sum a_i r^i$ exact analytic expressions for the scattering amplitude f_n and the differential cross section $d\sigma_n/d\Omega$ can be given in first and second Born approximations.

An important example is the hydrogen-like atomic potential in which, in contradistinction to Wentzel's model, the electron density $\varrho(r)$ is limited even for $r \rightarrow 0$. For this model, the differential scattering cross section in second Born approximation exceeds the values of the first approximation for all scattering angles, while experimental data indicate a correction of the opposite sign. An estimate of the cross sections in third approximation shows that they are again below the first approximation. These results indicate that the Born's first approximation is not only less complicated but even more accurate than the second one. The absolute values of the scattering amplitudes in first and second approximations diverge considerably even at high energies, mainly due to the imaginary part $\text{Im } f_2(\vartheta)$ of $f_2(\vartheta)$. Therefore, conclusions on the phase $\eta(\vartheta)$ from $\text{Im } f_2(\vartheta)$ do not seem to be reliable.

Die Streuung geladener Teilchen an Potentialfeldern in Bornscher Näherung ist bereits vielfach theoretisch behandelt worden. Eine Zusammenfassung der wichtigsten Streuformeln findet man u. a. bei MOTZ¹. Die meisten Untersuchungen behandeln jedoch nur die erste Bornsche Näherung; eine Ausnahme hiervon bildet die Arbeit von DALITZ², in der die zweite Bornsche Näherung für das Wentzel-Modell

$$\Phi(r) = -(Z e^2/4\pi \epsilon_0 r) \exp(-r/R)$$

hergeleitet wird. Dort fehlen aber numerische Untersuchungen, die einen Schluß auf den Gültigkeitsbereich der ersten Bornschen Näherung gestatten.

Im folgenden soll zuerst untersucht werden, wie sich die Streuamplituden, die differentiellen Streuquerschnitte und die Gesamtwirkungsquerschnitte in der n -ten Näherung am günstigsten darstellen lassen. Die anschließenden Betrachtungen behandeln die Anwendung des Unitaritätsgesetzes von GLAUBER und SCHOMAKER³ auf die Bornschen Näherungen. Insbesondere wird eine Verallgemeinerung des opti-

schen Theorems für die Bornschen Näherungen hergeleitet.

Eine der wichtigsten Anwendungen der Bornschen Näherung ist die Streuung von Elektronen an Atomen. Hierbei werden i. allg. kugelsymmetrische Streuatome vorausgesetzt, für die sich die erste Näherung leicht berechnen läßt. Infolge ihres exponentiellen Abfalls lassen sich die wirklichen Atompotentiale durch Ausdrücke der Form

$$\Phi(r) = -(Z e^2/4\pi \epsilon_0 r) \exp(-r/R) \sum_{i=0}^n a_i r^i$$

beliebig genau approximieren. Es soll daher untersucht werden, inwieweit sich für diese Potentiale die zweite Näherung noch analytisch durchführen läßt. Eines der wichtigsten Beispiele für ein Potential dieser Form ist das wasserstoffähnliche Atompotential, das gegenüber dem Wentzel-Modell den Vorteil besitzt, daß seine Elektronendichte $\varrho(r)$ auch für $r \rightarrow 0$ endlich bleibt. Für diese Potentiale, bei denen wir den Abschirmradius R nach LENZ⁴ so bestimmen, daß $\langle r^2 \rangle$ denselben Wert erhält wie für das Hartree-

¹ J. W. MOTZ, HAAKON OLSEN u. H. W. KOCH, Rev. Modern Phys. **36**, 881 [1964]. Weitere Literaturzitate siehe dort.

² R. H. DALITZ, Proc. Roy. Soc. London **A 206**, 509 [1951].

³ R. GLAUBER u. V. SCHOMAKER, Phys. Rev. **89**, 667 [1953].

⁴ F. LENZ, Z. Naturforsch. **9 a**, 158 [1954].



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 digitized 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.

Fock-Slater-Atom, soll die komplexe Streuamplitude, der differentielle Wirkungsquerschnitt und der Gesamtstreuquerschnitt in der zweiten Näherung berechnet und mit der ersten Näherung verglichen werden. Um Aussagen über die Güte der ersten Näherung zu finden, soll dann noch die dritte Näherung abgeschätzt werden.

1. Theorie der elastischen Streuung in Bornscher Näherung

Bei der Herleitung der Theorie der elastischen Streuung in Bornscher Näherung halten wir uns in den Grundzügen an TA-YOU WU und TAKASHI OHMURA⁵ sowie MOTT und MASSEY⁶, führen aber eine neue Darstellung ein, die die folgenden Rechnungen vereinfacht. Gegeben sei ein Potentialfeld $\Phi(\mathbf{r})$ der Form

$$\Phi(\mathbf{r}) = \mu(\hbar^2/2m) V(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Hierbei ist m die Masse und μ der Entwicklungsparameter für die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ des einfallenden Teilchens. μ soll im wesentlichen die Stärke und $V(\mathbf{r})$ die Geometrie des Feldes beschreiben. Dabei besitzen sowohl μ wie auch $V(\mathbf{r})$ die Dimension einer reziproken Länge. $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ sei der Impuls und \mathbf{k} der zugehörige Wellenvektor des einfallenden Teilchens. (Im folgenden bezeichnen \mathbf{k} und \mathbf{q} stets Wellenvektoren.) Die Schrödinger-Gleichung der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ lautet dann bei Abwesenheit von Magnetfeldern

$$[\mathcal{A} + k^2 - \mu V(\mathbf{r})] \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (2)$$

Gesucht wird nun eine Lösung von (2), die für $r \rightarrow \infty$ durch die einfallende ebene Welle $\exp\{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\}$ und eine auslaufende (gestreute) Kugelwelle dargestellt wird:

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \exp\{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\} + (1/r) e^{ikr} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (3)$$

Hierbei ist $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ die komplexe Streuamplitude und \mathbf{k}' der Wellenvektor der auslaufenden Welle. Da wir nur die elastische Streuung betrachten, gilt stets $k = k' = 2\pi/\lambda$, wobei λ die Wellenlänge der einfallenden Elektronen ist. Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist dann gegeben durch

$$d\sigma = |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 d\Omega. \quad (4)$$

⁵ TA-YOU WU u. TAKASHI OHMURA, Quantum Theory of Scattering, Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J. 1962.

Hierbei ist $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ das Raumwinkelement. Der Gesamtstreuquerschnitt lautet somit:

$$\sigma = \int |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 d\Omega. \quad (5)$$

In Bornscher Näherung wird $\psi(\mathbf{r})$ nach Potenzen von μ entwickelt. Die n -te Näherung lautet

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \psi^{(0)}(\mathbf{r}) + \mu \psi^{(1)}(\mathbf{r}) + \dots + \mu^n \psi^{(n)}(\mathbf{r}), \quad (6)$$

wobei $\psi^{(0)}(\mathbf{r}) = \exp\{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\}$ ist und $\psi^{(m)}(\mathbf{r})$ rekursiv durch die Gleichung

$$[\mathcal{A} + k^2] \psi^{(m)}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \psi^{(m-1)}(\mathbf{r}) \quad (7)$$

bestimmt wird. Mit der Green-Funktion für auslaufende Kugelwellen ($\varepsilon > 0$)

$$\begin{aligned} G_k^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= - \frac{\exp\{i k |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\}}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \frac{\exp\{i \mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')\}}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} d^3q \end{aligned} \quad (8)$$

erhalten wir als Lösung von (7)

$$\psi^{(m)}(\mathbf{r}) = \int G_k^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi^{(m-1)}(\mathbf{r}') d^3r'. \quad (9)$$

Die Iteration liefert

$$\begin{aligned} \psi^{(m)}(\mathbf{r}) &= \int G_k^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1) G_k^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_2) \dots \\ &\quad G_k^+(\mathbf{r}_{m-1}, \mathbf{r}_m) V(\mathbf{r}_m) \exp\{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_m\} d^3r_1, \dots, d^3r_m. \end{aligned} \quad (10)$$

Die Streuamplitude wird dann in der n -ten Näherung ausgedrückt durch

$$f_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \mu f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \dots + \mu^n f^{(n)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (11)$$

wobei $f^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ durch die asymptotische Entwicklung von (9) derart gegeben ist, daß für große r

$$\psi^{(m)}(\mathbf{r}) = (1/r) e^{ikr} f^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (9')$$

wobei \mathbf{k}' ein Vektor vom Betrage k in Richtung von \mathbf{r} ist. Damit gilt

$$\begin{aligned} f^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= - \frac{1}{4\pi} \int \exp\{-i \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}\} V(\mathbf{r}) \psi^{(m-1)}(\mathbf{r}) d^3r. \end{aligned} \quad (12)$$

Insbesondere ist für $m = 1$ wegen $\psi^{(0)}(\mathbf{r}) = \exp\{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\}$

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = - \frac{1}{4\pi} \int \exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}\} V(\mathbf{r}) d^3r. \quad (13)$$

Obgleich $f^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ursprünglich für $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$ eingeführt wurde, wird es sich in der folgenden

⁶ N. F. MOTT u. H. S. W. MASSEY, The Theory of Atomic Collisions, 3rd ed., Clarendon Press, Oxford 1965.

Rechnung als vorteilhaft erweisen, den Definitionsbereich von (13) auf $|\mathbf{k}'| \neq k$ zu erweitern. Aus (13) folgt mit $\mathbf{s} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ die Beziehung

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f^{(1)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = f^{(1)}(\mathbf{s}). \quad (14)$$

Ferner gilt die Hermitizitätsbeziehung

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f^{(1)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \quad \text{oder} \quad f^{(1)}(\mathbf{s}) = f^{(1)*}(-\mathbf{s}). \quad (15)$$

$$f^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \exp\{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}\} V(\mathbf{r}) \frac{\exp\{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\}}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} V(\mathbf{r}') \psi^{(m-2)}(\mathbf{r}') d^3r' d^3r d^3q. \quad (16)$$

Erhöht man den Index m um 1 und beachtet die Darstellung von $f^{(m)}$ und $f^{(1)}$, so geht (16) über in

$$f^{(m+1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{2\pi^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \frac{f^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) f^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{k}')}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} d^3q. \quad (17)$$

Durch vollständige Induktion folgt, daß sich diese Beziehung ausschließlich durch Funktionen $f^{(1)}$ ausdrücken läßt

$$f^{(m+1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left(\frac{-1}{2\pi^2}\right)^m \lim_{\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m \rightarrow 0} \int \frac{f^{(1)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}_1) f^{(1)}(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \dots f^{(1)}(\mathbf{q}_{m-1} - \mathbf{q}_m) f^{(1)}(\mathbf{q}_m - \mathbf{k}')}{(k^2 - q_1^2 + i\varepsilon_1) \dots (k^2 - q_m^2 + i\varepsilon_m)} d^3q_1 \dots d^3q_m. \quad (18)$$

Wir führen nun Polarkoordinaten im \mathbf{q}_j -Raum ein: $\mathbf{q}_j = (q_j, \vartheta_j, \varphi_j)$. Es sei $d\Omega_j = \sin \vartheta_j d\vartheta_j d\varphi_j$ das Raumwinkelement der Variablen \mathbf{q}_j . Dann wird das nur über die Winkelkoordinaten ϑ_j von 0 bis π und φ_j von 0 bis 2π erstreckte Integral definiert

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q_1, q_2, \dots, q_m) = \int f^{(1)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}_1) f^{(1)}(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \dots f^{(1)}(\mathbf{q}_{m-1} - \mathbf{q}_m) f^{(1)}(\mathbf{q}_m - \mathbf{k}') d\Omega_1 \dots d\Omega_m. \quad (19)$$

$$\text{Aus der Hermitizität der Faktoren } f^{(1)} \text{ folgt } F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{q}_1, \dots, q_m) = F^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}; q_m, \dots, q_1). \quad (20)$$

Mit dieser Funktion erhält man

$$\begin{aligned} f^{(m+1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \left(\frac{-1}{2\pi^2}\right)^m \lim_{\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m \rightarrow 0} \int_0^\infty \dots \int_0^\infty \frac{F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q_1, \dots, q_m) q_1^2 \dots q_m^2}{(k^2 - q_1^2 + i\varepsilon_1) \dots (k^2 - q_m^2 + i\varepsilon_m)} dq_1 \dots dq_m, \\ f^{(m+1)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= \left(\frac{-1}{2\pi^2}\right)^m \lim_{\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m \rightarrow 0} \int_0^\infty \dots \int_0^\infty \frac{F^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}; q_1, \dots, q_m) q_1^2 \dots q_m^2}{(k^2 - q_1^2 - i\varepsilon_1) \dots (k^2 - q_m^2 - i\varepsilon_m)} dq_1 \dots dq_m \\ &= \left(\frac{-1}{2\pi^2}\right)^m \lim_{\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m \rightarrow 0} \int_0^\infty \dots \int_0^\infty \frac{F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q_m, \dots, q_1) q_m^2 \dots q_1^2}{(k^2 - q_m^2 - i\varepsilon_m) \dots (k^2 - q_1^2 - i\varepsilon_1)} dq_m \dots dq_1. \end{aligned} \quad (21)$$

Umbenennung der Integrationsvariablen $q_1, \dots, q_m \rightarrow q_m, \dots, q_1$, d. h. $q_j \longleftrightarrow q_{m+1-j}$, liefert

$$f^{(m+1)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \left(\frac{-1}{2\pi^2}\right)^m \lim_{\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m \rightarrow 0} \int_0^\infty \dots \int_0^\infty \frac{F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q_1, \dots, q_m) q_1^2 \dots q_m^2}{(k^2 - q_1^2 - i\varepsilon_1) \dots (k^2 - q_m^2 - i\varepsilon_m)} dq_1 \dots dq_m. \quad (22)$$

Es ist also im Gegensatz zu $m=1$ für $m>1$ $f^{(m)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \neq f^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, denn der Zähler bleibt derselbe, während der Nenner in das Konjugiert-Komplexe übergeht.

Die Beziehungen (14) und (15) gelten auch für $|\mathbf{k}'| \neq |\mathbf{k}|$. Im allgemeinen Fall wird $f^{(1)}(\mathbf{s})$ auch von der Richtung des Vektors \mathbf{s} abhängen. Bei sphärisch-symmetrischem Feld ist $f^{(1)}(\mathbf{s}) = f^{(1)}(s)$ mit $|\mathbf{s}| = s$. Diese Eigenschaften sind für das Folgende wesentlich.

Drücken wir nun in (12) $\psi^{(m-1)}$ durch $\psi^{(m-2)}$ aus und ersetzen $G_k^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ durch sein Fourier-Integral, so erhalten wir

2. Das optische Theorem der Bornschen Näherung

Nach (4) ist der differentielle Wirkungsquerschnitt gegeben durch

$$d\sigma/d\Omega = |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2.$$

Setzen wir in diese Formel für $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ die in n -ter Bornscher Näherung erhaltene Streuamplitude $f_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ein, so ergibt sich eine n -te Näherung für den differentiellen Streuquerschnitt. Dieses Verfahren ist aber unzweckmäßig, da die Folge $|f_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2$ selbst schlecht konvergiert. Physikalisch sinnvoller ist es (s. etwa DALITZ²), auch den differentiellen Streuquerschnitt, ebenso wie die Streuamplitude, nach Potenzen von μ , d. h. nach Potenzen der Coulombschen Wechselwirkung, zu entwickeln. In diesem Fall erhalten wir bessere Konvergenz. Während im ersten Fall die zweite Näherung für den differentiellen Wirkungsquerschnitt um ein Vielfaches größer wird als die erste, ist im zweiten Fall die Abweichung weitaus geringer. Eine ausführliche Untersuchung dieser Ergebnisse erfolgt in Abschnitt 6. Entwickeln wir nun den differentiellen Streuquerschnitt nach Potenzen von μ , so gilt in der n -ten Näherung

$$\frac{d\sigma_n}{d\Omega} = \sum_{m=1}^n \mu^{m+1} \left[\sum_{j=1}^m f^{(j)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f^{(m+1-j)*}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right]. \quad (23)$$

Für den Gesamtstreuquerschnitt in n -ter Näherung folgt somit

$$\sigma_n = \sum_{m=1}^n \mu^{m+1} I^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}), \quad (24)$$

wobei zur Abkürzung

$$I^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{j=1}^m \int_{|\mathbf{k}''|=k} f^{(j)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'') f^{(m+1-j)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') d\Omega'' \quad (25)$$

gesetzt wurde.

$$\begin{aligned} & \int_{|\mathbf{k}''|=k} F(\mathbf{k}, \mathbf{k}''; q_1, \dots, q_{j-1}) F(\mathbf{k}'', \mathbf{k}'; q_{j+1}, \dots, q_m) d\Omega'' = \int_{|\mathbf{k}''|=k} \dots \int_{|\mathbf{k}''|=k} \dots \int_{|\mathbf{k}''|=k} f^{(1)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}_1) \dots f^{(1)}(\mathbf{q}_{j-1} - \mathbf{k}'') \\ & f^{(1)}(\mathbf{k}'' - \mathbf{q}_{j+1}) \dots f^{(1)}(\mathbf{q}_m - \mathbf{k}') d\Omega_1 \dots d\Omega_{j-1} d\Omega'' d\Omega_{j+1} \dots d\Omega_m = F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q_1, \dots, q_m) \quad \text{mit } q_j = k. \end{aligned} \quad (32)$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned} I^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \left(\frac{-1}{2\pi^2} \right)^{m-1} \lim_{\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m \rightarrow 0} \sum_{j=1}^m \int_0^\infty \dots \int_0^\infty F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q_1, \dots, q_m) \\ & \cdot \prod_{n=1}^{j-1} \frac{q_n^2 dq_n}{k^2 - q_n^2 + i\varepsilon_n} \prod_{n=j+1}^m \frac{q_n^2 dq_n}{k^2 - q_n^2 - i\varepsilon_n} \quad \text{mit } q_j = k. \end{aligned} \quad (33)$$

Für die exakte Streuamplitude $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ gilt das Unitaritätsgesetz von GLAUBER und SCHOMAKER³

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - f^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{i k}{2\pi} \int_{|\mathbf{k}''|=k} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}'') f^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') d\Omega''. \quad (26)$$

Für $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ geht (26) in das optische Theorem über

$$\text{Im } f(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = (k/4\pi) \sigma. \quad (27)$$

Wir entwickeln nun beide Seiten der Gl. (26) nach Potenzen von μ . Unter Beachtung der Hermitizitätsbedingung (15) für $f^{(1)}$ folgt

$$\begin{aligned} & \sum_{m=1}^{\infty} \mu^{m+1} [f^{(m+1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - f^{(m+1)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k})] \\ &= (i k/2\pi) \sum_{m=1}^{\infty} \mu^{m+1} I^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (28)$$

Da wir nun o. B. d. A. μ als kontinuierlich variable Größe auffassen können, ergibt sich durch Koeffizientenvergleich

$$f^{(m+1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - f^{(m+1)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = (i k/2\pi) I^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (29)$$

Mit $I_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{m=1}^n \mu^{m+1} I^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ folgt weiter

$$f_{n+1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - f_{n+1}^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = (i k/2\pi) I_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (30)$$

Unter Beachtung von (24) folgt hieraus für $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ ein dem optischen Theorem (27) analoges Theorem für die Bornschen Näherungen

$$\text{Im } f_{n+1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = (k/4\pi) \sigma_n. \quad (31)$$

Wir drücken nun mit Hilfe von (21) und (22) in (25) $f^{(j)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'')$ und $f^{(m+1-j)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k}'')$ durch die Funktionen

$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}''; q_1, \dots, q_{j-1})$ und $F(\mathbf{k}'', \mathbf{k}'; q_{j+1}, \dots, q_m)$ aus. Die Flächenintegration über die Variable \mathbf{k}'' in (25) betrifft nur die Funktion F . Aus der Definition (19) dieser Funktion folgt

Auch in diesem Ausdruck tritt im Zähler die gleiche Funktion wie bei $f^{(m+1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ und $f^{(m+1)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ auf. Die Integranden unterscheiden sich nur wesentlich im Nenner. Aus (33) folgt nun direkt $I^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; k)$. Mit Hilfe dieser Formel läßt sich die Unitaritätsbeziehung (29) auch gliedweise nachprüfen. Wir wollen dies hier nur für die ersten beiden Näherungen durchführen. Mit der Integralformel

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty \frac{G(x) dx}{x - x' \pm i \varepsilon} = \oint_0^\infty \frac{G(x) dx}{x - x'} \mp i \pi G(x'), \quad (34)$$

in welcher durch \oint der Hauptwert des Integrals bezüglich der Singularität bei x' bezeichnet ist, gilt

$$\begin{aligned} f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\frac{1}{2\pi^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty \frac{F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q) q^2 dq}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} = -\frac{1}{2\pi^2} \oint_0^\infty \frac{F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q) q^2 dq}{k^2 - q^2} + \frac{i k}{4\pi} F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; k), \\ f^{(2)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= -\frac{1}{2\pi^2} \oint_0^\infty \frac{F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q) q^2 dq}{k^2 - q^2} - \frac{i k}{4\pi} F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; k). \end{aligned} \quad (35)$$

Hieraus folgt

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - f^{(2)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = (i k / 2\pi) F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; k) = (i k / 2\pi) I^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}').$$

Nach (21) gilt

$$\begin{aligned} 4\pi^4 f^{(3)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \lim_{\varepsilon_1, \varepsilon_2 \rightarrow 0} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q_1, q_2) q_1^2 q_2^2 dq_1 dq_2}{(k^2 - q_1^2 + i\varepsilon_1)(k^2 - q_2^2 + i\varepsilon_2)} = \lim_{\varepsilon_2 \rightarrow 0} \int_0^\infty \left[\oint_0^\infty \frac{F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q_1, q_2) q_1^2 dq_1}{k^2 - q_1^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{i k \pi F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; k, q_2)}{2} \right] \frac{q_2^2 dq_2}{k^2 - q_2^2 + i\varepsilon_2} = \oint_0^\infty \oint_0^\infty \frac{F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q_1, q_2) q_1^2 q_2^2 dq_1 dq_2}{(k^2 - q_1^2)(k^2 - q_2^2)} - \frac{k^2 \pi^2}{4} F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; k, k) \\ &\quad - \frac{i k \pi}{2} \left\{ \oint_0^\infty \frac{F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q_1, k) q_1^2 dq_1}{k^2 - q_1^2} + \oint_0^\infty \frac{F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; k, q_2) q_2^2 dq_2}{k^2 - q_2^2} \right\}. \end{aligned} \quad (36)$$

Bei $4\pi^4 f^{(3)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ kehrt sich nur das Vorzeichen des Ausdrückes in der geschweiften Klammer um, so daß gilt

$$\begin{aligned} f^{(3)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - f^{(3)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= \\ &= -\frac{i k}{4\pi^3} \oint_0^\infty \frac{[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q, k) + F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; k, q)] q^2 dq}{k^2 - q^2}. \end{aligned}$$

Von (33) ausgehend ergibt eine analoge Rechnung

$I^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$

$$= -\frac{1}{2\pi^2} \oint_0^\infty \frac{[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q, k) + F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; k, q)] q^2 dq}{k^2 - q^2},$$

so daß gilt

$$f^{(3)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - f^{(3)*}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = (i k / 2\pi) I^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}).$$

3. Kugelsymmetrisches Potential

Für ein kugelsymmetrisches Potential $\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(r)$ geht (13) über in

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f^{(1)}(s) = -\frac{1}{s} \int_0^\infty \sin(s r) r V(r) dr. \quad (37)$$

$f^{(1)}$ ist also nur noch eine Funktion von $s = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$ und stets reell. Dies gilt auch dann, wenn man in (13) nicht $|\mathbf{k}'| = k$ voraussetzt. Hieraus folgt weiter, daß die Funktionen $F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q_1, \dots, q_m)$ außer von q_1, \dots, q_m nur noch von $|\mathbf{k}| = k$, $|\mathbf{k}'|$ und dem Streuwinkel $\vartheta = \measuredangle(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ abhängen. Wenn $|\mathbf{k}'| = k$ ist, so ist $s = 2k \sin(\vartheta/2)$ eindeutig mit ϑ verknüpft und ϑ kann durch s ausgedrückt werden. Da im

Ausdruck (19) für F alle Faktoren des Integranden reell sind, ist es auch F . Zusammen mit der Hermitizitätsbedingung (20) folgt dann

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; q_1, \dots, q_m) &= F(s; q_1, \dots, q_m) \\ &= F^*(s; q_m, \dots, q_1) = F(s; q_m, \dots, q_1). \end{aligned} \quad (38)$$

Hieraus erhalten wir insbesondere

$$f^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f^{(m)}(s) \text{ und } I^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = I^{(m)}(s). \quad (39)$$

Die Unitaritätsbedingung (30) nimmt dann die folgende einfache Form an

$$\operatorname{Im} f_{n+1}(s) = (k/4\pi) I_n(s). \quad (40)$$

Im folgenden untersuchen wir die elastische Streuung von Elektronen an bestimmten kugelsymmetrischen Potentialen. Bei diesen Potentialen handelt es sich um Anziehungspotentiale, d. h. $\Phi(r) \leq 0$. Hieraus und aus (37) folgt, daß die Streuamplitude f_1 in erster Bornscher Näherung stets reell und positiv ist. Für das entsprechende Abstoßungspotential $\Phi'(r) = |\Phi(r)|$ ist dagegen die Streuamplitude in erster Näherung negativ. Aus (17) folgt weiter, daß sowohl das Anziehungspotential wie auch das entsprechende Abstoßungspotential dasselbe $f^{(2)}$ besitzen. Infolge des optischen Theorems (31) ist $\operatorname{Im} f_2(0)$ und somit $\operatorname{Im} f^{(2)}(0)$ stets positiv. Für die im nächsten Abschnitt betrachteten Potentiale ist sowohl der Realteil wie auch der Imaginärteil von $f^{(2)}(s)$ für alle s positiv. Hieraus folgt, daß sich bei der elastischen Streuung von Elektronen an Atomen der differentielle Wirkungsquerschnitt in zweiter Näherung für alle s erhöht. Bei den entsprechenden Abstoßungspotentialen, etwa Streuung von α -Teilchen an Atomen, dagegen erniedrigt sich der differentielle Wirkungsquerschnitt in zweiter Bornscher Näherung.

4. Bornsche Näherung für das verallgemeinerte Yukawa-Potential

Im folgenden wollen wir die elastische Streuung von Elektronen an Atomen untersuchen. Gegeben seien dazu Potentiale der Form

$$\Phi(r) = - (Z e^2 / 4\pi \epsilon_0 r) \exp(-r/R) \sum_{i=0}^n a_i r^i. \quad (41)$$

Mit den Definitionen aus Abschnitt 1 erhalten wir dann

$$\mu = \frac{2 Z e^2 m_0}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2} = \frac{2 Z}{a_H} = 3,7807 Z \text{ Å}^{-1}, \quad (42)$$

$$V(r) = - \exp(-r/R) \sum_{i=0}^n a_i r^{i-1}, \quad (42)$$

wobei m_0 die Masse des einfallenden Elektrons und a_H der erste Bohrsche Radius ist. Die zweite Bornsche Näherung läßt sich geschlossen für alle Potentiale der Form (41) durchführen. Dagegen ist dies bereits für die dritte Näherung nicht mehr möglich. Schon für das Yukawa-Potential, das in der Elektronenstreutheorie vielfach auch als Wentzel-Modell bezeichnet wird, kann sie nicht mehr analytisch angegeben werden, was direkt aus den Formeln der zweiten Näherung folgt. Für das Potential (41) erhalten wir mit (37)

$$f^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \sum_{i=0}^n a_i \int_0^\infty \frac{\sin(r|\mathbf{q}-\mathbf{q}'|)}{|\mathbf{q}-\mathbf{q}'|} r^i \exp(-r/R) dr. \quad (43)$$

Aus der Beziehung

$$\begin{aligned} \int_0^\infty x^n \exp(-fx) \sin(bx) dx \\ = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial f^n} \left(\frac{b}{f^2 + b^2} \right), \quad f > 0, \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

folgt

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{i=0}^n (-1)^i a_i \frac{\partial^i}{\partial f^i} \left. \frac{1}{f^2 + (\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2} \right|_{f=1/R} \quad (44)$$

Mit (17) erhalten wir weiter

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left. \frac{1}{2\pi^2} \sum_{i=0}^n \sum_{l=0}^n (-1)^{i+l+1} a_i a_l \frac{\partial^i}{\partial f^i} \frac{\partial^l}{\partial g^l} J \right|_{f=g=1/R} \quad (45)$$

mit

$$J(f, g) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \frac{d^3 q}{(f^2 + (\mathbf{q}-\mathbf{k}')^2)(g^2 + (\mathbf{k}-\mathbf{q})^2)(k^2 - q^2 + i\varepsilon)}. \quad (46)$$

Um die in (45) vorkommenden Integrale zu lösen, gehen wir von dem Integral

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \frac{d^3 q}{(Q^2 + (\mathbf{q}-\mathbf{q}')^2)^2 (k^2 - q^2 + i\varepsilon)} \quad (47)$$

aus. Nach DALITZ² ergibt sich als Lösung hiervon

$$\begin{aligned} \frac{\pi^2 (k^2 - Q^2 - q'^2)}{Q ((k^2 - Q^2 - q'^2)^2 + 4k^2 Q^2)} - \\ \frac{2i\pi^2 k}{(k^2 - Q^2 - q'^2)^2 + 4k^2 Q^2}. \end{aligned} \quad (48)$$

Es ist nun möglich, den Faktor

$$[(f^2 + (\mathbf{q}-\mathbf{k}')^2)(g^2 + (\mathbf{k}-\mathbf{q})^2)]^{-1}$$

im Integranden von (46) mit Hilfe der Feynman-Identität

$$(u v)^{-1} = \int_{-1}^1 \frac{dx}{2} \left(\frac{u(1+x) + v(1-x)}{2} \right)^{-2} \quad (49)$$

als Integral über den Faktor $(Q^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2)^{-2}$ im Integranden von (47) auszudrücken, und zwar ist identisch in \mathbf{q}

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(f^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{k}')^2)(g^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{k})^2)} \quad (49) \\ &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (Q^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2)^{-2} dx, \end{aligned}$$

$$\text{wenn } |\mathbf{k}'| = k, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' = k^2 \cos \vartheta$$

$$\text{und } s = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k \sin(\vartheta/2)$$

und wenn die Funktionen $Q^2(x)$ und $\mathbf{q}'(x)$ durch

$$Q^2 = \frac{1}{2}(1+x) f^2 + \frac{1}{2}(1-x) g^2 + \frac{1}{4}(1-x^2) s^2$$

$$\text{und } \mathbf{q}' = \frac{1}{2}(1+x) \mathbf{k}' + \frac{1}{2}(1-x) \mathbf{k}$$

definiert sind. Da die Integrationen über \mathbf{q} und über x vertauschbar sind, kann das Integral (46) also dadurch berechnet werden, daß man die bereits bekannte Lösung (48) von (47) noch einmal über x integriert. Wir erhalten also

$$\begin{aligned} J(f, g) = & -\frac{\pi^2}{4} \int_{-1}^1 (f^2(1+x) + g^2(1-x)) \left(\frac{f^2(1+x)}{2} + \frac{g^2(1-x)}{2} + \frac{s^2(1-x^2)}{4} \right)^{-1/2} \left[\left(\frac{f^2(1+x)}{2} + \frac{g^2(1-x)}{2} \right)^2 \right. \\ & + k^2 (2f^2(1+x) + 2g^2(1-x) + s^2(1-x^2)) \Big]^{-1} dx - i\pi^2 k \int_{-1}^1 \left[\left(\frac{f^2(1+x)}{2} + \frac{g^2(1-x)}{2} \right)^2 \right. \\ & \left. + k^2 (2f^2(1+x) + 2g^2(1-x) + s^2(1-x^2)) \right]^{-1} dx. \end{aligned} \quad (50)$$

Es ist $J(f, g) = J(g, f)$, wie man durch die Substitution $x \rightarrow -x$ zeigen kann. Um (45) zu lösen, führt man zuerst die Differentiationen nach f und g durch. Es bleiben dann nur noch die Integrale der Form

$$\int_{-1}^1 \frac{x^i dx}{(H^2 - x^2)^{m/2} (K^2 - x^2)^n}$$

übrig. Ist i ungerade, so ist der Integralwert 0, da der Integrand in diesem Fall eine ungerade Funktion ist. Ist i dagegen gerade, so lassen sich diese Integrale durch die Substitution $x = H t / (1 + t^2)$ in gebrochen rationale Funktionen umformen, die geschlossen lösbar sind.

Insbesondere erhalten wir mit den Abkürzungen

$$V = R^{-4} + 4k^2/R^2 + k^2 s^2, A = R^{-2} + \frac{1}{4}s^2, B = R^{-2} + 4k^2, C = R^{-2} + 2k^2$$

$$J_1 = J \Big|_{f=g=1/R} = -\frac{2\pi^2}{s\sqrt{V}} \left\{ \arctan \frac{s}{2R\sqrt{V}} + \frac{i}{2} \ln \frac{\sqrt{V}+ks}{\sqrt{V}-ks} \right\}, \quad (51)$$

$$\begin{aligned} J_2 = \frac{\partial J}{\partial f} \Big|_{f=g=1/R} = \frac{\partial J}{\partial g} \Big|_{f=g=1/R} = \pi^2 \left\{ \frac{1-k^2 s^2 R^4}{2R^4 A B V} + \frac{2C}{R s V^{3/2}} \arctan \frac{s}{2R\sqrt{V}} + i \left[\frac{2CRk}{BV} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{C}{R s V^{3/2}} \ln \frac{\sqrt{V}+ks}{\sqrt{V}-ks} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (52)$$

$$\begin{aligned} J_3 = \frac{\partial^2 J}{\partial f \partial g} \Big|_{f=g=1/R} = -\frac{4\pi^2}{R^2} \left\{ \frac{R^3}{8A^2} - \frac{3k^2 C^2 R^3}{V^2 B} + \frac{C^2 R^3}{4ABV} - \frac{k^2}{RVABs^2} \right. \\ \left. + \frac{(4k^2+s^2)V+3k^2s^2(4k^2-s^2)}{2s^3V^{5/2}} \arctan \frac{s}{2R\sqrt{V}} + i \left[\frac{C^2 R^2}{V^2 B} + \frac{s^2-4k^2}{2s^2V^2} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{(4k^2+s^2)V+3k^2s^2(4k^2-s^2)}{4ks^3V^{5/2}} \ln \frac{\sqrt{V}+ks}{\sqrt{V}-ks} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (53)$$

Die Ausdrücke J_1 , J_2 und J_3 sind auch für $s=0$, d. h. $\vartheta=0$, endlich, obwohl s hier im Nenner erscheint. Die Glieder, die s im Nenner enthalten, werden durch den arctan bzw. ln aufgehoben, was man sofort an Hand einer Reihenentwicklung sieht.

Betrachten wir nun die Potentiale

$$\Phi_Y(r) = \frac{-Z e^2}{4\pi \varepsilon_0 r} \exp(-r/R), \quad \Phi_H(r) = \frac{-Z e^2}{4\pi \varepsilon_0 r} \exp(-r/R) (1 + b r/R). \quad (54, 55)$$

Für das (54) entsprechende Abstoßungspotential hat bereits DALITZ² die zweite Bornsche Näherung berechnet. Seine Streuamplitude besitzt aber das falsche Vorzeichen. Dies führt dazu, daß seine Näherungen $f_n(s)$ nicht dem optischen Theorem (31) genügen. Im folgenden kennzeichnen wir die Näherungen der Streuamplitude und des differentiellen Wirkungsquerschnittes mit zwei Indizes i, n

$$f_{i,n}(s) \quad \text{und} \quad d\sigma_{i,n}/dQ \quad \text{mit} \quad i = Y, H \quad \text{und} \quad n = 1, 2, \dots$$

Hierbei kennzeichnen Y und H die Potentiale (54) bzw. (55) und n wie bisher die n-te Näherung. Es gilt also die Darstellung

$$f_{i,n}(s) = \sum_{l=1}^n \mu^l f_i^{(l)}(s).$$

Aus (44) und (45) zusammen mit (51), (52) und (53) erhalten wir

$$f_Y^{(1)}(s) = \frac{R^2}{1+s^2 R^2}, \quad (56) \quad f_H^{(1)}(s) = \frac{R^2}{1+s^2 R^2} + \frac{2bR^2}{(1+s^2 R^2)^2}, \quad (58)$$

$$f_Y^{(2)}(s) = -\frac{1}{2\pi^2} J_1, \quad (57) \quad f_H^{(2)}(s) = -\frac{1}{2\pi^2} \left(J_1 - \frac{2b}{R} J_2 + \frac{b^2}{R^2} J_3 \right). \quad (59)$$

Entwickeln wir nun den differentiellen Wirkungsquerschnitt nach Potenzen von μ , so erhalten wir

$$\frac{d\sigma_{Y,1}}{dQ} = \mu^2 \frac{R^4}{(1+s^2 R^2)^2}, \quad (60) \quad \frac{d\sigma_{Y,2}}{dQ} = \mu^2 \left(\frac{R^4}{(1+s^2 R^2)^2} + \frac{2\mu R^2}{s V(1+s^2 R^2)} \arctan \frac{s}{2R VV} \right), \quad (61)$$

$$\frac{d\sigma_{H,1}}{dQ} = \mu^2 \left(\frac{R^2}{1+s^2 R^2} + \frac{2bR^2}{(1+s^2 R^2)^2} \right)^2, \quad (62)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{H,2}}{dQ} = \mu^2 & \left[\left(\frac{R^2}{1+s^2 R^2} + \frac{2bR^2}{(1+s^2 R^2)^2} \right)^2 + \mu \left(\frac{R^2}{1+s^2 R^2} + \frac{2bR^2}{(1+s^2 R^2)^2} \right) \left[\frac{2}{s VV} \arctan \frac{s}{2R VV} + b \frac{1-k^2 s^2 R^4}{R^5 A B V} \right. \right. \\ & + \frac{4bC}{R^2 s V^{3/2}} \arctan \frac{s}{2R VV} + \frac{b^2}{2R A^2} - \frac{12b^2 k^2 C^2}{R B V^2} + \frac{b^2 C^2}{R A B V} - \frac{4b^2 k^2}{R^5 A B V s^2} \\ & \left. \left. + 2b^2 \frac{(4k^2 + s^2)V + 3k^2 s^2(4k^2 - s^2)}{R^4 s^3 V^{5/2}} \arctan \frac{s}{2R VV} \right] \right]. \end{aligned} \quad (63)$$

Für den Gesamtstreuquerschnitt in erster Bornscher Näherung ergibt sich aus (5) und ebenso aus dem optischen Theorem (31)

$$\sigma_{Y,1} = 4\pi \mu^2 (R^2/B), \quad (64)$$

$$\sigma_{H,1} = 4\pi \mu^2 \left(\frac{R^2}{B} + \frac{4b(1+2k^2 R^2)}{B^2} + \frac{4b^2(3+12k^2 R^2+16k^4 R^4)}{3B^3 R^2} \right). \quad (65)$$

Will man den Gesamtstreuquerschnitt in zweiter Näherung berechnen, so muß man für das Potential (54) noch zusätzlich das Integral

$$\int_0^\pi \frac{R^4 \sin \vartheta}{(1+4k^2 R^2 \sin^2(\vartheta/2)) k \sin(\vartheta/2) \sqrt{1+4k^2 R^2+4k^4 R^4 \sin^2(\vartheta/2)}} \cdot \arctan \frac{R k \sin(\vartheta/2)}{\sqrt{1+4k^2 R^2+4k^4 R^4 \sin^2(\vartheta/2)}} d\vartheta \quad (66)$$

lösen. Hierfür läßt sich eine geschlossene Lösung nicht angeben. Wir können aber, ohne einen auswirkbaren Fehler zu begehen, den arctan durch sein Argument ersetzen, denn für die in Frage kommenden Strahlspannungen U ($U \geq 1$ kV) und Abschirmradien R ($R \geq 0,15$ Å) ist das Argument des arctan stets klein gegen 1. Als Funktion von ϑ nimmt der arctan für $\vartheta = \pi$ sein Maximum an. Weiterhin fällt er monoton mit wachsendem R und k . Im ungünstigsten Fall, $\vartheta = \pi$, $R = 0,15$ Å und einer Strahlspannung von 1 kV, d. h. $k = 16,21$ Å⁻¹, nimmt das Argument des arctan den Wert 0,189 an. Das kubische Glied der Reihenentwicklung beträgt nur noch 1/100 des linearen Gliedes. Bei einer Strahlspannung von 10 kV fällt das kubische Glied bereits auf 1/1000 des linearen Gliedes ab. Betrachten wir nun den Integranden insgesamt, so wirkt sich diese Vernachlässigung noch weniger aus, da er für $\vartheta = \pi$ Null ist und sein Maximum bei kleinen Werten von ϑ liegt, bei denen das Argument des arctan um einige Zehnerpotenzen kleiner als bei $\vartheta = \pi$ ist. Mit dieser Vernachlässigung und der Transformation $t = \cos \vartheta$ geht (66) über in

$$\int_{-1}^1 \frac{R^5 dt}{(1 + 2k^2 R^2 - 2k^2 R^2 t)(1 + 4k^2 R^2 + 2k^4 R^4 - 2k^4 R^4 t)}. \quad (67)$$

Als Lösung hiervon ergibt sich $(R^3/[k^2(1+3k^2R^2)]) \ln\{(1+4k^2R^2)/(1+2k^2R^2)\}$. (68)

Setzen wir $D = R^{-2} + 3k^2$, so erhalten wir $\sigma_{Y,2} = \sigma_{Y,1} + 2\pi\mu^3(R/k^2D) \ln(B/C)$. (69)

Bei der Berechnung des Gesamtstreuquerschnittes in zweiter Näherung für das Potential (55) treten analoge Schwierigkeiten auf. Mit denselben Begründungen kann auch hier der arctan durch sein Argument ersetzt und die Integration geschlossen durchgeführt werden. Aus unseren Betrachtungen folgt insbesondere, daß wir bereits in den Formeln (61) und (63) den arctan durch sein Argument ersetzen können, ohne einen wesentlichen Fehler zu begehen. Vor allem im Bereich kleiner Streuwinkel bis über das Maximum von $(d\sigma/d\Omega) \sin \vartheta$ hinaus unterscheiden sich die auf diese Weise erhaltenen Formeln selbst für kleine Strahlspannungen (≥ 1 kV) nur ganz geringfügig von (61) und (63). Für höhere Strahlspannungen stimmen sie für alle Winkel nahezu überein. Wenn wir weiter $F = R^{-2} + k^2$ setzen, erhalten wir

$$\begin{aligned} \sigma_{H,2} = & \sigma_{H,1} + 2\pi\mu^3 R \left\{ \frac{1}{k^2 D} \ln \frac{B}{C} + 2b \left[\frac{2F}{BCD} + \frac{R^2}{3k^2} \ln \frac{C^2}{BF} + F \left(\frac{1}{k^2 D^2} + \frac{2}{3k^2 BD} \right) \ln \frac{B}{C} \right] \right. \\ & + 4b^2 \left[\frac{R^2}{24k^2} + \frac{1}{12k^2 F} + \frac{17}{6BD} - \frac{1}{8k^2 B} - \frac{7k^2}{B^2 D} - \frac{k^2}{C^2 D} - \frac{3k^2}{2BD^2} + \frac{4k^4}{BCD^2} + \frac{5k^6}{B^2 C^2 D} \right. \\ & + \left(\frac{R^4}{6} + \frac{R^2}{6k^2} \right) \ln \frac{C^2}{BF} + \left(\frac{7}{12k^2 D} - \frac{14}{3D^2} + \frac{4k^2}{BD^2} + \frac{11k^2}{4D^3} \right) \ln \frac{B}{C} \left. \right] + 8b^3 \left[\frac{1}{3BF} - \frac{5}{36k^2 F} + \frac{1}{2CD} \right. \\ & + \frac{9}{8BD} + \frac{11}{72k^2 D} - \frac{9k^2}{2BD^2} + \frac{9k^4}{2BD^3} + \frac{5k^4}{B^2 CD} - \frac{7k^6}{B^2 C D^2} - \frac{k^8}{B^2 C^2 D^2} - \frac{R^2}{72k^2} - \frac{2R^2}{27k^2} \ln \frac{B}{F} \\ & \left. \left. - \left(\frac{R^4}{18} + \frac{R^2}{18k^2} \right) \ln \frac{C^2}{BF} + \left(\frac{4R^2}{27k^2} - \frac{7}{27k^2 D} - \frac{77}{36D^2} + \frac{11k^2}{2D^3} - \frac{9k^4}{4D^4} - \frac{4k^4}{BD^3} \right) \ln \frac{B}{C} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (70)$$

Wir sehen, daß bereits bei dem Potential (55) der Gesamtstreuquerschnitt in zweiter Näherung trotz der Vernachlässigung so unübersichtlich wird, daß man schlecht weitere Folgerungen herleiten kann. Insbesondere enthält das Korrekturglied, das aus der zweiten Näherung resultiert, auch Ausdrücke, die nur mit k^{-2} abfallen. Die Näherung kann aber nur gut sein, wenn sich diese Glieder herausheben, da anderenfalls das Korrekturglied in der Größenordnung des Hauptgliedes liegen würde. Wir entwickeln daher die Korrekturglieder nach Potenzen

von k^{-1} und vernachlässigen diejenigen Glieder, die stärker als mit k^{-4} abfallen. Diese Vernachlässigung wird also insbesondere für hohe Strahlspannungen wenig ins Gewicht fallen. Die Formeln (69) und (70) gehen dann über in

$$\sigma_{Y,2} = \sigma_{Y,1} + 2\pi\mu^3(R/3k^4) \ln 2, \quad (69')$$

$$\begin{aligned} \sigma_{H,2} = & \sigma_{H,1} + \frac{2\pi\mu^3 R}{3k^4} [\ln 2 + b \ln 2 + b^2(\frac{5}{4} - \frac{4}{3} \ln 2) \\ & + b^3(\frac{19}{6} - \frac{40}{9} \ln 2)]. \end{aligned} \quad (70')$$

An Hand von (69') und (70') erkennen wir, daß sich die Gesamtstreuquerschnitte der Potentiale (54) und (55) in erster und zweiter Näherung analog verhalten. Das Korrekturglied ist stets positiv und fällt mit k^{-4} ab, d. h. für hohe Strahlspannungen ist auch für große Z die zweite Näherung mit der ersten fast identisch.

5. Das wasserstoffähnliche Potential

Für die Dichtevertteilung $\varrho(r)$ der Elektronen im Atom gilt, daß das Volumenintegral über $\varrho(r)$ gleich der gesamten Elektronenzahl Z ist

$$Z = \int_0^{\infty} \varrho(r) 4 \pi r^2 dr. \quad (71)$$

Bekanntlich läßt sich jedes Atompotential durch einen Ausdruck der Form (41) beliebig genau approximieren, wenn man nur n hinreichend groß wählt. Bei dieser Approximation müssen wir an die zugehörige Dichtevertteilung, die man für (41) direkt aus der Poissonschen Gleichung

$$\Delta \Phi(r) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r \Phi(r)) = -e^2 \varrho(r)/\varepsilon_0 \quad (72)$$

erhält, die Forderung (71) stellen. Sie wird von der Elektronendichtevertteilung $\varrho(r)$ des Potentiale (54) erfüllt, aber diese besitzt den Nachteil, daß sie für $r \rightarrow 0$ nicht endlich bleibt. Verlangen wir von den Potentiale der Form (41), daß die zu ihnen gehörende Elektronendichtevertteilung $\varrho(r)$ auch für $r \rightarrow 0$ endlich bleibt, so muß gelten

$$a_2 = a_1/R - a_0/2 R^2. \quad (73)$$

Hierbei gilt stets $a_0 = 1$, da wir verlangen müssen

$$r \Phi(r) \rightarrow -Z e^2 / (4 \pi \varepsilon_0) \quad \text{für } r \rightarrow 0. \quad (74)$$

Für ein Potential der Form (41) mit $n = 2$ ist (71) mit (73) und (74) stets erfüllt. Damit gilt für das Potential (55) $b = \frac{1}{2}$. Wir wollen daher für die folgenden numerischen Vergleiche stets annehmen, daß das Potential (55) wasserstoffähnlich (d. h. $b = \frac{1}{2}$) ist. Damit geht (70') über in

$$\begin{aligned} \sigma_{H,2} &= 2 \pi \mu^2 \left\{ \frac{8(3/R^2 + 18 k^2 + 28 k^4 R^2)}{3 B^3} \right. \\ &\quad \left. + \mu R \left[\frac{11}{54 k^4} \ln 2 + \frac{17}{72 k^4} \right] \right\} \end{aligned} \quad (70'')$$

⁷ H. WYRWICH u. F. LENZ, Z. Naturforsch. **13a**, 515 [1958].

Es bleibt nun noch die Bestimmung der Abschirmradien R übrig. Wir halten uns hierbei an LENZ⁴ und WYRWICH und LENZ⁷ und berechnen

$$\Theta(Z) = \int_0^{\infty} \varrho(r) r^2 4 \pi r^2 dr \quad (75)$$

nach HFS-Atomfunktionen⁸ (an der elektronischen Rechenanlage). Für den differentiellen Wirkungsquerschnitt in erster Bornscher Näherung gilt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (1/9 a_H^2) \Theta^2 - O(s^2). \quad (76)$$

Wir fordern nun, daß für $\vartheta = 0$ die in erster Bornscher Näherung berechneten differentiellen Wirkungsquerschnitte (60) und (62) mit den nach HFS-Atomfunktionen berechneten Wirkungsquerschnitt (76) übereinstimmen. Wir erhalten dann für die Abschirmradien R_Y des Wentzel-Potentials (54) und R_H des wasserstoffähnlichen Potentiale (55) aus (76) und (60) bzw. (62)

$$R_Y = \sqrt{\Theta/6Z}, \quad (77)$$

$$R_H = \sqrt{\Theta/12Z}. \quad (78)$$

In Abb. 1 ist Θ als Funktion von Z angegeben. Die Genauigkeit der Rechnung wird mit (71) kontrolliert. Bei den Rechnungen wurden bei allen Strahlspannungen relativistische Korrekturen angebracht. Diese gehen an zwei Stellen in die Streuformeln ein: Erstens bei der Masse des stoßenden Elektrons

$$m = m_0 (1 + e U/m_0 c^2). \quad (79)$$

Zweitens bei der Wellenlänge λ und somit auch bei k . Für die relativistische Wellenlänge gilt

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 e m_0 U (1 + e U/2 m_0 c^2)}}. \quad (80)$$

Diese relativistischen Korrekturen bewirken insbesondere eine Erhöhung der Korrekturglieder in den verschiedenen Streuformeln.

In Tab. 1 sind die zu verschiedenen Strahlspannungen und Ordnungszahlen gehörenden Quotienten $\sigma_{Y,2}/\sigma_{Y,1}$ und $\sigma_{H,2}/\sigma_{H,1}$ aufgetragen, die mit den korrekten Formeln (69) und (70) berechnet wurden. Hierbei ist deutlich das analoge Verhalten der Gesamtstreuquerschnitte für die Potentiale (54) und (55) in erster und zweiter Bornscher Näherung zu erkennen, das im wesentlichen durch den exponentiellen Abfall bestimmt wird. Bei 1 kV ergeben sich

⁸ F. HERMAN u. S. SKILLMAN, Atomic Structure Calculations, Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J. 1963.

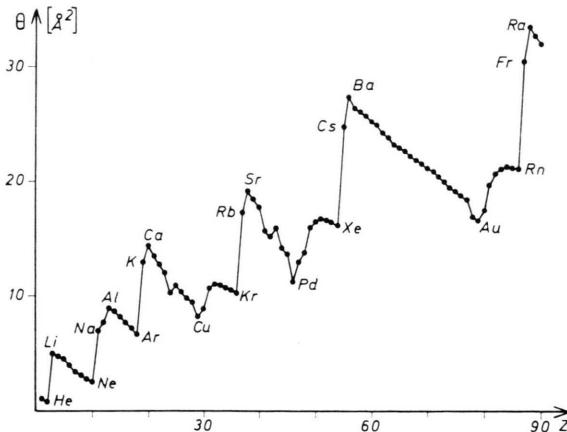


Abb. 1. Θ als Funktion von Z , berechnet nach HFS-Atomfunktionen.

schon bei $Z = 36$ Werte, die größer als 2 sind, was bedeutet, daß hier die Bornsche Näherung zusammenbricht. Wie man der Tabelle weiter entnimmt, beträgt auch bei 10 kV der Unterschied bei schwereren Elementen noch immer fast 30%. Erst bei 75 kV liegt er bei allen Elementen unter 5%.

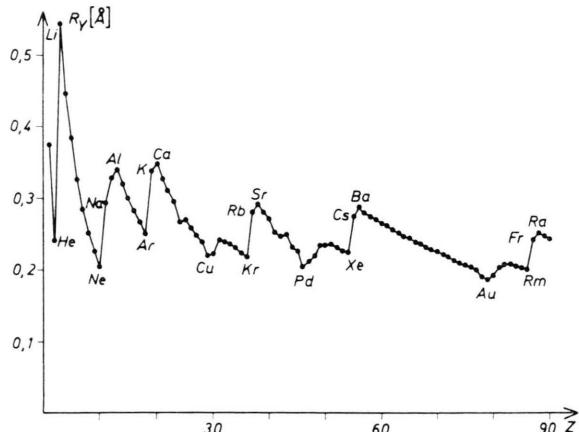


Abb. 2. R_Y als Funktion von Z .

Wir entnehmen der Tab. 1, daß sich der Quotient $\sigma_{i,2}/\sigma_{i,1}$ bei festem Z mit wachsender Strahlspannung monoton dem Wert 1 nähert, d. h. die erste Näherung unterscheidet sich immer weniger von der zweiten. Bei fester Strahlspannung dagegen entfernt sich $\sigma_{i,2}/\sigma_{i,1}$ mit wachsender Ordnungszahl — über gr-

Z	kV	1	10	25	50	75	100	200	500	1000
2	1,054	1,006	1,002	1,001	1,001	1,001	1,000	1,000	1,000	1,000
	1,055	1,006	1,002	1,001	1,001	1,001	1,000	1,000	1,000	1,000
4	1,059	1,006	1,002	1,001	1,001	1,001	1,000	1,000	1,000	1,000
	1,059	1,006	1,002	1,001	1,001	1,001	1,000	1,000	1,000	1,000
10	1,313	1,033	1,013	1,007	1,005	1,004	1,002	1,001	1,000	1,000
	1,319	1,033	1,013	1,007	1,005	1,004	1,002	1,001	1,000	1,000
18	1,466	1,048	1,020	1,010	1,006	1,005	1,002	1,001	1,001	1,001
	1,471	1,048	1,019	1,010	1,007	1,005	1,003	1,001	1,001	1,001
26	1,655	1,068	1,027	1,014	1,010	1,007	1,004	1,002	1,001	1,001
	1,660	1,067	1,027	1,014	1,009	1,007	1,004	1,002	1,001	1,001
29	1,857	1,089	1,036	1,019	1,013	1,010	1,005	1,002	1,001	1,001
	1,871	1,089	1,036	1,018	1,013	1,010	1,005	1,002	1,001	1,001
36	2,061	1,110	1,045	1,023	1,016	1,012	1,006	1,003	1,002	1,002
	2,079	1,110	1,045	1,023	1,015	1,012	1,006	1,003	1,002	1,002
43	2,123	1,116	1,047	1,024	1,016	1,013	1,007	1,003	1,002	1,002
	2,135	1,115	1,047	1,024	1,016	1,012	1,007	1,003	1,002	1,002
47	2,410	1,147	1,060	1,031	1,021	1,016	1,008	1,004	1,002	1,002
	2,434	1,146	1,060	1,030	1,021	1,016	1,008	1,004	1,002	1,002
54	2,554	1,161	1,066	1,034	1,023	1,017	1,009	1,004	1,002	1,002
	2,577	1,160	1,065	1,033	1,023	1,017	1,009	1,004	1,002	1,002
64	2,687	1,174	1,070	1,036	1,025	1,019	1,010	1,005	1,003	1,003
	2,705	1,173	1,070	1,036	1,024	1,019	1,010	1,005	1,003	1,003
72	3,133	1,222	1,090	1,046	1,031	1,024	1,013	1,006	1,003	1,003
	3,167	1,220	1,089	1,046	1,031	1,024	1,013	1,006	1,003	1,003
79	3,686	1,283	1,115	1,059	1,040	1,030	1,016	1,007	1,004	1,004
	3,751	1,280	1,114	1,058	1,040	1,030	1,016	1,007	1,004	1,004
86	3,720	1,285	1,116	1,059	1,040	1,030	1,016	1,008	1,004	1,004
	3,774	1,283	1,115	1,058	1,040	1,030	1,016	1,007	1,004	1,004
90	3,399	1,248	1,101	1,052	1,035	1,027	1,014	1,007	1,004	1,004
	3,426	1,246	1,100	1,051	1,035	1,027	1,014	1,006	1,004	1,004

Tab. 1. $\sigma_{Y,2}/\sigma_{Y,1}$ (oberer Wert) und $\sigma_{H,2}/\sigma_{H,1}$ (unterer Wert) als Funktion von Z für verschiedene Strahlspannungen.

Bere Bereiche betrachtet – immer mehr von dem Wert 1. Dieser Vorgang ist aber nicht monoton. Betrachten wir nämlich die Werte für $Z = 90$, so sehen wir, daß sie bei fester Strahlspannung stets unter den entsprechenden für $Z = 86$ und $Z = 79$ liegen. Dies folgt daraus, daß Θ , R_Y und R_H bei $Z = 90$ im Vergleich zu den entsprechenden Größen für $Z = 86$ und 79 relativ groß sind. Der Abschirmradius R geht aber in den Nenner des Quotienten σ_2/σ_1 ein. Betrachten wir daraufhin Abb. 2, so sehen wir, daß bei den Edelgasen R stets relativ klein und bei den Erdalkali- und Alkaliatomen relativ groß ist. Dies bedeutete insbesondere daß die Abweichung der ersten Bornschen Näherung von der zweiten für die Edelgase größer als die für die darauffolgenden Alkali- und Erdalkaliatome ist. Dieser Effekt ist aber in größeren Z -Bereichen gegenüber dem von der Ordnungszahl verursachten Anwachsen des Quotienten σ_2/σ_1 zu vernachlässigen, da Z hier im Zähler erscheint. Im großen und ganzen gesehen können wir daher von einem mit Z monotonen Anwachsen des Quotienten σ_2/σ_1 sprechen. Dieselben Überlegungen gelten auch für die entsprechenden Quotienten der differentiellen Streuquerschnitte.

6. Gültigkeitsbereich der Bornschen Näherung

Aus den Vergleichen der Gesamtstreuquerschnitte in erster und zweiter Bornscher Näherung in Abschnitt 5 ergibt sich bereits eine erste grobe Abschätzung für die Güte der Bornschen Näherung. Sie nimmt mit wachsendem k zu und verschlechtert sich mit steigender Ordnungszahl Z , was in Übereinstimmung mit allgemeinen Kriterien⁹ wie

$$Z c/137 v \ll 1 \quad (81)$$

steht, wo c die Lichtgeschwindigkeit und v die Geschwindigkeit der Elektronen ist. Für große k geht (81) über in $Z/137 \ll 1$. Für schwere Elemente ist $Z/137$ mit 1 vergleichbar, so daß hier eigentlich die Bornsche Näherung zusammenbrechen müßte. Der Tab. 1 entnehmen wir aber, daß bereits bei 100 kV selbst für $Z = 90$ der Unterschied zwischen der ersten und zweiten Näherung des Gesamtstreuquerschnittes weniger als 3% beträgt. Für kleine Strahlspannungen dagegen wird der Unterschied beträchtlich. Bei 1 kV ist er selbst für kleine Ordnungszahlen so groß, daß man von einer Näherung nicht mehr sprechen

kann. Selbst bei 25 kV beträgt er für schwere Elemente immer noch über 10%. Erst bei 75 kV ist er für alle Ordnungszahlen kleiner als 5%. Der Hauptanteil des Gesamtstreuquerschnittes wird von den kleinen Winkeln geliefert, die außerdem für die Elektronenmikroskopie von besonderem Interesse sind. Wir wollen daher im folgenden nur das Verhalten der differentiellen Wirkungsquerschnitte in erster und zweiter Näherung für kleine Winkel ($\vartheta \leq 80$ mrad) untersuchen.

Wir geben im folgenden hauptsächlich nur noch numerische Werte für das Potential (55) an, da es nach den Betrachtungen in Abschnitt 4 der Wirklichkeit am nächsten kommen wird. Außerdem ergaben die Rechnungen, daß sich bei einer Strahlspannung, die größer oder gleich 10 kV ist,

$$\frac{d\sigma_{Y,2}}{d\Omega} / \frac{d\sigma_{Y,1}}{d\Omega} \text{ und } \frac{d\sigma_{H,2}}{d\Omega} / \frac{d\sigma_{H,1}}{d\Omega},$$

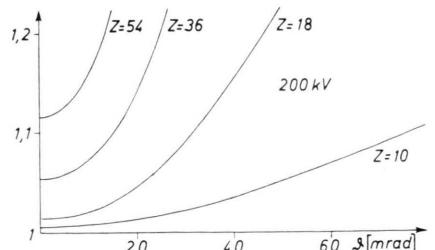
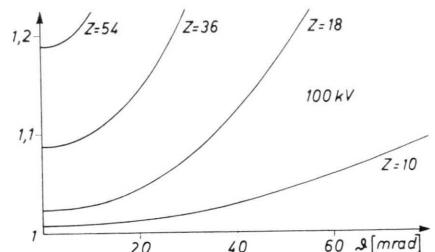
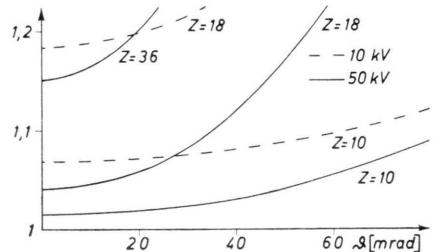


Abb. 3 a – c. $|f_{H,2}(\vartheta)|^2 / |f_{H,1}(\vartheta)|^2$ als Funktion von ϑ für verschiedene Strahlspannungen und Ordnungszahlen Z .

⁹ L. I. SCHIFF, Quantum Mechanics, McGraw-Hill Book Co., New York 1955.

ferner $\sigma_{Y,2}/\sigma_{Y,1}$ und $\sigma_{H,2}/\sigma_{H,1}$ stets um weniger als 1% unterscheiden. Das analoge Verhalten von $\sigma_{Y,2}/\sigma_{Y,1}$ und $\sigma_{H,2}/\sigma_{H,1}$ ist an Hand der Tab. 1 eindeutig zu erkennen. Ein merkbarer Unterschied zeigt sich nur in dem Bereich, in dem von einer Näherung nicht mehr gesprochen werden kann. Dieses analoge Verhalten der ersten zur zweiten Näherung ist im wesentlichen auf den exponentiellen Abfall der Potentiale zurückzuführen. Da bekanntlich auch die wirklichen Potentiale der Atome – etwa nach HFS-Atomfunktionen berechnet – einen exponentiellen Abfall aufweisen, wird für sie der Gültigkeitsbereich der Bornschen Näherung derselbe sein.

Wie bereits in Abschnitt 2 angedeutet wurde, besteht eine Möglichkeit, den differentiellen Wirkungsquerschnitt in zweiter Näherung darzustellen, darin, daß man $d\sigma/d\Omega = |f_2(\vartheta)|^2$ setzt. In den Abb. 3 a bis 3 c ist $|f_{H,2}(\vartheta)/f_{H,1}(\vartheta)|^2$ für verschiedene Strahlspannungen und Ordnungszahlen (im Bereich $\vartheta = 0$ bis $\vartheta = 80$ m rad) dargestellt. Man sieht, daß sich in diesem Fall selbst bei hohen Strahlspannungen und kleinen Streuwinkeln, bei denen die Bornsche Näherung i. allg. am besten ist, ein wesentlicher Unterschied zwischen der ersten und zweiten Näherung ergibt. Selbst für kleine Z (etwa $Z = 18$) und einer Strahlspannung von 100 kV ist dieser Anstieg so stark, daß bei $\vartheta = 60$ m rad $|f_{H,2}/f_{H,1}|^2 > 1,2$ ist. Für höhere Z -Werte wird der Unterschied bereits erart groß, daß $|f_{H,2}/f_{H,1}|^2 > 3$ wird. Diese Methode ist also nicht anwendbar.

Einen Überblick über die Größe der Abweichungen im Bereich von 0 bis 80 m rad bei einer Strahlspannung von 100 kV gibt Tab. 2. Auch bei noch höheren Strahlspannungen – etwa 200 kV – ist

die Abweichung von derselben Größenordnung. Also ist $|f_2(\vartheta)|^2$ stets wesentlich größer als $|f_1(\vartheta)|^2$. Aus den Experimenten^{10, 11} ist aber bekannt, daß für höhere Strahlspannungen (100 kV) der differentielle Wirkungsquerschnitt für kleine Streuwinkel sehr gut durch die erste Bornsche Näherung beschrieben wird. Erst bei kleinen Strahlspannungen (37 kV) und höheren Ordnungszahlen ($Z = 54$)¹¹ ist der Unterschied zwischen den gemessenen und den nach der ersten Bornschen Näherung berechneten differentiellen Streuquerschnitten beachtenswert. Aber stets ist der gemessene Wert kleiner als der theoretische. Hieraus folgt insbesondere, daß die in zweiter Bornscher Näherung berechnete komplexe Streuamplitude $f_2(\vartheta)$ weitaus weniger der Wirklichkeit entspricht als $f_1(\vartheta)$. Die starke Differenz von $f_1(\vartheta)$ und $f_2(\vartheta)$ wird nun ausschließlich durch den Imaginärteil von $f_2(\vartheta)$ verursacht, der stets positiv ist. Auch $f_3(\vartheta)$ bringt hier keine Verbesserung, da nach den Betrachtungen im vorangegangenen Abschnitt stets $\sigma_2 > \sigma_1$ und somit nach dem optischen Theorem (31) auch $\text{Im } f_3(0) > \text{Im } f_2(0)$ ist. Wir dürfen aber aus Stetigkeitsgründen annehmen daß dies für alle Winkel, oder doch wenigstens in dem interessierenden Bereich, gilt. Auf Grund analoger Überlegungen, zusammen mit den anschließenden Betrachtungen über $d\sigma/d\Omega$, folgt, daß $\text{Im } f_4(\vartheta) < \text{Im } f_2(\vartheta)$ ist. Zusammenfassend können wir also sagen, daß man aus der zweiten Bornschen Näherung $f_2(\vartheta)$ i. allg. nicht auf $\text{Im } f(\vartheta)$, also insbesondere auch nicht auf die Phase $\eta(\vartheta)$, definiert durch $f(\vartheta) = |f(\vartheta)| e^{i\eta(\vartheta)}$, schließen kann. Insbesondere ist es daher wenig sinnvoll, $\eta(\vartheta)$ durch die Formel

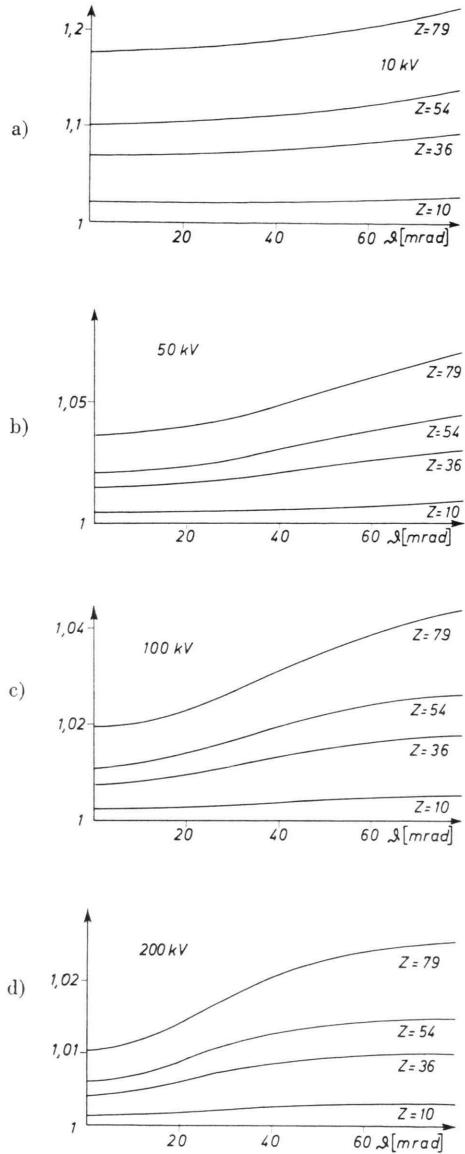
$$\eta(\vartheta) = (1/f_1(\vartheta)) \text{Im } f_2(\vartheta) \quad (82)$$

Z	ϑ	2	10	20	30	40	50	60	70	80
10	1,006	1,007	1,011	1,017	1,026	1,038	1,051	1,066	1,082	
	1,008	1,009	1,013	1,019	1,028	1,041	1,057	1,075	1,094	
18	1,017	1,022	1,038	1,068	1,110	1,163	1,222	1,285	1,350	
	1,023	1,027	1,044	1,075	1,122	1,184	1,256	1,333	1,411	
36	1,064	1,078	1,125	1,210	1,337	1,500	1,690	1,898	2,117	
	1,086	1,099	1,145	1,234	1,372	1,560	1,786	2,039	2,306	
54	1,140	1,172	1,281	1,484	1,748	2,166	2,611	3,096	3,605	
	1,188	1,219	1,328	1,538	1,867	2,311	2,844	3,434	4,055	
79	1,295	1,342	1,499	1,789	2,223	2,798	3,492	4,278	5,129	
	1,397	1,443	1,598	1,891	2,353	2,995	3,803	4,744	5,778	
86	1,347	1,412	1,633	2,041	2,651	3,447	4,394	5,450	6,578	
	1,467	1,531	1,749	2,167	2,825	3,730	4,848	6,125	7,501	

Tab. 2. $|f_{Y,2}(\vartheta)|^2/|f_{Y,1}(\vartheta)|^2$ (oberer Wert) und $|f_{H,2}(\vartheta)|^2/|f_{H,1}(\vartheta)|^2$ (unterer Wert) als Funktion von ϑ bei einer Strahlspannung von 100 kV. ϑ wird in m rad angegeben.

¹⁰ M. FINK u. J. KESSLER, Z. Phys. **196**, 504 [1966].

¹¹ M. FINK u. J. KESSLER, Z. Phys. **196**, 1 [1966]; siehe dort weitere Literaturzitate.



bestimmen zu wollen. Dies ist nach den vorangegangenen Rechnungen selbst bei hohen Strahlspannungen (>100 kV) nur für Elemente, deren Ordnungszahl nicht viel größer als 10 ist, und da auch nur für Winkel, die kleiner als 10 mrad sind, sinnvoll. Aber man wird auch dann aus (82) nicht viel mehr als eine grobe Abschätzung für $\eta(\vartheta)$ gewinnen.

Entwickeln wir, wie es in den vorangegangenen Abschnitten geschehen ist, den differentiellen Wirkungsquerschnitt nach Potenzen von μ , so erhalten wir, wie aus den Abb. 4 a – d eindeutig zu ersehen ist, ein günstigeres Konvergenzverhalten. Die Werte der zweiten Näherung unterscheiden sich nur noch wenig von denen der ersten. Sie sind aber auch stets größer. In der dritten Näherung des differentiellen Wirkungsquerschnittes, die sich nicht mehr analytisch angeben lässt, tauchen auch erstmalig negative Glieder – s. Formel (36) – auf. Grobe Abschätzungen – siehe Abschnitt 7 – zeigen bereits, daß damit $d\sigma_3/d\Omega$ kleiner als $d\sigma_1/d\Omega$ wird, was den Experimenten näher kommt. Auf Grund dieser Überlegungen dürfen wir annehmen daß die erste Näherung des differentiellen Wirkungsquerschnittes der Wirklichkeit näher kommt als die zweite. Es ist daher nicht nur aus Gründen der Einfachheit allein günstig, sich auf die erste Bornsche Näherung zu beschränken, sondern auch aus Gründen der besseren Approximation.

← Abb. 4 a – d. $(d\sigma_{H,2}/d\Omega)/(d\sigma_{H,1}/d\Omega)$ als Funktion von ϑ für verschiedene Strahlspannungen und Ordnungszahlen.
(Der Maßstab ist in allen vier Abbildungen verschieden.)

7. Anhang: Abschätzung der dritten Näherung

In der dritten Näherung ist der differentielle Wirkungsquerschnitt gegeben durch

$$\frac{d\sigma_3}{d\Omega} = \mu^2 f^{(1)}(\vartheta)^2 + 2 \mu^3 f^{(1)}(\vartheta) \operatorname{Re} f^{(2)}(\vartheta) + \mu^4 \{ \operatorname{Re} f^{(2)}(\vartheta)^2 + \operatorname{Im} f^{(2)}(\vartheta)^2 + 2 f^{(1)}(\vartheta) \operatorname{Re} f^{(3)}(\vartheta) \}. \quad (83)$$

Um $d\sigma_3/d\Omega$ für die Potentiale (54) und (55) zu bestimmen, müßte man also noch $\operatorname{Re} f^{(3)}(\vartheta)$ berechnen. Eine analytische Lösung hiervor ist aber nicht möglich. Da es uns hier nur darauf ankommt, zu zeigen, daß $d\sigma_3/d\Omega$ kleiner als $d\sigma_2/d\Omega$ bzw. $d\sigma_1/d\Omega$ ist, genügt es, dies für $\vartheta=0$ an Hand einer groben Abschätzung zu demonstrieren, da hier die Näherungen am besten sind. Aus (17) und (34) folgt

$$\operatorname{Re} f^{(3)}(0) = - \frac{1}{2\pi^2} \oint_0^\infty \frac{\operatorname{Re} f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) f^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{k}) d^3 q}{(k^2 - q^2)} - \frac{k}{4\pi} \int_{q=k} \operatorname{Im} f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) f^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{k}) d\Omega_q. \quad (84)$$

Infolge des analogen Verhaltens der verschiedenen Potentiale mit exponentiellem Abfall können wir unsere Betrachtungen auf das Wentzel-Modell einschränken. Das zweite Glied in (84) ist stets negativ und ergibt sich aus (57) mit $V = R^{-4} + 4 k^2/R^2 + k^2(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2$ für das Potential (54) zu

$$\begin{aligned} & -\frac{k}{4\pi} \int_{q=k} \frac{1}{(1/R^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{k})^2)^2} \ln \frac{\sqrt{V+k} |\mathbf{q} - \mathbf{k}|}{\sqrt{V-k} |\mathbf{q} - \mathbf{k}|} d\Omega_q \\ & \leq -\frac{k^2}{4\pi} \int_{q=k} \frac{d\Omega_q}{(1/R^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{k})^2) V} = -\frac{R}{2(1/R^2 + 3k^2)} \ln \frac{1/R^2 + 4k^2}{1/R^2 + 2k^2} \approx -\frac{R^4}{4(1+3k^2 R^2)}. \end{aligned} \quad (85)$$

Mit (49) erhalten wir

$$\text{Re } f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{x(q^2 - k^2) + 1/R^2}{\{(x(q^2 - k^2) + 1/R^2)^2 + 4k^2(1/R^2 + x(1-x)(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2)\}} \cdot \frac{dx}{\sqrt{1/R^2 + x(1-x)(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2}}. \quad (86)$$

Damit ergibt sich das erste Glied von (84) zu

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2\pi^2} \int_0^1 \int_{-1}^1 \oint_0^\infty \frac{(x(q^2 - k^2) + 1/R^2) q^2}{\{(x(q^2 - k^2) + 1/R^2)^2 + 4k^2(1/R^2 + x(1-x)(q^2 + k^2 - 2qkt))\}} \\ & \cdot \frac{dq dt dx}{\sqrt{1/R^2 + x(1-x)(q^2 + k^2 - 2qkt)(1/R^2 + q^2 + k^2 - 2qkt)(k^2 - q^2)}}. \end{aligned} \quad (87)$$

Diesen Ausdruck können wir nun gegenüber (85) vernachlässigen, da er mit k^{-4} abfällt, während bei (85) nur k^2 im Nenner erscheint. Um dies einzusehen, genügt es, über x und t zu mitteln. Anschließende Anwendung des Mittelwertsatzes auf die q -Integration liefert uns dann für (87) mit $0 \leq \alpha < 1$ den Ausdruck

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha}{2\pi k^3} \left\{ \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{q dq}{\sqrt{1/R^2 + \frac{1}{4}(q^2 + k^2)(1/R^2 + q^2 + k^2)}} - \oint_0^\infty \frac{R^{-2} q dq}{\sqrt{1/R^2 + \frac{1}{4}(q^2 + k^2)(1/R^2 + q^2 + k^2)(k^2 - q^2)}} \right\} \\ & = \frac{\alpha}{2\pi k^3} \left\{ \left(\frac{R}{2\sqrt{3}} - \frac{1}{R\sqrt{3}(1/R^2 + 2k^2)} \right) \ln \frac{\sqrt{4/R^2 + k^2} + \sqrt{3}/R}{\sqrt{4/R^2 + k^2} - \sqrt{3}/R} \right. \\ & \left. + \frac{1}{R^2(1/R^2 + 2k^2)} \frac{1}{\sqrt{4/R^2 + 2k^2}} \ln \frac{\sqrt{4/R^2 + 2k^2} + \sqrt{4/R^2 + k^2}}{\sqrt{4/R^2 + 2k^2} - \sqrt{4/R^2 + k^2}} \right\} \approx \frac{\alpha}{2\pi k^3 \sqrt{4/R^2 + k^2}}. \end{aligned} \quad (88)$$

Somit ist die Vernachlässigung des ersten Gliedes von (83) gegenüber dem zweiten vollauf gerechtfertigt. Wir erhalten also

$$\frac{d\sigma_3(0)}{d\Omega} \leq \mu^2 R^4 + \frac{\mu^3 R^5}{1+4k^2 R^2} + \mu^4 \left\{ \frac{R^6}{4(1+4k^2 R^2)} - \frac{R^6}{2(1+3k^2 R^2)} \right\}.$$

Mit $\mu = 3,7807 \cdot Z \text{ \AA}^{-1}$ und $R \geq 0,15$ folgt für $Z \geq 10$

$$\frac{d\sigma_3(0)}{d\Omega} < \mu^2 R^4 = \frac{d\sigma_1(0)}{d\Omega}.$$

Diese Abschätzung gilt auch noch für kleinere Ordnungszahlen, da R hier entsprechend größer ist. Außerdem ist zu beachten, daß μ infolge der relativistischen Korrektur einen größeren Wert annimmt.

Herrn Professor Dr. F. LENZ möchte ich an dieser Stelle herzlich für die Anregung und Förderung dieser Arbeit danken. Mein Dank gilt weiter Herrn Dr. E. KASPER für wertvolle Diskussionsbeiträge sowie Herrn H. HOCH. — Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für die Unterstützung der Arbeit. Die Leitung des Rechenzentrums der Universität Tübingen hat in dankenswerter Weise Rechenzeit zur Verfügung gestellt.