

## Der Gültigkeitsbereich der Molièreschen Näherung

H. Lehmann und H. Schoenebeck

Optisches Institut der Technischen Universität Berlin

(Z. Naturforsch. 31a, 501–502 [1976];  
eingegangen am 25. März 1976)

### The Range of Validity of the Molière Approximation

The Molière approximation of the scattering amplitude is, following earlier statements, a high-energy and small-angle approximation. Recent investigations show that there is no intrinsic small-angle restriction, the restriction being due to special derivations. A method is given, to obtain the scattering amplitude in the Molière approximation without small-angle assumption. This enables to evaluate electron backscattering rates with the aid of the Molière scattering amplitude.

Die Streuung hochenergetischer Teilchen läßt sich in der Näherung von Molière<sup>1</sup> durch die Streuamplitude  $f_M$  in Abhängigkeit vom Streuwinkel  $\vartheta$  beschreiben:

$$\begin{aligned} f_M(\vartheta) &= k \int_0^\infty \varrho J_0(q\varrho) [e^{i\Phi(\varrho)} - 1] d\varrho, \\ q &= 2k \cdot \sin(\vartheta/2), \\ \Phi(\varrho) &= -\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\sqrt{\varrho^2 + z^2}) dz, \end{aligned} \quad (1)$$

$k$  = Wellenzahl,  $V$  = Potential,  $v$  = Geschwindigkeit der auf den Streuer treffenden Partikel.

Die Molièresche Näherung, verschiedentlich auch Glaubersche Näherung genannt, ist bis vor kurzem stets als Hochenergie- und Kleinwinkelnäherung bezeichnet worden<sup>2</sup>. Bei Molière ergeben sich die einschränkenden Bedingungen bezüglich Energie und Winkel aus der strahlenoptischen Lösungsmethode; die Herleitung stützt sich auf intuitive Überlegungen und erfüllt das von Molière selbstgesteckte Ziel, eine Verbesserung der 1. Bornschen Näherung bei hohen Teilchenenergien und kleinen Streuwinkeln zu erhalten. Aus der Fülle der auf Molière folgenden Veröffentlichungen seien die Arbeiten von Glauber<sup>3</sup> und Schiff<sup>4</sup> herausgegriffen, die, auch hinsichtlich ihres Verbreitungsgrades, von großer Bedeutung sind.

Glauber<sup>3</sup> gelangt auf einem von Molière abweichen- den Weg, der aber ausführlich und durchsichtig dargestellt wird, ebenfalls zu der Formel (1). Als Gültigkeitsbereich der Streuamplitude (1) gibt Glauber an:  $V/E \ll 1$  ( $E$  = Gesamtenergie),  $ka \gg 1$  ( $a$

kennzeichnet den Bereich, in dem das Potential merklich von Null verschieden ist),  $\vartheta^2 ka \ll 1$ . Glauber geht von der Schrödinger-Gleichung in Integralform aus. Für die unbekannte Wellenfunktion setzt Glauber  $\psi = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \cdot \varphi(\mathbf{r})$  an. Eingesetzt in die Schrödingersche Integralgleichung ergibt sich eine Integralgleichung für  $\varphi(r)$ . Entscheidend ist nun, daß Glauber die Integralgleichung für  $\varphi(r)$  unter Verwendung der Methode der stationären Phase<sup>5</sup> vereinfacht. Nach Glauber ist die Vereinfachung neben der Hochenergieforderung zusätzlich an die bereits erwähnte Bedingung  $\vartheta^2 ka \ll 1$  gebunden. Die genäherte Integralgleichung löst Glauber exakt und erhält damit als Näherungslösung der Schrödinger-Gleichung die in der Phase korrigierte ebene Welle

$$\tilde{\psi} = \exp \left\{ [i\mathbf{k}\mathbf{r} - (i/\hbar v) \int_{-\infty}^{+\infty} V(x, y, z') dz'] \right\}. \quad (2)$$

Diese setzt Glauber in die Integraldarstellung der Streuamplitude ein und wählt zur Auswertung des Integrals ein Zylinderkoordinatensystem, dessen  $z$ -Achse parallel zu  $k$ , der Einfallsrichtung der auf den Streuer treffenden Partikel, liegt. Bedingt durch diese Wahl des Koordinatensystems erhält Glauber die Formel (1) nur unter der nochmaligen Forderung  $\vartheta^2 ka \ll 1$  und durch eine Symmetriebetrachtung. Die Arbeit von Glauber ist in der Folgezeit in einer Reihe von Veröffentlichungen als Grundlage von unmittelbar an sie anschließende Erweiterungen verwendet worden<sup>6</sup>.

Ein in vieler Hinsicht ähnliches Verfahren wendet Schiff<sup>4</sup> an, der jedoch im Gegensatz zu Glauber von der unendlichen Bornschen Reihe ausgeht. Ohne auf Einzelheiten einzugehen, kann festgestellt werden, daß die Streuamplitude (1), die nach Schiff ebenfalls an die Bedingung  $\vartheta^2 ka \ll 1$  gebunden ist, unter Verwendung der Methode der stationären Phase und Wahl des Koordinatensystems wie bei Glauber aufgestellt wird.

Die Behauptung ist nun: Die Kleinwinkelforderung  $\vartheta^2 ka \ll 1$  ist lediglich auf die Methode der stationären Phase und die spezielle Wahl des Koordinatensystems zurückzuführen und folgt nicht aus der Sache selbst. Diese Behauptung ist analog zu der Aussage von Wallace<sup>2</sup>, der in Anknüpfung an die Partialwellenmethode eine neue, exakte Fourier-Bessel-Darstellung der Streuamplitude angibt. Im Grenzfall hoher Teilchenenergien erhält Wallace die Formel (1) für alle Streuwinkel. Im Unterschied zu Wallace wird im folgenden die Streuamplitude (1) auf einem einfacheren Weg hergeleitet, beide Herleitungen stimmen jedoch darin überein, daß die Kleinwinkelforderung nicht benötigt wird.

Das Vorgehen wird in gleicher Weise unterteilt wie bei Glauber. Zunächst wird eine Näherungs-

Sonderdruckanforderungen an Dipl.-Phys. H. Lehmann, Optisches Institut, Straße des 17. Juni 135, D-1000 Berlin 12.

lösung  $\tilde{\psi}$  der Schrödinger-Gleichung bestimmt und diese dann in die Integraldarstellung der Streuamplitude eingesetzt. Zur Berechnung der Näherungslösung wird der aus der Optik bekannte Eikonalreihenansatz in der Form

$$\psi = e^{ikS(\mathbf{r})}, \quad S(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n(\mathbf{r}) (i/k)^n \quad (3)$$

gemacht. Unter der Voraussetzung  $ka \gg 1$  genügt es, sich auf den ersten Summanden  $S_0(\mathbf{r})$  zu beschränken, um eine gute Näherungslösung zu erhalten:

$$\tilde{\psi} = e^{ikS_0(\mathbf{r})}. \quad (4)$$

Durch Einsetzen von (3) in die Schrödingersche Differentialgleichung und durch Beschränkung auf den Exponenten  $k^{-1}$  hat  $S_0(\mathbf{r})$  die Eikonalgleichung

$$[\text{grad } S_0(\mathbf{r})]^2 = 1 - V(\mathbf{r})/E \quad (5)$$

zu erfüllen. Bei Kenntnis der klassischen Bahnen  $C$  der Elektronen (die in der Optik den Lichtstrahlen entsprechen) lässt sich die Lösung der Eikonalgleichung als Kurvenintegral angeben. Die Eikonaldifference zwischen zwei Punkten  $\mathbf{r}_0$  und  $\mathbf{r}$  ergibt sich zu

$$S_0(\mathbf{r}) - S_0(\mathbf{r}_0) = C \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \sqrt{1 - \frac{V(\mathbf{r}')}{E}} \mathbf{t}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (6)$$

$\mathbf{t}$  = Tangenteneinheitsvektor.

Da für realistische Atompotentiale eine geschlossene Darstellung der Bahnkurve nicht bekannt ist, werden die folgende Vereinfachungen vorgenommen:

1. Die Wurzel im Integranden der Gl. (6) wird entwickelt, hierzu wird die Voraussetzung  $V/E \ll 1$  gemacht.
2. Als Näherungsbahn wird die Halbwinkelbahn nach Molière gewählt, darunter ist eine Gerade längs des halben Streuwinkels zu verstehen, siehe Abbildung 1.

Zu einem fest vorgegebenen Streuwinkel  $\vartheta$  unterscheiden sich die Halbwinkelbahnen  $C_\vartheta$  durch den Abstand  $\varrho$  der Bahnen vom Streuzentrum. Die

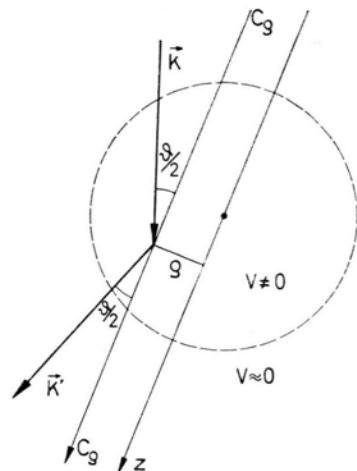


Abb. 1. Die Halbwinkelbahn  $C_\vartheta$  zu einem festen Streuwinkel  $\vartheta$ .  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k}'$  sind die Wellenvektoren der einfallenden und in den Winkel  $\vartheta$  gestreuten Elektronen.

$z$ -Achse wird, im Gegensatz zu Glauber und Schiff, parallel zur Halbwinkelbahn gelegt. Das Ergebnis der Rechnung ist die in der Phase korrigierte ebene Welle

$$\tilde{\psi} = \exp \left\{ [i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - (i/\hbar v) \int_{-\infty}^z V(\sqrt{\varrho^2 + z'^2}) dz'] \right\}, \quad (7)$$

zu deren Herleitung lediglich  $V/E \ll 1$  und  $ka \gg 1$  benutzt werden mußten. Unter Beibehaltung des Koordinatensystems führt die Integration der Streuamplitude über Azimut und  $z$ -Achse ohne weitere Einschränkung auf die Formel (1).

Wegen des Fortfalls der Kleinwinkelforderung kann die Streuamplitude (1) auch zur Berechnung der Elektronenrückstreuung herangezogen werden, bei der die experimentellen Ergebnisse<sup>7</sup> erhebliche Abweichungen von der 1. Bornschen Näherung zeigen. Über erste numerische Ergebnisse wurde auf der Tagung der Deutschen Gesellschaft für Elektronenmikroskopie vom 21. bis 25. 9. 1975 in Berlin berichtet.

<sup>1</sup> G. Molière, Z. Naturforsch. **2a**, 133 [1947]; die gleiche Bezeichnung verwenden z. B. E. Zeitler u. H. Olsen, Phys. Rev. **136**, A 1546 [1964].

<sup>2</sup> S. J. Wallace, Phys. Rev. **8**, D 1846 [1973].

<sup>3</sup> R. J. Glauber, Lectures in Theoretical Physics, Vol. I, New York 1959.

<sup>4</sup> L. I. Schiff, Phys. Rev. **104**, 443 [1956].

<sup>5</sup> C. Eckart, Rev. Mod. Phys. **20**, 399 [1948].

<sup>6</sup> A. Baker, Phys. Rev. **6**, D 3462 [1972]. — S. J. Wallace, Phys. Rev. **8**, D 1934 [1973].

<sup>7</sup> H. Niedrig u. P. Sieber, Z. angew. Phys. **31**, 37 [1971].