

Det Kgl. Danske Videnskabernes Selskab.

Mathematisk-fysiske Meddelelser. **XII**, 12.

ÜBER DIE ELASTISCHE STREUUNG
VON ELEKTRONEN IN ARGON
UND NEON

VON

F. KALCKAR



KØBENHAVN

LEVIN & MUNKSGAARD

EJNAR MUNKSGAARD

1934

Printed in Denmark.
Bianco Lunos Bogtrykkeri A/S.

1. Einleitung.

Die Streuung von langsamen Elektronen an schweren Atomen zeigt eine Reihe von Anomalien, welche vom Standpunkt der klassischen Mechanik aus schwierig zu verstehen sind. Zu diesen Anomalien gehört vor allem der von RAMSAUER entdeckte Effekt¹, der darin besteht, dass der Wirkungsquerschnitt für gewisse Atome bei sehr kleinen Elektronengeschwindigkeiten ausserordentlich stark abnimmt. Eine allgemeine Erklärung dieses Phänomens mit Hilfe der Quantenmechanik ist zuerst in einer Arbeit von FAXÉN und HOLTSMARK² gegeben; später ist von HOLTSMARK eine Reihe von speziellen Problemen durchgerechnet und eine gute numerische Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen nachgewiesen.³

Ein anderer interessanter Effekt, welcher zuerst von ARNOT⁴ nachgewiesen ist, besteht darin, dass die Winkelverteilung der gestreuten Elektronen bei einer bestimmten Geschwindigkeit Minima und Maxima aufweist, ähnlich wie man es in den Beugungserscheinungen der Optik bekommt. Aus den experimentellen Resultaten von ARNOT geht es schon hervor, dass man auch Anomalien in den

¹ A. RAMSAUER, Ann. d. Phys., 72, 346, 1923.

² FAXÉN und HOLTSMARK, Zs. f. Phys., 45, 307, 1927.

³ HOLTSMARK, Zs. f. Phys., 48, 231, 1928; 52, 485, 1929; 55, 437, 1929; 66, 49, 1930.

⁴ ARNOT, Proc. Roy. Soc., 130, 655, 1931; 133, 615, 1931; Nature, 130, 438, 1932. Siehe auch RAMSAUER und KOLLATH, Ann. d. Phys. 12, 5, 529; 12, 7, 87, 1932; und MOHR und NICOLL, Proc. Roy. Soc. 138, 230; 138, 469, 1932.

Kurven für die Streuintensität als Funktion der Geschwindigkeit zu erwarten hat, aber da seine Messungen nur Relativmessungen sind, so ist es schwierig die Intensitäten bei verschiedenen Geschwindigkeiten zu vergleichen. Neulich hat aber WERNER¹ eine experimentelle Methode ausgearbeitet, wodurch er direkt die Streuintensitäten für verschiedene Geschwindigkeiten, bei einem bestimmten Winkel (z. B. 90° oder 135°) messen kann. Für Argon 135° bekommt er dann eine Kurve, die ein Minimum für 80 V. und ein Maximum für 180 V. zeigt. Ähnliche Minima und Maxima bekommt er in Neon bei 90° , während die Kurven für Argon bei 90° und für Neon bei 135° dagegen ziemlich glatt ohne besondere Anomalien verlaufen (siehe Fig. 4—7).

Die gewöhnliche Methode zur Behandlung von Stossproblemen ist die sogenannte Born'sche Näherungsmethode, die darin besteht, dass wir in nullter Näherung die Schrödingerfunktion des stossenden Elektrons als eine ebene Welle betrachten und dann durch sukzessive Approximationen die durch das Atomfeld verursachten Abweichungen davon bestimmen. Diese Methode können wir aber in unserem Fall nicht anwenden, weil für so langsame Elektronen die Deformation der Wellenfunktion im Atomfeld sehr wesentlich ist, so dass die Born'sche Näherungsmethode nicht konvergiert.

Eben um solche Stossprobleme zu behandeln, haben FAXÉN und HOLTSMARK² eine Methode entwickelt, mit deren Hilfe man die Wellenfunktion im statischen Atomfeld durch Reihenentwicklung nach Kugelfunktionen mit dem Atom-

¹ Nature. 131, 726, 1933. Siehe auch Proc. Roy. Soc., 134, 202, 1931 und 139, 113, 1933.

² FAXÉN und HOLTSMARK, Zs. f. Phys., 45, 307, 1927.

kern als Zentrum berechnen kann. Die zu jeder Kugelfunktion gehörige radiale Eigenfunktion berechnen wir mit Hilfe der sogenannten halbklassischen Methode, deren Anwendbarkeit in Stossproblemen zuerst von HENNEBERG¹ untersucht ist.

Wenn wir diese Eigenfunktionen anwenden, wird es sich zeigen, dass unsere Streukurven im wesentlichen denselben Verlauf haben wie die von WERNER experimentell gefundenen. Auch die Winkelverteilung der Streuintensität wird von unserer Theorie ganz gut wiedergegeben. Im letzten Teil der Arbeit werden wir den Einfluss des Feldverlaufs auf die Streukurven diskutieren.

2. Übersicht über die benutzte Methode.

Wir betrachten ein Elektron in einem statischen kugelsymmetrischen Feld, vernachlässigen also Austausch- und Polarisationserscheinungen. Die Schrödingergleichung heisst dann in Hartree'schen Einheiten:

$$(\mathcal{A} + k^2 + 2V)\psi = 0. \quad (1)$$

Hier bedeutet k^2 die Energie des Elektrons, und V das Potentialfeld, in dem das Elektron sich bewegt (beide gemessen in Einheiten des Ionisierungspotentials von Wasserstoff). Die Lösung entwickeln wir nach Legendrefunktionen:

$$\psi = \sum_l \frac{1}{r} \psi_l P_l(\cos \theta), \quad (2)$$

wo ψ_l durch die Gleichung

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 + 2V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \psi_l = 0 \quad (3)$$

bestimmt wird.

¹ HENNEBERG, Die Naturwissenschaften, 20, 501, 1932; Zs. f. Phys., 83, 555, 1933.

Für neutrale Atome geht das Atomfeld für grosse r sehr schnell gegen Null, und wir bekommen für diejenige Lösung von (3), welche im Nullpunkt verschwindet, die asymptotische Form:

$$\psi_l^a = B_l \cos \left(kr + \delta_l - \frac{l+1}{2} \pi \right). \quad (4)$$

Hier bedeutet B_l eine komplexe Konstante, welche durch Randbedingungen im Unendlichen zu bestimmen ist, während δ_l eine reelle Konstante ist, welche durch den Verlauf von $V(r)$ gegeben wird; δ_l ist ferner so definiert, dass sie verschwindet, wenn kein Feld vorhanden ist.

Eine angenäherte Lösung von (3) bekommen wir mit Hilfe der halbklassischen Methode in folgender Form:¹

$$\psi_l = B_l \cos \left(\int_R^r \sqrt{k^2 + 2V(\varrho) - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{\varrho^2}} d\varrho - \frac{\pi}{4} \right), \quad (5)$$

wo R die Nullstelle der Funktion unter dem Integralzeichen bedeutet. Für grosse r können wir (5) in der Form (4) schreiben, indem wir setzen:

$$\delta_l = \int_R^r \sqrt{k^2 + 2V(\varrho) - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{\varrho^2}} d\varrho - \frac{\pi}{4} + \frac{l+1}{2} \pi - kr. \quad (6)$$

Da $V(r)$ für grosse r schneller gegen Null geht als r^{-2} , so ist es für die numerische Berechnung von δ_l bequem, (6) auf die folgende Form zu bringen:

¹ KRAMERS Zs. f. Phys., 39, 828, 1926.

$$\delta_l = \int_R^\infty \sqrt{k^2 + 2V(\rho) - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{\rho^2}} d\rho - \int_{R_0}^\infty \sqrt{k^2 - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{\rho^2}} d\rho, \quad (7)$$

wo R_0 die Nullstelle von $\sqrt{k^2 - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{\rho^2}}$ bedeutet.¹

Damit (5) eine brauchbare Annäherung darstellt, müssen wir fordern, dass die Funktion $\Phi_l(r) = k^2 + 2V(r) - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{r^2}$ überall, ausser in der Nähe des Punktes $r = R$ der folgenden Bedingung genügt:

$$\Phi_l^{-\frac{3}{4}} (\Phi_l^{-\frac{1}{4}})'' \ll 1. \quad (8)$$

Für unser Geschwindigkeitsgebiet ist (8) überall erfüllt; dagegen kann man nicht die Lösung anwenden für Geschwindigkeiten in der Nähe des Ramsauermaximums, weil die Funktion Φ_l hier für gewisse l in einem grossen Intervall von r sehr klein wird.

Um jetzt die B_l zu bekommen, und die Streuamplitude als Funktion von θ zu bestimmen, müssen wir ausdrücken, dass Ψ für grosse Abstände eine ebene Welle darstellt, worüber eine sphärisch ausstrahlende Welle überlagert ist. Also dass:

$$\Psi \rightarrow e^{ikr \cos \theta} + \frac{1}{r} e^{ikr} F(\theta).$$

¹ Diese Umschreibung ist möglich, weil $\int_{R_0}^r \sqrt{k^2 - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{\rho^2}} d\rho$ für grosse r gleich $kr - \frac{l + \frac{1}{2}}{2} \pi$ wird.

² KRAMERS loc. cit.

Entwickeln wir die ebene Welle nach Kugelfunktionen, bekommen wir:

$$\sum \frac{1}{r} \psi_l^a P_l(\cos \theta) = \frac{1}{r} \left[\sum_l i^l (2l+1) \frac{P_l(\cos \theta)}{2k} \left(e^{ikr - \pi \frac{l+1}{2}} + e^{-ikr + \pi \frac{l+1}{2}} \right) + e^{ikr} F(\theta) \right].$$

Setzen wir für ψ_l^a den Ausdruck (4) ein, so bekommen wir nach einfacher Rechnung¹

$$B_l = \frac{1}{2k} (2l+1) i^l e^{i\delta_l} \quad (9)$$

und

$$F(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) \left(e^{2i\delta_l} - 1 \right). \quad (10)$$

Für ψ bekommen wir also

$$\psi = \frac{1}{2k} \frac{1}{r} \sum_l (2l+1) P_l \cos \theta i^l \left[e^{ikr - i\pi \frac{l+1}{2} + 2i\delta_l} + e^{-ikr + i\pi \frac{l+1}{2}} \right].$$

Man sieht hieraus, dass $2\delta_l$ die Phasenverschiebung der einfallenden und der reflektierten Welle l ter Ordnung darstellt. Diese Verschiebungen bestimmen nach (10) die Streuung, so dass die Streuung l ter Ordnung für $2\delta_l = 2n\pi$ verschwindet und für $2\delta_l = (2n+1)\pi$ maximal wird.

3. Anwendungen auf spezielle Streuprobleme.

Um jetzt die Streuintensität für verschiedene Winkel und verschiedene Geschwindigkeiten zu berechnen, müssen wir Formel (10) anwenden. Ist I_θ die Intensität pro Raumwinkeleinheit des in der Richtung θ gegen den Primärstrahl gestreuten Elektronenstroms, so ist diese Intensität gegeben

¹ Siehe z. B. ALLIS und MORSE, Zs. f. Phys., 70, 567, 1931.

durch das mit r^2 multiplizierte Amplitudenquadrat der ausstrahlenden sphärischen Welle, dividiert durch das Amplitudenquadrat der ebenen Welle. Setzen wir die einfallende Intensität gleich eins (d. h. ein Elektron pro cm^2 pro sek.) bekommen wir für I_θ , indem wir erinnern, dass unsere Intensitäten bis jetzt in Hartreeschen Einheiten gerechnet sind:

$$I_\theta = |F(\theta)|^2 a^2 = \frac{a^2}{4k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) P_l P_{l'} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} \cos(\delta_l - \delta_{l'}). \quad (11)$$

Hier bedeuten a den ersten Bohrschen Wasserstoffradius, und ist also gleich $0,53 \cdot 10^{-8}$ cm. Die δ_l berechnen wir mittels graphischer Integration aus Formel (7). Als Atomfeld benutzen wir für Argon das Hartreefeld, während wir für Neon, wo kein Hartreefeld berechnet ist, ein von HOLTSMARK¹ nach der Methode von PAULING² berechneten Feld benutzen.

In Fig. 1 sind für Argon die Integranden im Ausdruck (7) für verschiedene l als Funktion von r eingezeichnet. δ_l ist dann der Unterschied zwischen den von den beiden Integranden gebildeten Flächen. Diese Integranden sind gewissermassen analog zum radialen Impuls in der klassischen Mechanik, abgesehen davon, dass hier $\left(l + \frac{1}{2}\right)^2$ statt l^2 steht. Für $l = 0$ und $l = 1$ dringt das Elektron klassisch tief in das Innere des Atoms ein; hier ist das Feld sehr stark, und wir bekommen daher für den ersten Integranden ein ausgeprägtes Maximum. Für $l \geq 2$ dagegen dringt das Elektron klassisch überhaupt nicht in das Inneren ein, und die beiden Integranden werden daher nicht sehr verschieden.

¹ HOLTSMARK, Zs. f. Phys., 48, 231, 1928.

² PAULING, Proc. Roy. Soc., 114, 181, 1927.

In Fig. 2 und 3 sind für Argon und Neon die Kurven für δ_l als Funktion der Geschwindigkeit eingezeichnet. Man sieht, dass δ_l für $l = 0$ und $l = 1$ mit wachsender Geschwindigkeit immer abnimmt. Das bedeutet klassisch gesprochen, dass das Elektron mit wachsender Energie

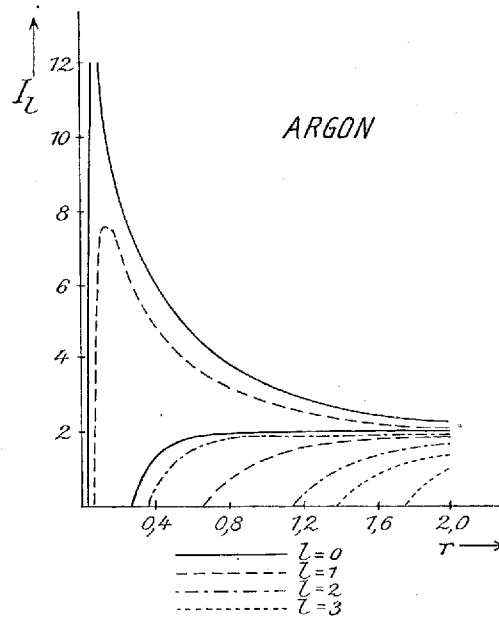


Fig. 1.

verhältnismässig weniger vom Atomfeld gestört wird. Für $l \geq 2$ dagegen zeigt die Figur, dass die δ_l jetzt für wachsende Geschwindigkeit erst zunehmen, dann ein Maximum erreichen und dann wieder abnehmen. Dieser Verlauf ist auch sehr verständlich, das bedeutet nämlich, dass die Elektronen mit grossem Impulsmoment zunächst mit wachsender Geschwindigkeit immer näher an den Atomkern kommen, und daher immer stärker vom Atomfeld gestört werden. Wenn aber die Elektronen so tief in das Atom-

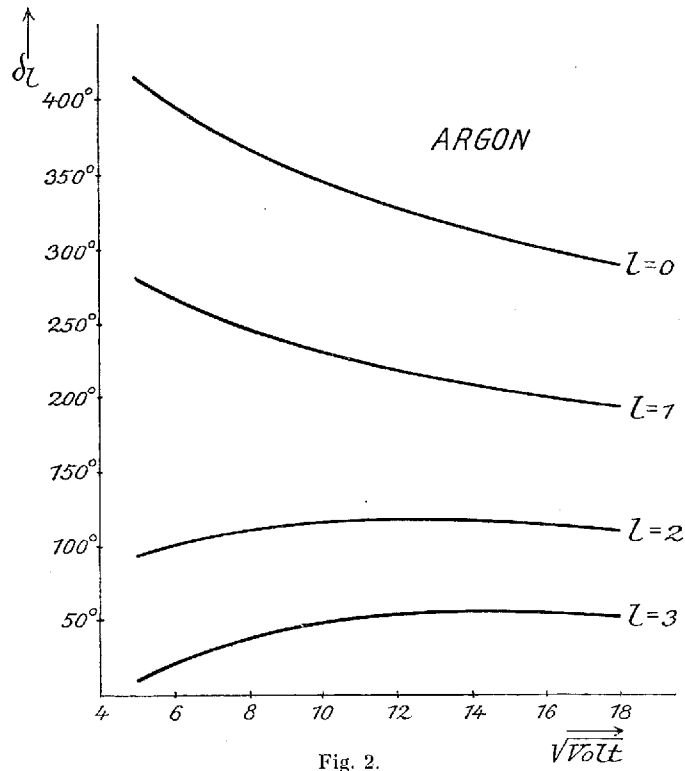


Fig. 2.

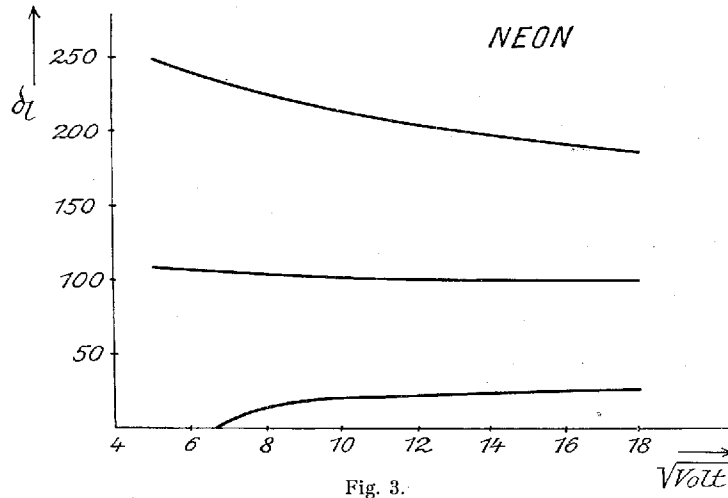


Fig. 3.

innere eindringen, dass sie bei Zunahme der Energie nur wenig tiefer eindringen können, dann wird die Abnahme der δ_l wegen der wachsenden Energie grösser als die Zunahme wegen des Atomfeldes, und die δ_l werden wieder abnehmen.

4. Vergleich mit den Experimenten und Diskussion.

In Fig. 4—7 sind die theoretischen und die experimentellen Kurven für die Streuintensität in einer bestimmten Richtung als Funktion der Geschwindigkeit eingezeichnet. Man sieht, dass die Theorie mindestens qualitativ den Verlauf der experimentellen Kurven wiedergibt. Die Minima und Maxima in Argon bei 135° und in Neon bei 90° sind, wie die Rechnung zeigt, durch Interferenz zwischen Gliedern verschiedener Ordnung verursacht. Zum Beispiel ist das Minimum für Argon 135° im wesentlichen durch Interferenz zwischen den Gliedern nullter, erster und zweiter Ordnung hervorgerufen, während das Minimum in Neon für 90° durch Interferenz zwischen Gliedern von nullter und zweiter Ordnung hervorgerufen ist. Obwohl die Übereinstimmung also qualitativ in Ordnung ist, so gibt es doch gewisse Abweichungen zwischen der theoretischen und der experimentellen Kurve. Um zu untersuchen, welche Rolle die Wahl des Atomfeldes spielt, haben wir in Fig. 8—10 die experimentelle Winkelverteilung nach MOHR und NICOLL mit der aus der Theorie gefundene Winkelverteilung verglichen. Die theoretische Winkelverteilung ist sowohl für die oben genannten Atomfelder als auch für das Fermi-Feld¹ berechnet.

Aus der Kurve für Argon sieht man, dass weder das Fermifeld noch das Hartreefeld völlige Übereinstimmung

¹ E. FERMI, Zs. f. Phys., 48, 73, 1928.

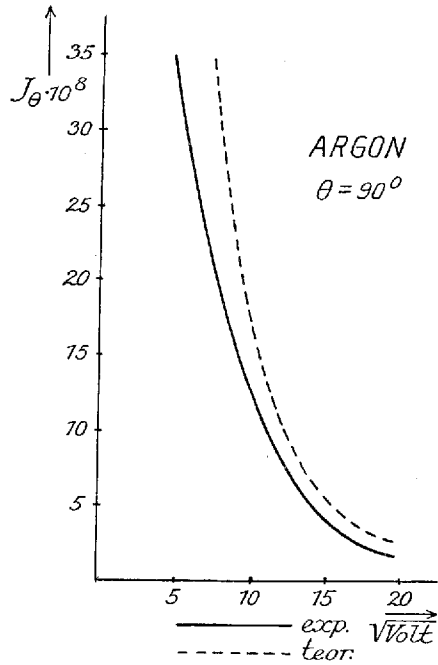


Fig. 4.

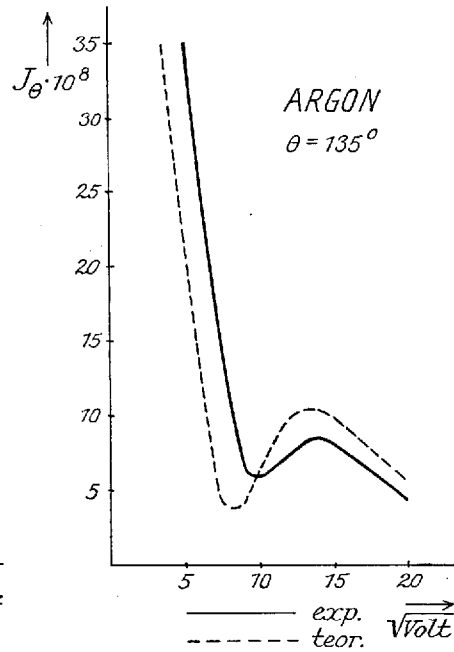


Fig. 5.

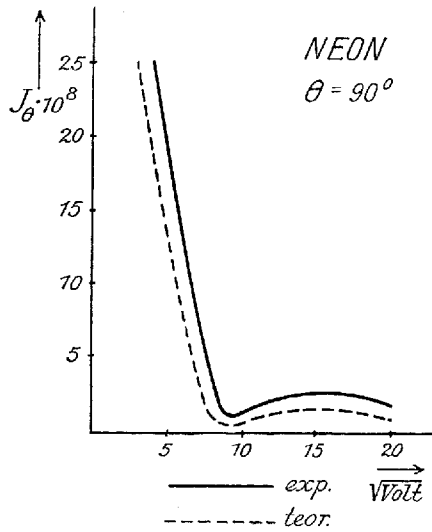


Fig. 6.

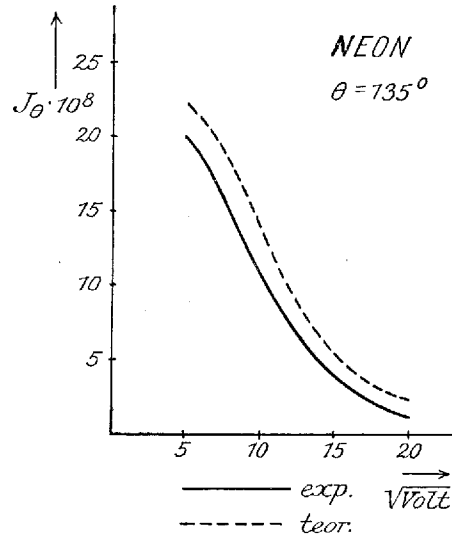


Fig. 7.

mit den Experimenten gibt. Es scheint vielmehr so, als ob das bestmögliche Feld einen Verlauf hat, welcher zwischen dem Verlauf des Hartreefeldes und des Fermifeldes liegt. Das ist aber auch sehr plausibel: Das Hartreefeld ist nämlich das Feld, welches mit Hilfe der Hartreeschen Ladungsverteilung eines ungestörten Atoms berechnet ist; in Stossproblemen ist es aber notwendig, die Rückwirkung des

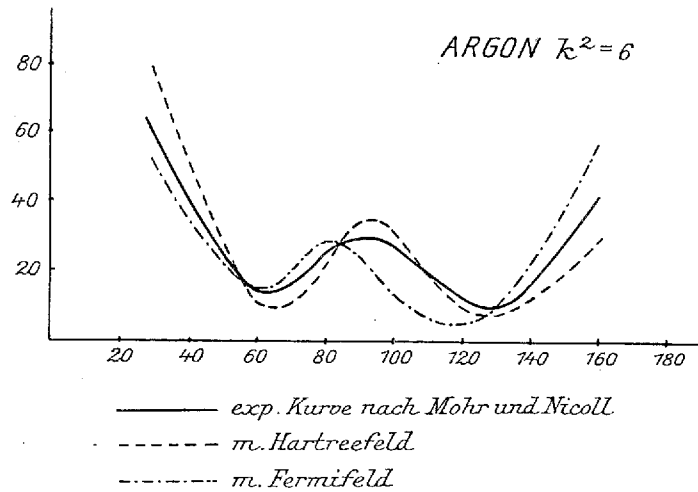


Fig. 8.

einfallenden Elektrons auf das Atomfeld zu berücksichtigen. Diese Polarisationswirkung bewirkt, dass das Atomfeld in grossen Abständen langsamer abnimmt als das Feld des ungestörten Atoms, und dadurch einen ähnlichen Verlauf zeigt, wie das Fermifeld, welches auch für grössere Abstände langsamer abnimmt als das Hartreefeld.

Bei Neon ist es, wie Fig. 9 und 10 zeigen, schwieriger, ein effektives Atomfeld anzugeben, denn für kleine Winkel ist das Fermifeld am besten, während das Paulingsche Feld für grössere Streuwinkel die beste Übereinstimmung mit

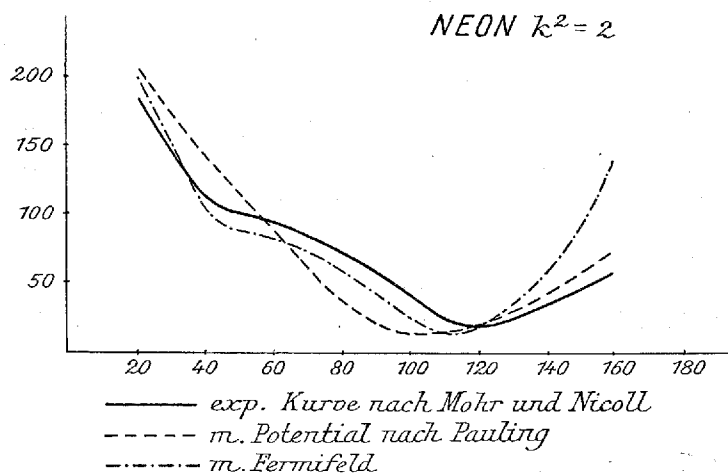


Fig. 9.

den Experimenten gibt. Es ist also für Neon unmöglich, ein statisches Atomfeld anzugeben, welches Übereinstimmung zwischen den theoretischen und den experimentellen Winkelverteilungen gibt. Das bedeutet offenbar, dass es für lang-

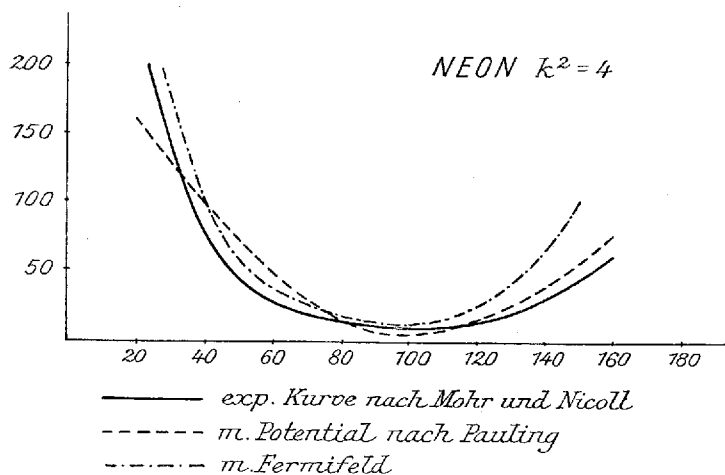


Fig. 10.

same Elektronen nicht erlaubt ist, das Streuproblem als ein Einkörperproblem zu behandeln, sondern dass es notwendig ist, die Möglichkeit von Austauscheffekten und unelastischen Stößen in der Theorie mitzubetrachten.

Die allgemeine Theorie solcher Stossprobleme ist von MASSEY und MOHR¹ entwickelt; bis jetzt ist es aber nur für Wasserstoff und Helium gelungen, die numerischen Berechnungen durchzuführen. Ohne eine solche Theorie zu benutzen ist es aber, wenigstens für leichtere Atome, nicht möglich, eine genauere Analyse der Winkelverteilungskurven durchzuführen.

Die vorliegende Arbeit ist im Institut für theoretische Physik der Universität, Kopenhagen, ausgeführt. Herrn Prof. N. BOHR, Herrn Dr. CHR. MØLLER und Herrn Dr. S. WERNER möchte ich gern für viele freundliche Ratschläge herzlichst danken.

¹ MASSEY und MOHR, Proc. Roy. Soc., 136, 289, 1932; 139, 187, 1933.