

**I N S T I T U T F Ü R P L A S M A P H Y S I K**  
**G A R C H I N G B E I M Ü N C H E N**

Polarisationseffekte bei der elastischen  
Elektronenstreuung

Polarization effects in the elastic  
electron scattering

W. Eckstein

IPP 7/1

Februar 1970

Die nachstehende Arbeit wurde im Rahmen des Vertrages zwischen dem Institut für Plasmaphysik GmbH und der Europäischen Atomgemeinschaft über die Zusammenarbeit auf dem Gebiete der Plasmaphysik durchgeführt.

Polarisationseffekte bei der elastischen  
Elektronenstreuung

Polarization effects in the elastic  
electron scattering

W. Eckstein

Abstract

A review is given of elastic electron scattering and the resulting spin polarization effects. The energies investigated range from 1 eV to about 1 MeV, and the range of scattering angles is above about  $20^\circ$ . In the theoretical part methods of calculating the differential cross sections and Sherman functions are described and numerical results given. The second part contains experimental results and compares them with theoretical values. In the third and last part polarization measurement by scattering is discussed in detail.

Zusammenfassung

Es wird ein zusammenfassender Bericht gegeben über die elastische Elektronenstreuung und die dabei auftretenden Polarisierungseffekte. Der betrachtete Energiebereich erstreckt sich auf 1 eV bis ca. 1 MeV, der Streuwinkelbereich auf Winkel über ca.  $20^\circ$ . In einem ersten theoretischen Teil werden die Methoden zur Berechnung von differentiellen Wirkungsquerschnitten und Shermanfunktionswerten sowie numerische Resultate dargestellt. Experimentelle Ergebnisse sowie der Vergleich mit theoretischen Daten sind im zweiten Teil aufgeführt, während in einem dritten Teil ausführlich auf die Polarisationsmessung durch Streuung eingegangen wird.

# I n h a l t

	Seite
1. ÜBERBLICK	1
2. EINLEITUNG (Qualitatives Bild)	3
3. THEORIE	5
3.1. Quantenmechanische Theorie (Potentialtheorie)	5
3.2. Bestimmung der Streuphasen (Integration des Differentialgleichungssystems)	10
3.2.1. Lineare Differentialgleichung 2. Ordnung	10
3.2.2. Nichtlineare Differentialgleichung 1. Ordnung	11
3.2.3. Potenzreihen-Methode	12
3.2.4. Coulombpotential	13
3.3. Die Aufsummierung der Reihen	13
3.3.1. Höhere Genauigkeit bei großen und kleinen Streuwinkeln	14
3.3.2. Bessere Konvergenz	14
3.4. Theoretische Ergebnisse	15
3.4.1. Der differentielle Wirkungsquerschnitt	15
3.4.1.1. Allgemeiner Überblick	15
3.4.1.2. Energien oberhalb 10 keV	17
3.4.1.3. Energien unterhalb 10 keV	19
3.4.2. Die Shermanfunktion	19
3.4.2.1. Allgemeiner Überblick	19
3.4.2.2. Energien über 10 keV	21
3.4.2.3. Energien unter 10 keV	21
3.4.3. Diskussion der Beugungsstruktur bei kleinen Energien	23
3.4.4. Einfluß des Potentials	26
3.4.4.1. Energien über 200 eV	26
3.4.4.2. Energien unter ca. 200 eV	28
3.4.5. Anwendung von relativistischen und nichtrelativistischen Rechnungen bei kleinen Energien	32
3.4.6. DWQ und Shermanfunktion bei der Streuung an Molekülen	35
4. EXPERIMENTELLE ERGEBNISSE UND VERGLEICH MIT DER THEORIE	39
4.1. Meßanordnung	39
4.2. Fehlerquellen und Meßgenauigkeit	39
4.3. Streuung an Gasen	41
4.3.1. Energien über 10 keV	41
4.3.2. Energien unter 10 keV	43
4.3.2.1. Streuer mit hoher Kernladungszahl	43
4.3.2.1.1. Energien über ca. 100 eV	43
4.3.2.1.1.1. Differentieller Wirkungsquerschnitt	43
4.3.2.1.1.2. Spinpolarisation	47
4.3.2.1.2. Energien unter 100 eV	52
4.3.2.2. Edelgase	56
4.3.2.2.1. Differentieller Wirkungsquerschnitt	56
4.3.2.2.2. Spinpolarisation	63
4.3.2.3. Moleküle	64
4.3.2.4. Einfluß der Mehrfachstreuung	69

4.4.	Streuung an festen Targets	70
4.4.1.	Energien über 10 keV	70
4.4.2.	Energien unter 10 keV	74
5.	DER POLARISATIONSNACHWEIS	81
5.1.	Prinzip der Polarisationsbestimmung	81
5.2.	Der reale Polarisationsdetektor	82
5.2.1.	Apparative Asymmetrien und ihre Beseitigung	83
5.2.2.	Einfluß eines Streu-Untergrundes	85
5.2.3.	Fehlerbetrachtung und ihre Folgerungen für einen günstigen Polarisationsdetektor	85
5.3.	Der Polarisationsdetektor bei hohen Energien	86
5.3.1.	Allgemeine Betrachtungen	86
5.3.2.	Der Einfluß der Folien	87
5.3.2.1.	Die Kleinwinkelvielfachstreuung	87
5.3.2.2.	Die Mehrfachstreuung um große Winkel	87
5.3.2.3.	Die Schichtdickenabhängigkeit	88
5.3.3.	Auswirkungen unsymmetrischen Strahleinfalls	93
5.3.4.	Einfluß der Rückstreuung im Streugefäß	94
5.3.5.	Die Wahl der Detektoren	96
5.3.6.	Die Elektronik	97
5.3.7.	Relativ- und Absolutmessungen	98
5.3.8.	Beispiele von Mottstreuern	98
5.4.	Polarisationsdetektor bei kleinen Energien	99
5.4.1.	Allgemeine Betrachtungen	99
5.4.2.	Wahl des Streuers und Energiediskriminierung	100
5.4.3.	Rückstreuung, Strahljustierung und Nachweis	100
5.5.	Vergleich der Polarisationsdetektoren	101
6.	MATHEMATISCHER ANHANG	
7.	LITERATURVERZEICHNIS	

## 1. Überblick

Auf dem Gebiet polarisierter Elektronenstrahlen ist die elastische Streuung (Streuung an einem elektrischen Zentralpotential) der bisher am besten untersuchte Abschnitt. Er ist zudem recht gut verstanden und insofern auch weitgehend abgeschlossen. Außerdem liefert die Potentialstreuung die am häufigsten angewandte Methode zum Nachweis des Polarisationsgrades eines Elektronenstrahls. Da die Anwendungen polarisierter Elektronenstrahlen in den letzten Jahren eine große Ausweitung erfahren hat, ist es nützlich, eine Übersicht über das für den Polarisationsnachweis so wichtige Kapitel der Potentialstreuung vorzulegen.

Ein Elektronenstrahl heißt polarisiert, wenn es eine feste Raumrichtung gibt, bezüglich der die beiden Spinzustände parallel und antiparallel verschieden häufig besetzt sind. Die Raumrichtung, in der der Spinzustand parallel am häufigsten besetzt ist, definiert die Richtung des Polarisationsvektors. Die normierte Differenz der Besetzungszahlen der beiden Spinzustände in dieser Richtung liefert den Betrag des Polarisationsvektors, den sogenannten Polarisationsgrad. Man spricht von transversaler Polarisation, wenn der Polarisationsvektor senkrecht zur Bewegungsrichtung, und von longitudinaler Polarisation, wenn der Polarisationsvektor in oder gegen die Bewegungsrichtung der Elektronen steht. Bei der zu behandelnden elastischen Elektronenstreuung tritt immer transversale Polarisation auf. Für eine ausführliche Diskussion des Polarisationsvektors sei auf die Arbeiten von Tolhoek (1956) und Farago (1966) hingewiesen.

Es lassen sich verschiedene spinabhängige Wechselwirkungen angeben. Sie können zur Erzeugung oder (bzw. und) zum Nachweis polarisierter Elektronenstrahlen ausgenutzt werden:

- a) Wechselwirkung des Spins mit makroskopischen elektromagnetischen Feldern:  
Polarisierte Atomstrahlen (Fues und Hellmann, 1930; Friedmann, 1961; Bopp, Maison, Regenfus und Siegmann, 1965; Long, Raith und Hughes, 1965; Baum, 1968)
- b) Spin-Bahn-Wechselwirkung:  
Elastische Streuung (Potentialstreuung), Literatur wird später im einzelnen aufgeführt  
Resonanzstreuung (Franzen und Gupta, 1965; Reichert und Deichsel, 1967)  
Spinparamagnetismus im Leitungsband (Feldemission: Kennedy, 1965)
- c) Spin-Spin-Wechselwirkung:  
M<sub>1</sub>-Streuung (Raith und Schliepe, 1962; Harmsen und Holm, 1962; Frauenfelder und Steffen, 1965)
- d) Direkter Spin-Spin Austausch:  
Austauschstreuung (Byrne und Farago, 1965; Farago und Siegmann, 1966; Farago und Siegmann, 1968; Dehmelt, 1958)
- e) Austauschwechselwirkung in Ferromagneten:  
Spinpolarisierte Energie-Bandstrukturen in ferromagnetischen Materialien (Feldemission: Fues und Hellmann, 1930; Pimbley und Müller, 1962; von Issendorff und Fleischmann, 1962; Müller, Siegmann und Obermair, 1967; Hofmann, Regenfus, Schärpf und Kennedy, 1967; Chrobok, Hofmann und Regenfus, 1968; Obermair, 1969. Photoeffekt: Rozentsveig, 1956; Dayhoff, 1959; Fowler und Marton, 1959; Long, Hughes, Greenberg, Ames und Christensen, 1965; Busch, Campagna, Cotti und Siegmann, 1969; Busch u.a., 1969)
- f) Spin-Photon-Wechselwirkung:  
Optisches Pumpen (Boersch, Lemmerich und Schliepe, 1964; Donnally, Raith und Becker, 1968.  
Optisch gepumpte Gasentladung: McCusker, Hatfield und Walters, 1969).  
Photoionisierung (Fano, 1969; Raith, 1969)
- g) Schwache Wechselwirkung:  
 $\beta$ -Zerfall (Schopper, 1966; Wu, 1965)

Durch die Messung des durch die verschiedenen Wechselwirkungen erzeugten Polarisationsgrades von Elektronenstrahlen lassen sich Rückschlüsse über die Wechselwirkungen selbst ziehen und theoretische Ansätze testen. Entsprechend kann man natürlich polarisierte Elektronenstrahlen einer dieser Wechselwirkungen aussetzen und die Änderung des Polarisationsgrades dieses Strahls messen. Zur ersten Art gehören zum Beispiel die Bestimmung des Polarisationsgrades von Elektronenstrahlen, die durch  $\beta$ -Zerfall, Feldemission oder Photoeffekt erzeugt wurden; zur zweiten Art zählen im wesentlichen alle Mehrfach-Streuexperimente.

Die Bedeutung des Gebiets der polarisierten Elektronenstrahlen liegt vor allem in der Physik der Streuprozesse: Theoretische Berechnung von differentiellen Wirkungsquerschnitten und Shermanfunktionswerten (Polarisationsgrad) sowie eine experimentelle Prüfung der Theorie, insbesondere bei kleinen Elektronenenergien, bei denen verschiedene mögliche theoretische An-

sätze für die Berücksichtigung von Austausch und Polarisierung getestet werden können; Messung von Spinaustauschquerschnitten; Polarisierungseffekte bei der inelastischen Streuung, der Resonanzstreuung und bei der Streuung an Festkörpern bzw. deren Oberflächen und magnetischen Oberflächenstrukturen; Einfluß der Mehrfachstreuung und Untersuchungen von einfachen Molekülmodellen. Neuerdings werden polarisierte Elektronenstrahlen auch für die Festkörperphysik interessant: Es sind Aussagen über spinpolarisierte Bänderstrukturen in ferromagnetischen Materialien und über den Spinparamagnetismus im Leitungsband (von Halbleitern) durch die Bestimmung des Polarisationsgrades der durch Feldemission bzw. Photoeffekt aus diesen Festkörpern erzeugten Elektronenstrahlen möglich. Ferner besteht ein gewisses Interesse an einer gepulsten Quelle für einen intensitätsreichen Elektronenstrahl mit hohem Polarisationsgrad für die Hochenergiephysik. - Alle diese Experimente benötigen einen Polarisationsnachweis, der in den meisten Fällen ein Mottdetektor (elastische Streuung bei ca. 100 keV) sein wird.

Die Entwicklung des Gebiets der polarisierten Elektronenstrahlen begann mit der Arbeit von Mott, der 1929 theoretisch zeigte, daß man durch elastische Streuung eines unpolarisierten Elektronenstrahls mit einer Energie von ca. 100 keV an Atomen mit hoher Kernladungszahl einen polarisierten Elektronenstrahl erzeugen kann. Nach vielen vergeblichen Versuchen in den folgenden Jahren konnten erst 1943 Shull, Chase und Myers die Mottsche Theorie qualitativ bestätigen. Im nächsten Jahrzehnt war man an verschiedenen Orten damit beschäftigt, das erste erfolgreiche Experiment zu verbessern. Einen wesentlichen Aufschwung nahm das Gebiet mit der Entdeckung der Nichterhaltung der Parität 1956 (Schopper, 1966). Jetzt setzten genauere Untersuchungen über die Mott-Streuung ein, um den Polarisationsgrad von Elektronenstrahlen aus dem  $\beta$ -Zerfall zuverlässig messen zu können. Diese Tendenz wurde auch dadurch unterstützt, daß die Entwicklung schneller und leistungsfähiger Rechenmaschinen die komplizierten numerischen Berechnungen von differentiellen Wirkungsquerschnitten und Shermanfunktionswerten ermöglichte (Sherman, 1956). 1961 wurden von Deichsel zum ersten Mal Polarisierungseffekte bei der elastischen Streuung langsamer Elektronen (ca. 1 keV) experimentell gefunden, nachdem theoretische Hinweise von Mohr und Tassie schon 1941 und von Mohr 1943 gegeben worden waren. Erste ausführliche numerische Ergebnisse für diesen niederenergetischen Bereich wurden von Bunyan 1963 veröffentlicht. Danach setzten systematische theoretische und experimentelle Untersuchungen bei kleinen Elektronenenergien ein. Gleichzeitig wurden viele neue Methoden wie die der Ionisierung polarisierter Atomstrahlen, der Resonanzstreuung, der Feldemission, des Photoeffekts, der Austauschstreuung und der Ionisierung nach optischem Pumpen zur Erzeugung polarisierter Elektronenstrahlen geprüft. Die weitere Entwicklung dieser Methoden ist noch in vollem Gange. Einen Überblick geben Kessler (1969) und Raith (1969).

Die elastische Elektronenstreuung, die hier ausschließlich behandelt werden soll, kann zu folgenden Untersuchungen herangezogen werden:

- a) Zur Prüfung der Theorie bzw. ihrer mathematischen Näherung. Hierunter fällt die experimentelle Bestimmung von relativen (absoluten) differentiellen Wirkungsquerschnitten und der Spinpolarisation zum Vergleich mit der Theorie, sowie das Testen theoretischer Ansätze für die Berücksichtigung von Austauscheffekten und einer Polarisierung der atomaren Elektronenhülle bei kleinen Elektronenenergien, als auch die Prüfung einfacher Molekülmodelle.
- b) Zur Herstellung polarisierter Elektronenstrahlen. Hierzu ist die elastische Streuung nur bedingt geeignet. Man erreicht entweder mittlere Intensitäten mit geringem Polarisationsgrad oder geringe Intensitäten mit hohem Polarisationsgrad.
- c) Zum Nachweis polarisierter Elektronenstrahlen. Die elastische Streuung liefert die Standardmethode, den sogenannten Mott-Detektor für Elektronenenergien von größenordnungsmäßig 100 keV. Auch bei kleinen Elektronenenergien läßt sich ein Polarisationsdetektor bauen.
- d) Zur Untersuchung von Oberflächen. Die elastische Streuung an polykristallinem Material und Einkristallen sowie an magnetischen Oberflächenstrukturen kommt hier in Frage.

Nicht einbezogen in diese Zusammenfassung wird die Elektronenstreuung bei Energien über 1 MeV, da dann die Größe des Atomkerns die Streuung beeinflusst (nuclear size effect). Außerdem wird auf die Behandlung der Streuung an Atomen mit kleiner Kernladungszahl ( $Z < 10$ ) und um kleine Winkel ( $< 20^\circ$ ) verzichtet, weil dabei nur sehr kleine Polarisierungseffekte auftreten.

In einem ersten Abschnitt werden die theoretischen Grundlagen zur Bestimmung des differentiellen Wirkungsquerschnitts (DWQ) und der Shermanfunktion (S) angegeben, soweit man mit dem Konzept der Potentialstreuung auskommt. Es folgen Abschnitte über numerische und experimentelle Ergebnisse, die miteinander verglichen werden. Ein letzter Teil geht ausführlich auf die Polarisationsmessung ein. Die Literatur ist bis Ende 1969 berücksichtigt.

2. Einleitung (Qualitatives Bild).

Das Auftreten von Polarisationserscheinungen bei der elastischen Streuung von Elektronen an Atomen kann man sich anschaulich so vorstellen:

Das streuende Atom besitzt ein elektrisches Feld von der Form

$$\vec{E} = \frac{Ze}{r^3} \cdot \vec{r}$$

(wenn man von der Deformation des Coulombpotentials durch die Hüllenelektronen absieht). Das Elektron wird durch die anziehende Kraft des Atomkerns beschleunigt und erhält dadurch relativistische Geschwindigkeit. Infolge dieser Geschwindigkeit sieht das Elektron ein Magnetfeld der Größe

$$\vec{H} = \frac{1}{c} (\vec{v} \times \vec{E}) \quad (\text{im Ruhssystem des Elektrons})$$

Das Magnetfeld  $\vec{H}$  wechselwirkt mit dem magnetischen Moment des Elektrons

$$\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} \cdot \vec{S}$$

und erzeugt eine Kraft auf das magnetische Moment

$$\vec{K} = \text{grad} (\vec{\mu} \cdot \vec{H}) = (\vec{\mu} \cdot \text{grad}) \vec{H}$$

für die beiden im Magnetfeld  $\vec{H}$  möglichen Einstellungen des Elektronenspins in oder gegen die Richtung des Magnetfelds  $\vec{H}$ , also senkrecht zur Streuebene (die Streuebene ist durch die Geschwindigkeiten des Elektrons vor und nach der Streuung festgelegt). Für jede dieser beiden Komponenten ändert sich das Coulombpotential um die Wechselwirkungsenergie  $U$ , die durch die Einwirkung des Magnetfeldes  $\vec{H}$  auf das magnetische Moment des Elektrons hervorgerufen wird (wenn man einmal von der Thomaspräzession absieht, siehe auch Farago, 1967)

$$U = \mp (\vec{\mu} \cdot \vec{H}) = \pm \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r^3} \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 (\vec{L} \cdot \vec{S})$$

wobei  $\vec{L} = m \vec{r} \times \vec{v}$  der Bahndrehimpuls ist.

Das bedeutet, daß die Elektronen, deren Spin in Magnetfeldrichtung zeigt, ein geringeres Potential vorfinden als die Elektronen, deren Spin zur Magnetfeldrichtung entgegengesetzt ist; wobei natürlich vorausgesetzt wurde, daß die Elektronen in gleichem Abstand am Kern vorbeifliegen (siehe Abb.1). Daher werden Elektronen mit verschiedener Spineinstellung etwas unterschiedlich gestreut und infolge dessen ist bei einem festen Streuwinkel die Anzahl  $N^+$  der Elektronen mit Spin in Richtung  $\vec{H}$  ("spin up") und die Anzahl  $N^-$  der Elektronen mit Spin entgegengesetzt zur Richtung  $\vec{H}$  ("spin down") nicht gleich. Der Polarisationsgrad eines Elektronenstrahls ist definiert durch

$$P = \frac{N^+ - N^-}{N^+ + N^-} \quad (1)$$

Man findet so im allgemeinen für den gestreuten Elektronenstrahl einen von Null verschiedenen Polarisationsgrad. Den Polarisationsgrad kann man direkt aus der Differenz der DWQ für Elektronen mit "spin up" und "spin down" entnehmen (Abb. 2), denn

$$\sigma^+ \sim N^+ \quad \text{und} \quad \sigma^- \sim N^-$$

wobei  $\sigma^+ + \sigma^-$  der DWQ für die elastische Elektronenstreuung ist.

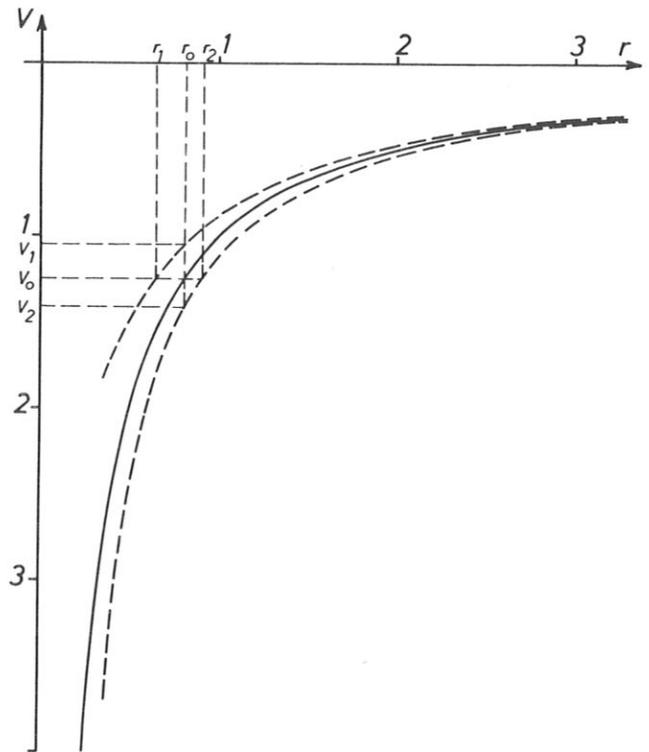


Abb.1 Potential als Funktion von  $r$  für Elektronen mit entgegengesetzten Spinstellungen. Erläuterungen im Text.

$$|V_1(r) - V_0(r)| = |V_2(r) - V_0(r)| = U$$

aus diesem anschaulichen Bild folgt qualitativ, daß der Polarisierungseffekt zunimmt mit der Größe der Wechselwirkungsenergie  $U$ , also mit der Kernladungszahl des streuenden Atoms und mit dem Impuls der Elektronen.

Dieses Bild ist für Elektronenenergien oberhalb einiger keV brauchbar, für kleinere Energien jedoch nicht ausreichend. Im Energiebereich einiger hundert Elektronenvolt liegen die Wellenlängen der Elektronen

$$\lambda = \left( \frac{150}{\text{Volt}} \right)^{1/2} \text{ in } \text{Å} \quad (2)$$

in der Größe der Durchmesser der streuenden Atome. Daher tritt Beugung auf: Der DWQ hat in diesem Energiebereich eine wellige Struktur. Bedingt durch die kleinere Energie der Elektronen ist die Wechselwirkungsenergie  $U$  geringer, und die Unterschiede in der Streuung der Elektronen mit "spin up" und "spin down" nehmen ab. Man sollte in diesem niederenergetischen Bereich überhaupt nur kleine Polarisationsgrade erwarten. Durch die Beugungsstruktur des DWQ kann jedoch der Polarisationsgrad bei den Streuwinkeln groß werden,

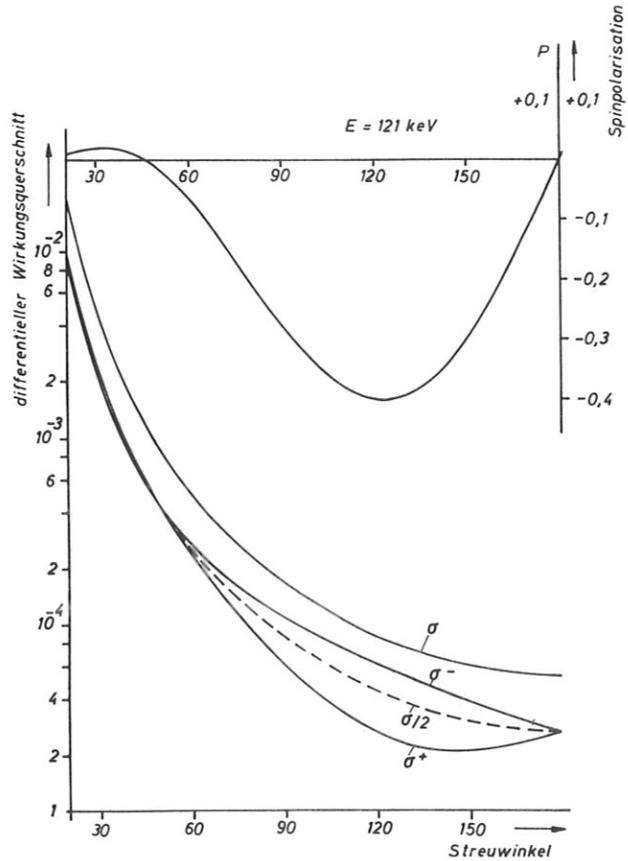


Abb.2 DWQ und Polarisationsgrad (Shermanfunktion) für elastische Streuung von 121 keV-Elektronen an Hg.

$\sigma^+$  = DWQ für "spin-up"-Elektronen  
 $\sigma^-$  = DWQ für "spin-down"-Elektronen

$$\sigma = \sigma^+ + \sigma^-$$

(nach Werten von Holzwarth und Meister, 1964)

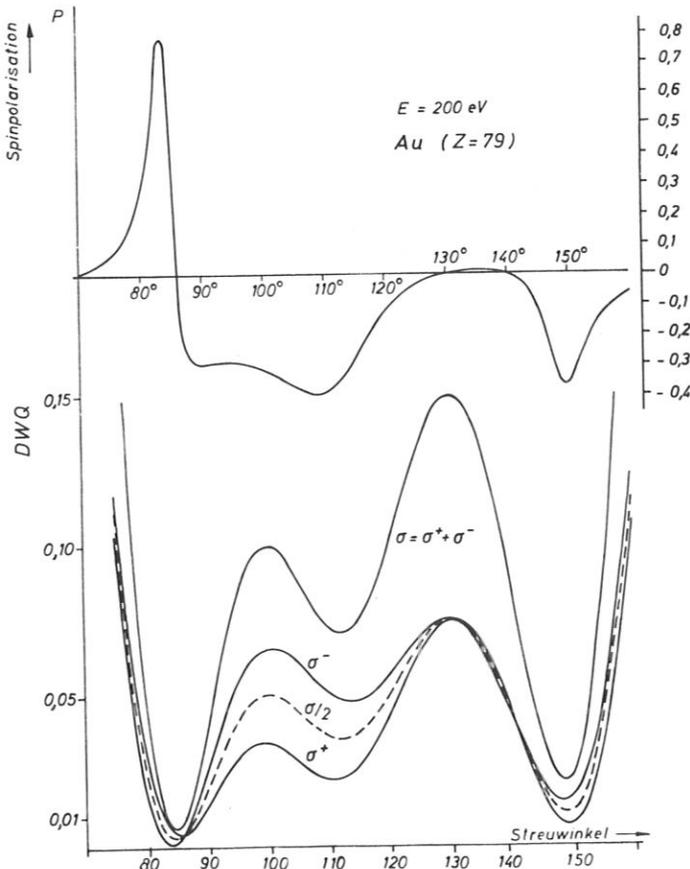


Abb.3 DWQ und Polarisationsgrad (Shermanfunktion) für elastische Streuung von 200 eV-Elektronen an Hg.

$\sigma^+$  = DWQ für "spin-up"-Elektronen  
 $\sigma^-$  = DWQ für "spin-down"-Elektronen

$$\sigma = \sigma^+ + \sigma^-$$

(nach Werten von Holzwarth und Meister, 1964)

bei denen der DWQ ein Minimum hat, wo also z.B. der DWQ für "spin up"-Elektronen ein Minimum durchläuft, während der DWQ für "spin-down"-Elektronen sein Minimum noch nicht erreicht oder schon passiert hat (Abb. 3). Ganz ähnliche Beugungs- und Polarisierungseffekte treten auch bei der Streuung von Licht an Kugeln auf, deren Durchmesser mit der Wellenlänge des Lichts vergleichbar sind (Mie, 1908). Auch in der Hochenergiephysik sind diese Effekte bekannt, wenn die Wellenlänge der Teilchen in die Größenordnung der Kerndurchmesser kommt (z.B. Faissner, 1959).

Bei noch kleineren Elektronenenergien, ca. 100 eV und darunter, muß man zusätzlich Austausch- und eine Polarisierung der Elektronenhülle des Atoms durch das vorüberfliegende Elektron berücksichtigen. Die Streuverhältnisse werden hier noch unübersichtlicher, und die Anwendbarkeit des oben geschilderten Bildes ist nicht mehr möglich.

Diese anschauliche Betrachtung läßt zwar das Auftreten von Polarisationserscheinungen bei der elastischen Elektronenstreuung plausibel erscheinen, gestattet aber in keiner Hinsicht eine angenäherte Berechnung der wahren Verhältnisse. Hierzu ist es notwendig, das Streuproblem mit der Diracgleichung durchzurechnen.

### 3. Theorie

#### 3.1. Quantenmechanische Theorie (Potentialtheorie)

Das Potential  $V(r)$  wird bei der elastischen Elektronenstreuung an Atomen kugelsymmetrisch angenommen. Die Partialwellenmethode ist daher ein geeignetes Verfahren zur Lösung des Problems. Etwas unübersichtlich wird die Methode dadurch, daß man es hier mit der Diracgleichung und dementsprechend mit einer vierkomponentigen Wellenfunktion zu tun hat. Man macht analog zur nichtrelativistischen Streutheorie den folgenden Ansatz

$$\Psi = \{ \Psi_\lambda \} = a_\lambda e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} u_\lambda(\theta, \phi) \quad (3)$$

für große Abstände vom Streuzentrum. Die vier Komponenten  $\Psi_\lambda$  der Wellenfunktion  $\Psi$  setzen sich in ihrer asymptotischen Form aus einlaufenden ebenen Wellen und vom Streuzentrum auslaufenden Kugelwellen zusammen. Die auslaufenden Kugelwellen sind mit Funktionen  $u_\lambda$  moduliert, die außer von den Streuwinkeln auch von der Elektronenenergie und dem Potential abhängen. Die Funktionen  $u_\lambda$  bestimmen den differentiellen Wirkungsquerschnitt (DWQ)  $I(\theta, \phi)$

$$I(\theta, \phi) d\omega = \left\{ \sum_{\lambda=1}^4 |u_\lambda(\theta, \phi)|^2 / \sum_{\lambda=1}^4 |a_\lambda|^2 \right\} d\omega$$

Man kann zeigen, daß man bei der elastischen Streuung mit zwei Komponenten der Wellenfunktion  $\Psi$  auskommt (siehe Anhang 1), entsprechend auch mit zwei Funktionen  $u_\lambda$ . Der DWQ wird also

$$I(\theta, \phi) d\omega = \frac{|u_3|^2 + |u_4|^2}{|a_3|^2 + |a_4|^2} d\omega \quad (4)$$

Elektronen, deren Spin in Richtung des Impulses zeigt, lassen sich darstellen durch (Mott und Massey, 1965)

$$\begin{aligned} \Psi_3 &\sim A e^{ikz} \\ \Psi_4 &\sim 0 \end{aligned} \quad (5)$$

wenn der Impuls die Richtung der z-Koordinate hat. Analog erhält man für Elektronen mit Spins antiparallel zum Impuls

$$\begin{aligned} \Psi_3 &\sim 0 \\ \Psi_4 &\sim B e^{ikz} \end{aligned} \quad (6)$$

Ist sowohl A als auch B von Null verschieden und  $A \neq B$ , so heißt der Elektronenstrahl teilweise polarisiert.

Einen unpolarisierten Elektronenstrahl kann man sich zusammengesetzt denken aus der gleichen Anzahl von Elektronen mit Spin parallel und Elektronen mit Spin antiparallel zum Impuls, also  $A = B$ .

Im Falle der Streuung an einem kugelsymmetrischen Potential haben die beiden Komponenten  $\Psi_3$  und  $\Psi_4$  folgende asymptotische Formen

$$\left. \begin{aligned} \Psi_3 &\sim e^{ikz} + r^{-1} e^{ikr} f_1(\theta, \varphi) \\ \Psi_4 &\sim r^{-1} e^{ikr} g_1(\theta, \varphi) \end{aligned} \right\} \text{Spin} \uparrow \uparrow \text{Impuls} \quad (7)$$

$$\left. \begin{aligned} \Psi_3 &\sim r^{-1} e^{ikr} g_2(\theta, \varphi) \\ \Psi_4 &\sim e^{ikz} + r^{-1} e^{ikr} f_2(\theta, \varphi) \end{aligned} \right\} \text{Spin} \downarrow \uparrow \text{Impuls} \quad (8)$$

Zur Bestimmung der Funktionen  $f_1$  und  $g_1$  muß die Diracgleichung gelöst werden (siehe Anhang 2). Darwin (1928) gibt für ein Potential  $V(r)$  folgende Lösungsgruppen

$$\left. \begin{aligned} \Psi_3 &= (\ell+1) G_\ell P_\ell(\cos \theta) & \Psi_4 &= -G_\ell P_\ell^1(\cos \theta) e^{i\varphi} \\ \Psi_4 &= \ell G_{-\ell-1} P_\ell(\cos \theta) & \Psi_3 &= G_{-\ell-1} P_\ell^1(\cos \theta) e^{i\varphi} \end{aligned} \right\} \quad (7a)$$

$$\left. \begin{aligned} \Psi_3 &= G_\ell P_\ell^1(\cos \theta) e^{-i\varphi} & \Psi_4 &= (\ell+1) G_\ell P_\ell(\cos \theta) \\ \Psi_4 &= -G_{-\ell-1} P_\ell^1(\cos \theta) e^{-i\varphi} & \Psi_3 &= \ell G_{-\ell-1} P_\ell(\cos \theta) \end{aligned} \right\} \quad (8a)$$

Daß hier bei (7a) und (8a) jeweils zwei  $\Psi_3$  und  $\Psi_4$  auftreten, liegt an der Wahl der Laufzahl  $\ell$ . Mit einem anders gewählten Index kann man die Lösung auch mit je einem  $\Psi_3$  und  $\Psi_4$  schreiben. Die Funktionen  $G_\ell$  und  $G_{-\ell-1}$  sind Lösungen der gekoppelten Differentialgleichungen

$$\frac{1}{\hbar c} \left[ W + eV + mc^2 \right] F_K(r) + \frac{dG_K(r)}{dr} + \frac{1+K}{r} G_K(r) = 0 \quad (9)$$

$$-\frac{1}{\hbar c} \left[ W + eV - mc^2 \right] G_K(r) + \frac{dF_K(r)}{dr} + \frac{1-K}{r} F_K(r) = 0 \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \text{für } K &= -(\ell+1) & , & \quad K < 0 \\ \text{für } K &= +\ell & , & \quad K > 0 \end{aligned}$$

Wie man aus (7a) und (8a) erkennt, benötigt man nur die Funktionen  $G_\ell$  und  $G_{-\ell-1}$ . Die Funktionen  $F_K$  lassen sich eliminieren, indem man  $F_K(r)$  aus (9) und  $\frac{dF_K}{dr}$  aus der differenzierten Gleichung (9) in Gleichung (10) einsetzt. Man erhält dann

$$G_K'' - \left( \frac{\eta^2}{\eta} - \frac{2}{r} \right) G_K' - \left( \frac{\eta^2}{\eta} \frac{1+K}{r} + \frac{K(K+1)}{r^2} - \frac{(W+eV)^2}{\hbar^2 c^2} + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2 c^2} \right) G_K = 0 \quad (11)$$

wobei

$$\eta = \frac{1}{\hbar c} (W + eV + mc^2) = \frac{mc}{\hbar} (1 + \gamma) + \frac{eV}{\hbar c}, \quad \gamma = (1 - \beta^2)^{-\frac{1}{2}}$$

Die Substitution  $G_K(r) = \eta^{1/2} \frac{1}{r} H_K(r)$  liefert für die Funktionen  $H_K(r)$  eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$H_K'' + \left( k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U_K(r) \right) H_K = 0 \quad (12)$$

mit

$$U_K(r) = \frac{K}{r} \cdot \frac{\eta^2}{\eta} + \frac{3}{4} \left( \frac{\eta^2}{\eta} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{\eta''}{\eta} + \frac{e^2 V^2}{\hbar^2 c^2} + 2 \frac{m}{\hbar^2} \gamma eV, \quad W^2 - m^2 c^4 = c^2 \hbar^2 k^2$$

Diese Differentialgleichung entspricht genau der Gleichung, die die Grundlage für die Partialwellenmethode in der nichtrelativistischen Theorie ist. Somit läßt sich auch hier die Partialwellenanalyse in der üblichen Weise anwenden und es ergeben sich für die gesuchten Funktionen  $f_1$  und  $g_1$  die folgenden Ausdrücke (siehe Anhang 3)

$$f_2(\theta, \varphi) = f_1(\theta, \varphi) = f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ (\ell+1) (e^{2i\delta_\ell} - 1) + \ell (e^{2i\delta_{-\ell-1}} - 1) \right\} P_\ell(\cos \theta)$$

$$\begin{aligned} g_2(\theta, \varphi) &= -g(\theta) e^{-i\varphi} \\ g_1(\theta, \varphi) &= g(\theta) e^{-i\varphi} \end{aligned} \quad \text{mit} \quad g(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ -e^{2i\delta_\ell} \ell + e^{2i\delta_{-\ell-1}} \right\} P_\ell^1(\cos \theta)$$

Das Streuprobblem ist damit zurückgeföhrt auf die Bestimmung der Streuphasen  $\delta_l, \delta_{-l-1}$ . Sie hängen ab von der Elektronenenergie und dem Potential  $V(r)$ . Auf die Bestimmungen der Streuphasen wird in 3.2 eingegangen. Zunächst soll jedoch aufgezeigt werden, wie der DWQ und die Polarisation mit den Funktionen  $f_1$  und  $g_1$  zusammenhängen.

Der DWQ kann natürlich mit Hilfe der Formeln (4) und (7, 8) bestimmt werden. Es soll jedoch hier ein allgemeineres Verfahren wiedergegeben werden, mit dem der DWQ und die Polarisation auch nach mehreren elastischen Streuungen angegeben werden kann.

Nach (5, 6) werde die Wellenfunktion dargestellt durch

$$\Psi = A \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix} + B \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad (14)$$

Die Streuung wird durch eine Transformation von  $\Psi$  nach  $\Psi'$  beschrieben

$$\Psi' = T \Psi \quad (15)$$

die durch die Spinstreumatrix erzeugt wird. Die Elemente der Matrix  $T$  gewinnt man aus der Form der gestreuten Wellenfunktion  $\Psi'$ , die aus den Formeln (7, 8) und (13) hervorgeht

$$\Psi' = A \begin{Bmatrix} f \\ ge^{i\phi} \end{Bmatrix} + B \begin{Bmatrix} -ge^{-i\phi} \\ f \end{Bmatrix}$$

Man erhält

$$T = \begin{pmatrix} f & -ge^{-i\phi} \\ ge^{i\phi} & g \end{pmatrix} = f \cdot \underline{1} - ig \vec{n} \vec{\sigma} \quad , \quad (16)$$

wobei der Einheitsvektor  $\vec{n} = (-\sin \phi, +\cos \phi, 0)$  senkrecht auf der Streuebene steht. Legt man die Wellenzahlvektoren des einfallenden Strahls  $\vec{k}_0$  und des ausfallenden Strahls  $\vec{k}_1$  zugrunde, so schreibt sich der Vektor  $\vec{n}$

$$\vec{n} = \frac{\vec{k}_0 \times \vec{k}_1}{|\vec{k}_0 \times \vec{k}_1|} \quad (17)$$

Der DWQ  $I$  und der Polarisationsvektor  $\vec{P}$  nach einer oder mehreren Streuungen lassen sich jetzt unter der Verwendung der Spinstreumatrix  $T$  und der Spindichtematrix  $\rho$ , die durch

$$\rho = \Psi \Psi^\dagger \quad (18)$$

gegeben ist, bestimmen. Es gelten außerdem die folgenden Beziehungen (siehe Anhang 4)

$$\begin{aligned} I &= \text{tr} \rho \\ \vec{P} &= \frac{\text{tr} \rho \vec{\sigma}}{\text{tr} \rho} \\ \rho &= \frac{1}{2} ( \underline{1} + \vec{P} \vec{\sigma} ) \text{tr} \rho \end{aligned} \quad (19)$$

Nach (14) und (18) läßt sich ein unpolarisierter Strahl der Intensität  $I_0$  durch folgende Spindichtematrix beschreiben

$$\rho_0 = \frac{I_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} I_0 \cdot \underline{1}$$

Nach der ersten Streuung erhält man die Spindichtematrix für den gestreuten Strahl mit (18) und (15)

$$\rho_1 = \Psi' \Psi'^\dagger = T_1 \Psi \Psi^\dagger T_1^\dagger = T_1 \rho_0 T_1^\dagger \quad (20)$$

Das Einsetzen von (17) in (20) liefert

$$\begin{aligned} \rho_1 &= (f_1 - ig_1 \vec{n}_1 \vec{\sigma}) \frac{I_0}{2} \underline{1} (f_1^* + ig_1^* \vec{n}_1 \vec{\sigma}) \\ &= \frac{1}{2} I_0 \{ f_1 f_1^* + g_1 g_1^* + i(f_1 g_1^* - g_1 f_1^*) \vec{n}_1 \vec{\sigma} \} \end{aligned}$$

wegen

$$\begin{aligned} \vec{\sigma}^\dagger &= \vec{\sigma} \\ (\vec{a} \cdot \vec{\sigma})(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) &= (\vec{a} \cdot \vec{b}) + i \vec{\sigma}(\vec{a} \times \vec{b}) \end{aligned}$$

Zweckmäßigerweise führt man folgende Abkürzungen ein

$$\begin{aligned}
 f_1 f_1^* + g_1 g_1^* &= I_1 \\
 f_1 f_1^* - g_1 g_1^* &= C_1 \\
 f_1 g_1^* + g_1 f_1^* &= B_1 \\
 i(f_1 g_1^* - g_1 f_1^*) &= D_1
 \end{aligned} \tag{21}$$

$$\frac{D_1}{I_1} \vec{n}_1 = \vec{P}_1, \quad \frac{D_1}{I_1} = S_1 = |\vec{P}_1|$$

Damit schreibt sich die Spindichtematrix

$$\rho_1 = \frac{1}{2} I_0 I_1 \left\{ \underline{1} + \frac{D_1}{I_1} \vec{n}_1 \vec{\sigma} \right\} = \frac{1}{2} I_0 I_1 \left\{ \underline{1} + \vec{P}_1 \vec{\sigma} \right\} \tag{22}$$

Der DWQ  $I'$  und der Polarisationsvektor  $\vec{P}'$  nach der ersten Streuung ergeben sich zu

$$I' = \text{tr } \rho_1 = I_0 I_1 = I_0 \left\{ |f_1|^2 + |g_1|^2 \right\}, \quad \text{da } \text{tr } \vec{\sigma} = \vec{0} \tag{23}$$

$$I' \vec{P}' = \text{tr } \rho_1 \vec{\sigma} = I_0 I_1 \frac{D_1}{I_1} \vec{n}_1, \quad \text{da } \vec{\sigma}^2 = \underline{1}$$

$$\vec{P}' = \frac{D_1}{I_1} \vec{n}_1 = \frac{i(f_1 g_1^* - g_1 f_1^*)}{|f_1|^2 + |g_1|^2} \vec{n}_1 = \vec{P}_1 \tag{24}$$

Der Polarisationsvektor  $\vec{P}'$  hat die Richtung von  $\vec{n}_1$  und steht daher senkrecht auf der Streuebene wegen (17). Der Polarisationsgrad ist der Betrag des Polarisationsvektors und ist hier durch  $D_1/I_1$  gegeben. Der Quotient  $D/I$  wird Shermanfunktion genannt, weil Sherman als erster Werte von  $S$  für verschiedene Streuwinkel, Energien und Elemente numerisch berechnet hat.

Unterwirft man den nun polarisierten Strahl einer weiteren Streuung, so wird sie durch die Spindichtematrix  $\rho_2$  beschrieben

$$\begin{aligned}
 \rho_2 &= T_2 \rho_1 T_2^* = (f_2 - i g_2 \vec{n}_2 \vec{\sigma}) \frac{1}{2} I_0 I_1 (1 + \vec{P}_1 \vec{\sigma}) (f_2^* + i g_2^* \vec{n}_2 \vec{\sigma}) \\
 &= \frac{1}{2} I_0 I_1 I_2 \left\{ (\underline{1} + \vec{P}_1 \vec{P}_2) + \frac{C_2}{I_2} \vec{P}_1 \vec{\sigma} + \left[ \frac{D_2}{I_2} + \left(1 - \frac{C_2}{I_2}\right) \vec{P}_1 \vec{n}_2 \right] \vec{n}_2 \vec{\sigma} - \frac{B_2}{I_2} (\vec{P}_1 \times \vec{n}_2) \vec{\sigma} \right\} \tag{25}
 \end{aligned}$$

(Zwischenrechnung siehe Anhang 4a).

Durch die Bildung der verschiedenen Spuren nach (19) kann der DWQ  $I''$  und der Polarisationsvektor  $\vec{P}''$  nach der zweiten Streuung bestimmt werden

$$I'' = \text{tr } \rho_2 = \frac{1}{2} I_0 I_1 I_2 (1 + \vec{P}_1 \vec{P}_2) \tag{26}$$

$$\vec{P}'' = \frac{1}{1 + \frac{D_2}{I_2} \vec{P}_1 \vec{n}_2} \left\{ \frac{C_2}{I_2} \vec{P}_1 + \left[ \frac{D_2}{I_2} + \left(1 - \frac{C_2}{I_2}\right) \vec{P}_1 \vec{n}_2 \right] \vec{n}_2 - \frac{B_2}{I_2} \vec{P}_1 \times \vec{n}_2 \right\} \tag{27}$$

Der Polarisationsgrad  $S_1$  läßt sich mit einer Zweifachstreuung experimentell ermitteln und zwar durch das Intensitätsverhältnis

$$\frac{I''(+\theta_2)}{I''(-\theta_2)} = \frac{I''(\theta_2, \varphi_1 - \varphi_2 = 0)}{I''(\theta_2, \varphi_1 - \varphi_2 = \pi)} = \frac{1 + S_1 S_2}{1 - S_1 S_2} \tag{28}$$

$$\text{wegen } \vec{n}_1 \vec{n}_2 = \cos(\varphi_1 - \varphi_2),$$

wenn  $S_2$  bekannt ist.  $S_2$  kann durch eine Messung mit  $\varphi_1 = \varphi_2$ , also  $S_1 = S_2$ , gewonnen werden. Man erkennt aus (26), daß das Intensitätsverhältnis (28) maximal wird, wenn die beiden Vektoren  $\vec{P}_1$  und  $\vec{P}_2$  parallel oder antiparallel stehen, oder anders ausgedrückt, wenn die beiden Streuebene zusammenfallen.

Ist der einfallende Elektronenstrahl longitudinal polarisiert, das heißt, ist  $\vec{P}_1$  parallel zum Impuls  $\hbar \vec{k}_1$ , so ist das Intensitätsverhältnis (28) immer gleich 1, da  $\vec{P}_1 \cdot \vec{P}_2 = 0$ . Durch Streuung kann eine longitudinale Polarisation nicht nachgewiesen werden, sie kann jedoch mit elektromagnetischen Feldern in eine transversale Polarisation übergeführt werden (siehe vor

allem: Farago, 1966; Frauenfelder und Rossi, 1963; Tolhoek, 1956; Tolhoek und de Groot, 1951; Farago, 1962. Weitere Arbeiten: Mendlowitz und Case, 1955; Case, 1957; Corassi, 1957; 1958; Mendlowitz, 1958. Eine ausführliche Diskussion der theoretischen Grundlagen ist in Mott und Massey, 1965; Mott, 1929, 1931, 1932; Farago 1966; Tolhoek, 1956, zu finden).

Eine Dreifachstreuung erlaubt es nun, die Funktionen  $f$  und  $g$  bis auf eine gemeinsame Phase experimentell zu bestimmen. Aus den komplexen Funktionen

$$f = re^{i\alpha}, \quad g = se^{i\beta}$$

lassen sich nach (21) die folgenden reellen Ausdrücke bilden

$$\begin{aligned} I &= r^2 + s^2 \\ C &= r^2 - s^2 \\ B &= 2rs \cos(\alpha - \beta) \\ D &= -2rs \sin(\alpha - \beta) \end{aligned} \tag{29}$$

Die vier Größen sind nicht unabhängig voneinander, denn es gilt

$$B^2 + C^2 + D^2 = I^2 \tag{30}$$

Es lassen sich deshalb nicht alle Größen  $r$ ,  $s$ ,  $\alpha$  und  $\beta$  aus dem Experiment entnehmen. Das Gleichungssystem (29) liefert

$$\operatorname{tg}(\alpha - \beta) = -\frac{D}{B} = -\frac{D}{I} \bigg/ \frac{B}{I} \tag{31}$$

$$\begin{aligned} r &= \frac{1}{2} I \left( 1 + \frac{C}{I} \right) \\ s &= \frac{1}{2} I \left( 1 - \frac{C}{I} \right) \end{aligned} \quad \frac{r}{s} = \frac{1 + \frac{C}{I}}{1 - \frac{C}{I}} \tag{32}$$

Außer den Beträgen von  $f$  und  $g$  ist nur die Phasendifferenz ( $\alpha - \beta$ ), jedoch nicht die absolute Phase dem Experiment zugänglich. Werden im Experiment nur die Größen  $B/I$ ,  $C/I$ ,  $D/I$  bestimmt, so bleibt ein gemeinsamer Faktor in den Beträgen von  $f$  und  $g$  offen. Zur vollständigen Bestimmung von  $f$  und  $g$  (bis auf eine gemeinsame Phase) muß auch der DWQ ( $I$ ) absolut gemessen werden, wegen (32).

Bei einer Zweifachstreuung kann nur  $D/I$  ermittelt werden, eventuell auch  $I$ . Erst die Dreifachstreuung erlaubt es, auch die Größe  $B/I$  und  $C/I$  experimentell festzustellen (die dritte Streuung ist nötig, um  $|P''|$  zu messen). Um dies einzusehen, ist es zweckmäßig, den Polarisationsvektor  $\vec{P}'$  in einem speziellen Koordinatensystem aufzuspannen

$$\vec{P}' = P_n \vec{n}_2 + P_k \vec{k}_1 + P_{kn} \vec{k}_1 \times \vec{n}_2 \tag{33}$$

Wurde der Polarisationsvektor  $\vec{P}'$  durch eine Streuung erzeugt wie vorhin beschrieben, so ist  $P_k = 0$ , da  $\vec{k}_1$  die Impulsrichtung des gestreuten Strahls ist. Es soll jedoch zunächst der allgemeine Fall mit  $P_k \neq 0$  behandelt werden. Das Einsetzen von (33) in (27) ergibt

$$\begin{aligned} \vec{P}'' &= \frac{1}{1 + \frac{D_2}{I_2} P_n} \left\{ \left( P_n + \frac{D_2}{I_2} \right) \vec{n}_2 + \left( \frac{C_2}{I_2} P_k + \frac{B_2}{I_2} P_{kn} \right) \vec{k}_1 \right. \\ &\quad \left. + \left( \frac{C_2}{I_2} P_{kn} - \frac{B_2}{I_2} P_k \right) \vec{k}_1 \times \vec{n}_2 \right\} \end{aligned} \tag{34}$$

Das für die Messung der verschiedenen Komponenten von  $\vec{P}''$  geeignete Dreibein wird durch die Einheitsvektoren  $\vec{n}_2$ ,  $\vec{k}_2$ ,  $\vec{k}_2 \times \vec{n}_2$  dargestellt. Zwischen den Wellenzahlvektoren  $\vec{k}_1$  und  $\vec{k}_2$  gilt folgende Beziehung

$$\vec{k}_1 = \vec{k}_2 \cos \theta_2 + \vec{k}_2 \times \vec{n}_2 \sin \theta_2$$

Damit resultiert für  $\vec{P}''$

$$\vec{P}'' = \frac{1}{1 + \frac{D_2}{I_2} P_n} \left\{ \left( P_n + \frac{D_2}{I_2} \right) \vec{n}_2 \right. \quad (35)$$

$$+ \left( \frac{C_2}{I_2} P_k \cos \theta_2 + \frac{B_2}{I_2} P_{kn} \cos \theta_2 + \frac{B_2}{I_2} P_k \sin \theta_2 - \frac{C_2}{I_2} P_{kn} \sin \theta_2 \right) \vec{k}_2$$

$$\left. + \left( \frac{C_2}{I_2} P_k \sin \theta_2 + \frac{B_2}{I_2} P_{kn} \sin \theta_2 - \frac{B_2}{I_2} P_k \cos \theta_2 + \frac{C_2}{I_2} P_{kn} \cos \theta_2 \right) \vec{k}_2 \times \vec{n}_2 \right\}$$

Da bei Streuung  $P_k = 0$  und außerdem die Komponente von  $\vec{P}''$  in Richtung  $\vec{k}_2$  nicht bestimmbar ist durch Streuung, vereinfacht sich der Ausdruck (35) zu

$$\vec{P}'' = \frac{1}{1 + \frac{D_2}{I_2} P_n} \left\{ \left( P_n + \frac{D_2}{I_2} \right) \vec{n}_2 \right. \quad (36)$$

$$\left. + \left( \frac{B_2}{I_2} \sin \theta_2 + \frac{C_2}{I_2} \cos \theta_2 \right) P_{kn} \vec{k}_2 \times \vec{n}_2 \right\}$$

$P_k$  und  $P_{kn}$  können durch Zweifachstreuexperimente ermittelt werden. Durch die Messung von  $|P''|$  für  $P_{kn} = 0$  kann zunächst  $D_2/I_2$  und dann durch die Messung von  $|P''|$  für  $P \neq 0$  auch

$$\left( \frac{B_2}{I_2} \sin \theta_2 + \frac{C_2}{I_2} \cos \theta_2 \right)$$

bestimmt werden. Hieraus und aus Gleichung (30) können  $C_2/I_2$  und  $B_2/I_2$  gewonnen werden.

### 3.2 Bestimmung der Streuphasen (Integration des Differentialgleichungssystems).

Es werden hier die drei am meisten verwendeten Verfahren für die Integration des Differentialgleichungssystems (9), (10) kurz beschrieben und die Formeln für die Streuphasen  $\delta_K$  angegeben.

#### 3.2.1. Lineare Differentialgleichung 2. Ordnung.

Man geht von der Differentialgleichung (12) aus, die in den meist benutzten Hartree-Einheiten

$$m = e = \hbar = 1, \quad c = \frac{1}{\alpha} \approx 137$$

folgendermaßen aussieht (für Elektronen) (Holzwarth und Meister, 1964)

$$H_K'' + \left( k^2 - \frac{K(K+1)}{r^2} - 2\gamma V + \alpha^2 V^2 - \frac{3}{4} \left( \frac{\eta'}{\eta} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{\eta''}{\eta} - \frac{K}{r} \frac{\eta'}{\eta} \right) H_K = 0 \quad (37)$$

mit 
$$\eta = \frac{1 + \gamma}{\alpha} - \alpha V$$

Für einen Abstand  $r = R$  vom Atomkern, wo das Potential näherungsweise verschwindet, wird die Funktion  $H(r)$  fortgesetzt durch die exakte Lösung der Differentialgleichung mit  $V(r) = 0$

$$h_l''(r) + \left( k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) h_l(r) = 0$$

Sie hat die exakte Lösung

$$h_l(r) = \sqrt{kr} \left\{ J_{l+1/2}(kr) \cos \delta_l - N_{l+1/2}(kr) \sin \delta_l \right\}$$

Bei  $r = R$  müssen die Funktionen  $H(r)$  und  $h(r)$  und deren Ableitungen stetig ineinander übergehen. Aus diesen beiden Bedingungen ergibt sich die Bestimmungsgleichung (Weiß, Private Mitteilung) für die Streuphase  $\delta_K$ :

$$\operatorname{tg} \delta_K = \frac{\sqrt{kR} J_{l+1/2} - \frac{H_K}{H_K'} \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{k}{R}} J_{l+1/2} - \sqrt{kR} J_{l+3/2} + \sqrt{\frac{k}{R}} \left( l + \frac{1}{2} \right) J_{l+1/2} \right\}}{(-1)^{l+1} \sqrt{kR} J_{-l-1/2} + (-1)^l \frac{H_K}{H_K'} \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{k}{R}} J_{-l-1/2} + \sqrt{kR} J_{-l-3/2} + \sqrt{\frac{k}{R}} \left( l + \frac{1}{2} \right) J_{-l-1/2} \right\}} \quad (38)$$

für 
$$K = \begin{Bmatrix} \ell \\ -\ell-1 \end{Bmatrix}$$

Die Funktionen  $H(r)$  lassen sich numerisch z.B. nach einem Runge-Katta-Verfahren auf einer Rechenmaschine bestimmen. Die Besselfunktionen  $J(x)$  und die Neumannschen Funktionen  $N(x)$  sind tabelliert (Jahnke und Emde, 1945). Damit sind die Streuphasen bestimmt.

### 3.2.2. Nichtlineare Differentialgleichung 1. Ordnung

Durch die Transformation (Lin u.a., 1963)

$$\begin{aligned} F_K(r) &= A_K(r) \frac{\sin \phi_K(r)}{r} \\ G_K(r) &= A_K(r) \frac{\cos \phi_K(r)}{r} \end{aligned} \quad (39)$$

gehen die Differentialgleichungen (9), (10) in die beiden nichtlinearen Differentialgleichungen 1. Ordnung über, wobei man durch Addieren bzw. Subtrahieren die beiden Differentialgleichungen zum Teil entkoppeln kann:

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_K}{dr} &= \frac{K}{r} \sin 2\phi_K + \frac{W + eV}{\hbar c} - \frac{mc}{\hbar} \cos 2\phi_K \\ \frac{1}{A_K} \cdot \frac{dA_K}{dr} &= -\frac{K}{r} \cos 2\phi_K - \frac{mc}{\hbar} \sin 2\phi_K \end{aligned} \quad (40)$$

Im Gegensatz zu 3.2.1 werden hier meist die natürlichen Einheiten benutzt:

$$\hbar = c = m = 1 \quad \text{und} \quad eV = -V'$$

Die Differentialgleichungen (40) erhalten dann die Gestalt

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_K}{dr} &= \frac{K}{r} \sin 2\phi_K + W - V' - \cos 2\phi_K \\ \frac{1}{A_K} \frac{dA_K}{dr} &= -\frac{K}{r} \cos 2\phi_K - \sin 2\phi_K \end{aligned} \quad (41)$$

Auch hier muß für  $r = R$ , wo  $V(R) \approx 0$  ist, die Lösung  $G_K$  an die exakte Lösung der Differentialgleichung (11) mit  $V(r) = 0$

$$g_\ell'' + \frac{2}{r} g_\ell' + \left( k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) g_\ell = 0$$

angepaßt werden; ebenso die Ableitung. Für die  $g_\ell$  erhält man die Lösung

$$g_\ell = j_\ell(kr) \cos \delta_\ell - n_\ell(kr) \sin \delta_\ell$$

$$\begin{aligned} j_\ell(x) &= x^{-1/2} J_{\ell+1/2}(x) \\ n_\ell(x) &= x^{-1/2} N_{\ell+1/2}(x) \end{aligned} \quad \text{mit} \quad (\text{Abramovitz und Stegun, 1965})$$

Das stetige Anschließen von  $G_\ell$  und  $g_\ell$  als auch von  $G_\ell'$  und  $g_\ell'$  bei  $r = R$  liefert die Streuphasen

$$\text{tg } \delta_K = \frac{\frac{G_K'}{G_K} j_\ell(kR) - k j_\ell'(kR)}{\frac{G_K'}{G_K} n_\ell(kR) - k n_\ell'(kR)} \quad (42)$$

Aus der Differentialgleichung (9) und den Transformationsformeln (39) gewinnt man das Verhältnis

$$\frac{G'_K}{G_K} = - (W + 1) \frac{F'_K}{G_K} - \frac{1 + K}{r} = - (W + 1) \operatorname{tg} \varphi_K - \frac{1 + K}{r} \quad (43)$$

Einsetzen von (43) in (42) liefert die Formel für die Streuphasen (Bunyan und Schonfelder, 1965)

$$\operatorname{tg} \delta_K = \frac{k j_{\ell+1}(kR) - j_{\ell}(kR) \left\{ (W+1) \operatorname{tg} \varphi_K + (1+\ell+K)/r \right\}}{k n_{\ell+1}(kR) - n_{\ell}(kR) \left\{ (W+1) \operatorname{tg} \varphi_K + (1+\ell+K)/r \right\}} \quad (44)$$

Zur Bestimmung der Streuphasen muß also nur die Differentialgleichung (40) gelöst werden, was wiederum numerisch erfolgt.

Die numerische Integration der Differentialgleichung (39) erfordert einen geringeren Zeitaufwand als die der Differentialgleichung (37). Es wird deshalb die Methode 3.2.2 zur Berechnung der Streuphasen vorgezogen.

### 3.2.3 Potenzreihen-Methode (Bühning, 1965; Bühning, 1965).

Sie unterscheidet sich von den beiden anderen Verfahren dadurch, daß das Potential  $V(r)$  in Form einer Potenzreihe angenommen wird. Dadurch wird ein Potenzreihenansatz auch für die Lösungsfunktionen möglich und die numerische Integration der Differentialgleichungen wird ersetzt durch die Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten. Ausgangspunkt sind wieder die beiden gekoppelten Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} - \left\{ W - V(r) + 1 \right\} F_K + \frac{dG_K}{dr} + \frac{1 + K}{r} G_K &= 0 \\ \left\{ W - V(r) - 1 \right\} G_K + \frac{dF_K}{dr} + \frac{1 - K}{r} F_K &= 0 \end{aligned} \quad (45)$$

(in natürlichen Einheiten; außerdem ist hier gegenüber (9), (10) die Funktion  $F_K$  durch ihr negatives ersetzt). Es wird angenommen, daß das Potential  $V(r)$  in drei aneinander anschließenden Bereichen (inneres, mittleres und äußeres Gebiet) folgendermaßen dargestellt werden kann:

$$\begin{aligned} V^I(r) &= \sum_{m=-1}^{\infty} v_m^I r^m && \text{für } 0 \leq r \leq \rho \\ V^M(r) &= \frac{1}{r} \sum_{m=0}^{\infty} v_m^M(y) \cdot (r-y)^m && \text{für } \rho \leq r \leq R, \rho \leq y \leq R \\ V^E(r) &= v_{-1}^E r^{-1} && \text{für } R \leq r \leq \infty \end{aligned} \quad (46)$$

wobei  $V(r)$  und  $dV/dr$  bei  $r = \rho$  und  $r = R$  stetig sein müssen. Für die Lösungen  $F_{\ell}$  und  $G_{\ell}$  der Differentialgleichungen (45) in den drei Bereichen I, M und E sind die folgenden Potenzreihenansätze geeignet:

$$(I) \quad \begin{aligned} F^I(r) \\ G^I(r) \end{aligned} = \alpha r^{-1+s} \left\{ \begin{array}{l} \sum_{n=0}^{\infty} a_n^I r^n \\ \sum_{n=0}^{\infty} b_n^I r^n \end{array} \right\}$$

$$(M) \quad \begin{aligned} F^M(r) \\ G^M(r) \end{aligned} = \frac{1}{r^{-1}} \left\{ \begin{array}{l} \sum_{n=0}^{\infty} a_n^M (r-y)^n \\ \sum_{n=0}^{\infty} b_n^M (r-y)^n \end{array} \right\}$$

$$\begin{cases} F^{EI}(r) \\ G^{EI}(r) \end{cases} = \frac{1}{r} \cos x \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} A_n^I r^{-n} \\ \sum_{n=0}^{\infty} B_n^I r^{-n} \end{cases} + \frac{1}{r} \sin x \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{II} r^{-n} \\ \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{II} r^{-n} \end{cases}$$

$$\begin{cases} F^{EII}(r) \\ G^{EII}(r) \end{cases} = \frac{1}{r} \cos x \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{II} r^{-n} \\ \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{II} r^{-n} \end{cases} - \frac{1}{r} \sin x \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} A_n^I r^{-n} \\ \sum_{n=0}^{\infty} B_n^I r^{-n} \end{cases}$$

mit

$$x = pr - v_{-1} \left( \frac{W}{p} \right) \cdot n \cdot 2pr - \frac{1}{2} \pi \left[ \nu(k) + 1 \right]$$

$$W^2 = p^2 + 1$$

Die Konstanten a, b, A und B hängen von k, W, K und den Entwicklungskoeffizienten des Potentials ab.

Die Streuphasen können nun bestimmt werden, indem die Lösung des inneren und mittleren Gebietes bei  $r = R$  an die zwei linear unabhängigen Lösungen des äußeren Gebietes angepaßt werden. Das Ergebnis ist

$$\operatorname{tg} \delta = - \frac{G^M(R) \cdot F^{EI}(R) - F^M(R) \cdot G^{EI}(R)}{G^M(R) \cdot F^{EII}(R) - F^M(R) \cdot G^{EII}(R)} \quad (47)$$

Wegen der Rekursionsformeln für die diversen Entwicklungskoeffizienten sei auf die Arbeit von Bühring (1965) verwiesen. Die Methode 3.2.3. hat den Vorteil, daß die Fehler vermieden werden, die durch ein nur punktweise gegebenes Potential hervorgerufen werden können. Sie gestattet auch ein besseres Abschätzen der Genauigkeit der Rechnungen.

### 3.2.4. Coulomb - Potential

Im Fall des Coulomb-Potentials sollen nur kurz die Ergebnisse angegeben werden, da eine Vernachlässigung der Abschirmung nur bei hohen Elektronenenergien (über mehreren 100 keV) zu guten Resultaten führt.

Man erhält nicht für die Streuphasen selbst, sondern nur für die Exponentialfunktionen der Streuphasen geschlossene Formeln (Mott und Massey, 1965; Gluckstern und Lin, 1964):

$$\exp(2i\delta_{\ell-1}) = - \left[ 1 - iq(1-\beta^2)^{1/2} \right] C_{\ell} \quad (48)$$

$$\exp(2i\delta_{\ell-1}) = - \left[ 1 - iq(1-\beta^2)^{1/2} \right] C_{\ell}$$

$$\text{mit } C_{\ell} = - \exp(i\pi[\ell - \rho_{\ell}]) \cdot \frac{\Gamma(\rho_{\ell} - iq)}{\Gamma(\rho_{\ell} + 1 + iq)}$$

$$\text{und } \beta = \frac{v}{c}, \quad \rho_{\ell} = (\ell^2 - \alpha^2)^{1/2}, \quad \alpha = \frac{Z}{137}, \quad q = \frac{\alpha}{\beta}$$

Damit sind zwar die Ausdrücke mit den Streuphasen numerisch bestimmbar, jedoch erfordert das Aufsummieren der Reihen für die Funktionen f und g Vorsicht.

### 3.3. Die Aufsummierung der Reihen.

Wie aus (13) zu entnehmen ist, sind die Funktionen f und g aus Summen über Streuphasen und Legendre-Polynome gebildet. Diese Summen haben den Nachteil, daß sie bei großen Streuwinkeln für eine numerische Aufsummierung der Reihe ungenauer werden, und daß man für hohe Elektronenenergien sehr viele Glieder der Reihe aufsummieren muß. Dann müssen sehr viele Streuphasen bestimmt werden, was eine mit  $\ell$  stark ansteigende lange Rechenmaschinenzeit erfordert.

### 3.3.1. Höhere Genauigkeit bei großen und kleinen Streuwinkeln.

Eine höhere Genauigkeit bei Streuwinkeln nahe der Rückstreuung läßt sich durch die Einführung der Funktionen (Gluckstern und Lin, 1964; Bühring, 1968)  $E(\theta)$  und  $H(\theta)$  erreichen.

$$E(\theta) = \frac{1}{4I} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left( e^{2i\delta_{\ell-1}} + e^{2i\delta_{-\ell-1}} - 2 \right) L_{\ell}^{+}(\cos \theta)$$

$$H(\theta) = \frac{1}{4I} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left( e^{2i\delta_{\ell-1}} - e^{2i\delta_{-\ell-1}} \right) L_{\ell}^{-}(\cos \theta)$$
(49)

wobei

$$L_{\ell}^{\pm}(\cos \theta) = \ell \left\{ P_{\ell}(\cos \theta) \pm P_{\ell-1}(\cos \theta) \right\}$$
(50)

Die Funktionen  $f$  und  $g$  können durch die Funktionen  $E$  und  $H$  ausgedrückt werden (siehe Anhang 5):

$$k f(\theta) = E(\theta) - H(\theta)$$

$$k g(\theta) = E(\theta) \cdot \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} + H(\theta) \cdot \operatorname{cotg} \frac{\theta}{2}$$
(51)

Mit diesen Formeln (51) erhält man für den DWQ  $I$  und die Sherman-Funktion  $S$

$$I(\theta) = \frac{1}{k^2} \left\{ |E|^2 \left( \cos \frac{\theta}{2} \right)^{-2} + |H|^2 \left( \sin \frac{\theta}{2} \right)^{-2} \right\}$$
(52)

$$S(\theta) = 1 \frac{EH^* - HE^*}{|E|^2 \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} + |H|^2 \operatorname{cotg} \frac{\theta}{2}}$$

Der Vorteil der Funktionen  $L_n$  liegt darin, daß  $L_n^{\pm}(-1)$  für alle  $n$  verschwindet (das heißt, jeder Summand in  $E$  verschwindet getrennt), entsprechend  $L_n^{-}(+1)$ , während für die Legendre-Polynome  $P_n(-1) = (-1)^n$  gilt.

Die Funktionen  $L_{\ell}^{\pm}$  erfüllen die folgende Rekursionsformel

$$L_{\ell+1}^{\pm}(x) = \ell^{-1} \left\{ (2\ell+1) x L_{\ell}^{\pm} - (\ell+1) L_{\ell-1}^{\pm} - (1^{\pm}x) P_{\ell-1} \right\}$$
(53)

### 3.3.2. Bessere Konvergenz.

Mit der Einführung der Funktionen  $E$  und  $H$  erreicht man zwar genauere Werte für große Streuwinkel, die Konvergenz der Reihen für  $E$  und  $H$  ist jedoch nicht gut; man benötigt bei hohen Energien ca.  $10^2$  bis  $10^3$  Glieder! Eine wesentlich schnellere Konvergenz erreicht man durch eine Transformation (Yennie u.a., 1954), die auf jede Funktion, die sich als Summe von Legendre-Polynomen darstellen läßt

$$h(\cos \theta) = \sum_{\ell} b_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta),$$
(54)

angewendet werden kann. In dem hier interessierenden Fall handelt es sich um eine Funktion der Art

$$Y(x) = \sum_{\ell=1}^{\infty} a_{\ell}^{(M)} L_{\ell}^{\pm}(x)$$
(55)

und die dazugehörige Transformation ist

$$(1-x)^M \cdot Y(x) = \sum_{\ell=1}^{\infty} a_{\ell}^{(M)} L_{\ell}^{\pm}(x)$$
(56)

mit den neuen Koeffizienten  $a_{\ell}^{(M)}$ , für die die folgende Rekursionsformel (Bühring, 1968) gilt (Beweis siehe Anhang 6).

$$a_t^{(M)} = \left(1 \mp \frac{1}{(2t-1)(2t+1)}\right) a_t^{(M-1)} - \frac{t-1}{2t-1} a_{t-1}^{(M-1)} - \frac{t+1}{2t+1} a_{t+1}^{(M-1)} \quad (57)$$

Die neue Reihe (56) konvergiert beträchtlich schneller als (55). Es existiert jedoch infolge der Fehler beim Aufsummieren der Reihe ein optimales M, so daß ein noch weiteres Anwenden der Transformation (56) die Konvergenz der Reihe wieder verschlechtert. Die optimalen Werte von M liegen im allgemeinen zwischen 1 und 5, wobei man für größere Streuwinkel größere Werte von M benötigt als für kleinere Streuwinkel. Man kommt dann mit ca. 10 bis 50 Summanden in der Reihe (56) aus, je nach Streuwinkel und geforderter Genauigkeit. Die Transformation (56) bringt vor allem bei hohen Energien die größte Zeitersparnis.

Man kann die Transformation auch direkt auf die Funktionen f und g anwenden, die die Gestalt von (54) haben. Mit der Transformation

$$(1-x)^m h(x) = \sum_t b_t^{(m)} P_t(x) \quad ,$$

wobei h für f und g steht, und den zugehörigen Koeffizienten (Lin, 1964)

$$b_t^{(m+1)} = b_t^{(m)} - \frac{t+1}{2t+3} b_{t+1}^{(m)} - \frac{t}{2t-1} b_{t-1}^{(m)} \quad (58)$$

erreicht man wieder eine bessere Konvergenz für h(x); denn für große t gilt

$$a_t^{(m+1)} = O\left(\frac{a_t^{(m)}}{t^2}\right)$$

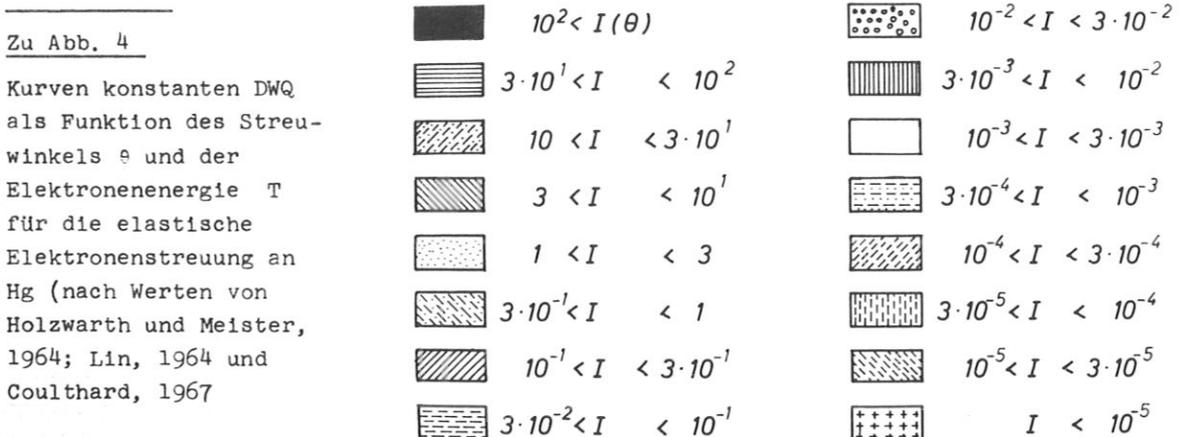
Hier ist es jedoch angebracht, noch eine Euler-Transformation anzuwenden (Lin, 1964), um die alternierende Reihe h(x) aufzusummieren.

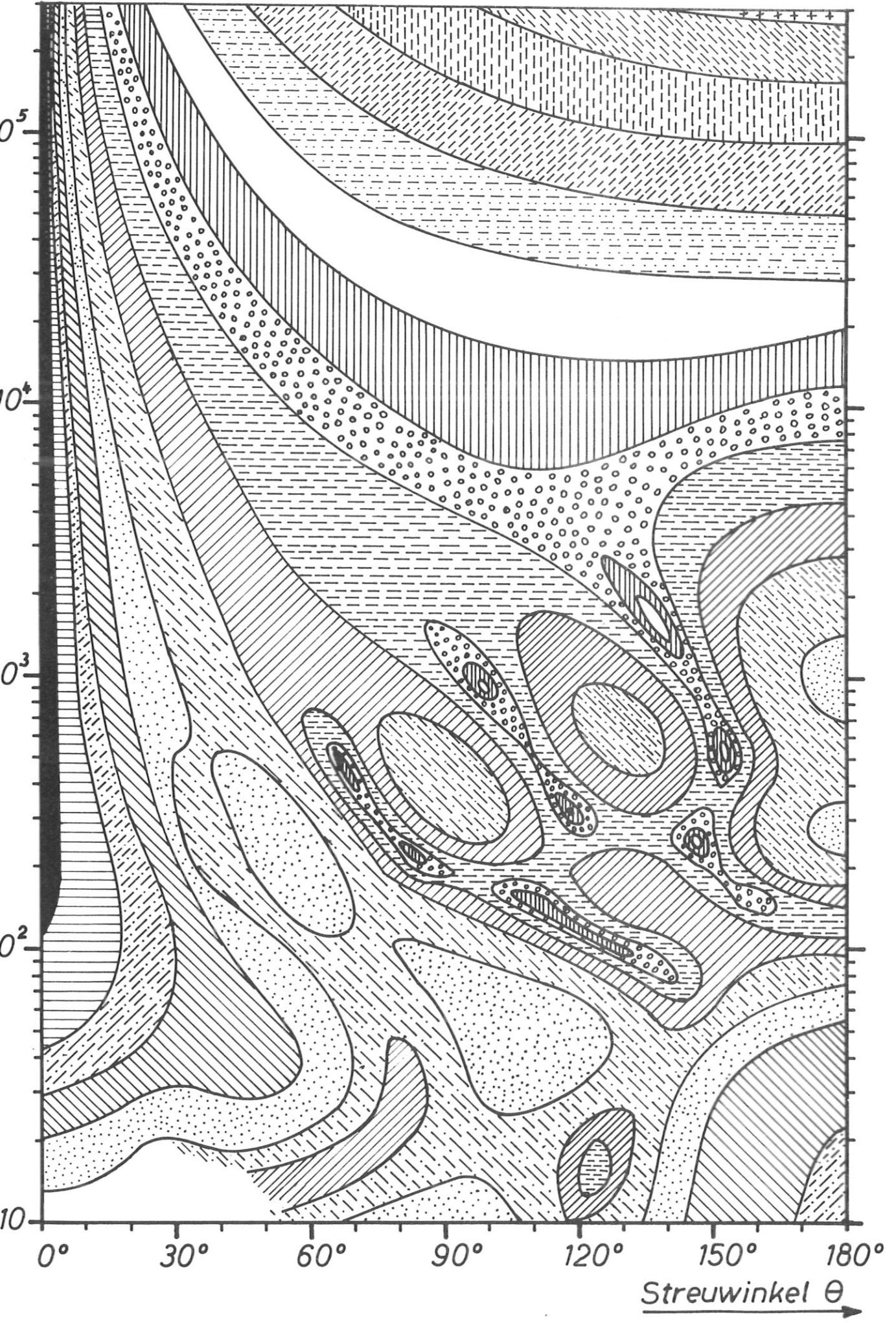
### 3.4. Theoretische Ergebnisse.

#### 3.4.1. Der differentielle Wirkungsquerschnitt.

##### 3.4.1.1. Allgemeiner Überblick.

Berechnungen des DWQ für die elastische Elektronenstreuung gibt es in beträchtlicher Anzahl; es soll hier nur auf die neueren Arbeiten eingegangen werden. Die meisten Rechnungen wurden für Atome mit großer Kernladungszahl ausgeführt. Einen Überblick über den gesamten Energiebereich von 10 eV bis  $3 \cdot 10^5$  eV zeigt die Abb.4 für Hg. Aufgetragen sind Kurven mit konstantem DWQ als Funktion der Energie und des Streuwinkels. Der DWQ als Funktion des Streuwinkels ist aus Abb.4 zu entnehmen, indem ein horizontaler Schnitt gelegt wird. Man erkennt, daß für Energien oberhalb 20 keV der DWQ als Funktion des Streuwinkels eine monoton fallende Funktion ist. Bei 10 keV zeigt die Winkelverteilung ein Minimum bei  $105^\circ$ , während mit abnehmender Energie die Winkelverteilungen eine zunehmende Beugungsstruktur bekommen, die unterhalb 100 eV wieder schwächer wird. Außerdem ist ersichtlich, daß bei Energien unter 100 eV die Rückstreuung stark ansteigt. Der DWQ als Funktion der Energie bei festem Streuwinkel zeigt bei kleiner Energie auch eine Beugungsstruktur, um oberhalb einiger keV in einen monoton abfallenden Verlauf überzugehen. Qualitativ ähnliche Kurvenscharen erhält man für andere Kernladungszahlen Z.





3.4.1.2. Energien oberhalb 10 keV:

Der DWQ zeigt sowohl mit steigender Energie als auch mit zunehmendem Streuwinkel eine monoton fallende Tendenz. Es sind hier Ergebnisse von Sherman (1956) und Lin (1964) wiedergegeben. In Abb.5 ist die Energieabhängigkeit des DWQ für vier verschiedene Atome angegeben, die den zu betrachtenden Kernladungsbereich  $Z$  gut überstreichen.

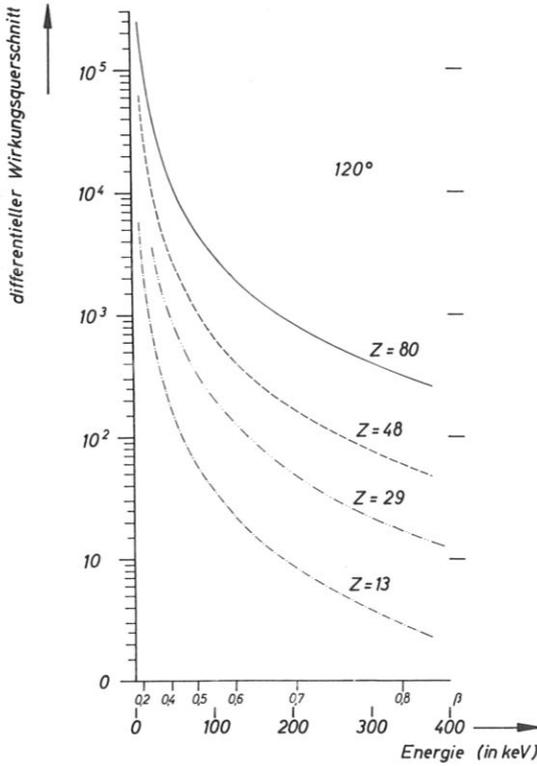


Abb.5 Energieabhängigkeit des DWQ für vier verschiedene Kernladungszahlen  $Z$  (13, 29, 48, 80) bei einem festen Streuwinkel von  $120^\circ$  nach Rechnungen von Sherman (1956) und Lin (1964)

Man entnimmt, daß die Streuung an Al um ca. 2 Zehnerpotenzen geringer ist als an Hg bei einem Streuwinkel von  $120^\circ$ , und daß der DWQ stark zu kleinen Energien hin ansteigt. In der Abb. 6 ist der DWQ als Funktion des Streuwinkels für verschiedene Energien und Kernladungszahlen aufgetragen. Man erkennt das starke Ansteigen des DWQ zu kleinen Streuwinkeln hin um ca. 5 Zehnerpotenzen.

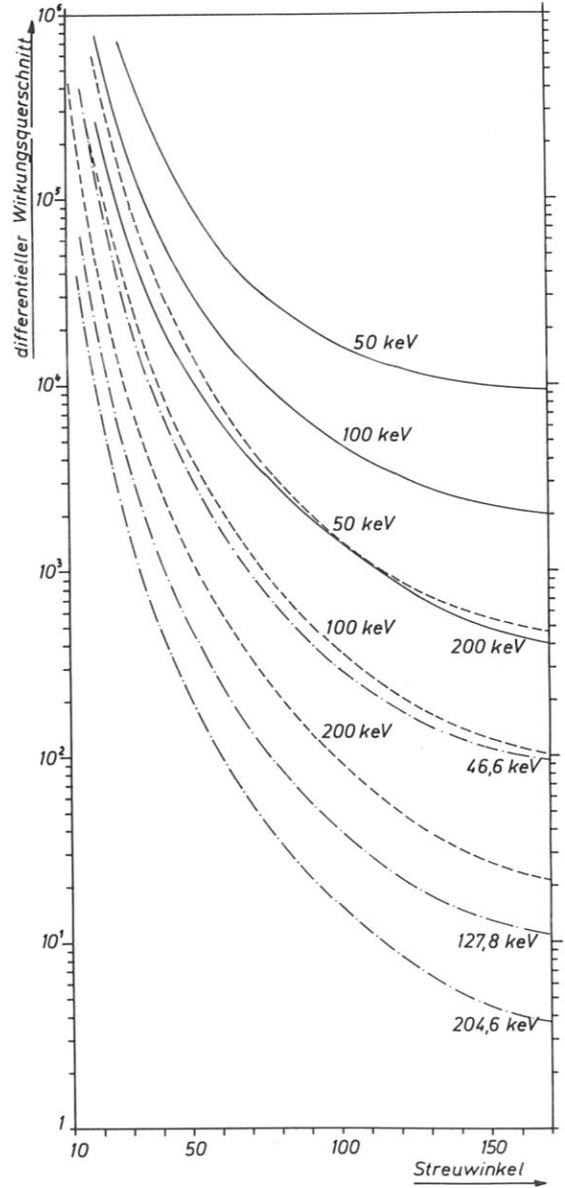


Abb.6 Winkelabhängigkeit des DWQ für drei verschiedene Kernladungszahlen  $Z$  (13, 29, 79) und für verschiedene Elektronenenergien nach Rechnungen von Sherman (1956) und Lin (1964).

- Au ( $Z = 79$ )
- - - - - Cu ( $Z = 29$ )
- . . . . - Al ( $Z = 13$ )

Für folgende Kernladungszahlen liegen Rechnungen vor:

Z	Literatur
6	Spencer und Doggett, 1956; Browne und Bauer, 1966.
13	Sherman, 1956; Spencer und Doggett, 1956; Sherman und Nelson, 1959; Zeitler und Olsen, 1966.
29	Lin, 1964; Spencer und Doggett, 1956; Robinson, 1962; Browne und Bauer, 1966.
48	Sherman, 1956.
50	Spencer und Doggett, 1956; Browne und Bauer, 1966.
79	Lin, 1964; Lin u.a., 1963; Massey und Mohr, 1941; Mohr und Tassie, 1954; Sherman und Nelson, 1959; Zeitler und Olsen, 1964; Holzwarth und Meister, 1964.
80	Bartlett und Watson, 1940; Bartlett und Watson, 1939; Bartlett und Welton, 1941; Gunnersen, 1952; Bühring, 1968; Holzwarth und Meister, 1964; Lin u.a., 1963.
82	Spencer und Doggett, 1956; Browne und Bauer, 1966.
92	Yadav, 1955; Spencer und Doggett, 1956; Browne und Bauer, 1966.

Näherungsformeln für kleine Z werden von verschiedenen Autoren angegeben (Mott und Massey, 1965; McKinley und Feshbach, 1948; Dalitz, 1951). Einen Überblick über die verschiedenen Streuformeln gibt der zusammenfassende Bericht von Motz, Olsen und Koch, 1964.

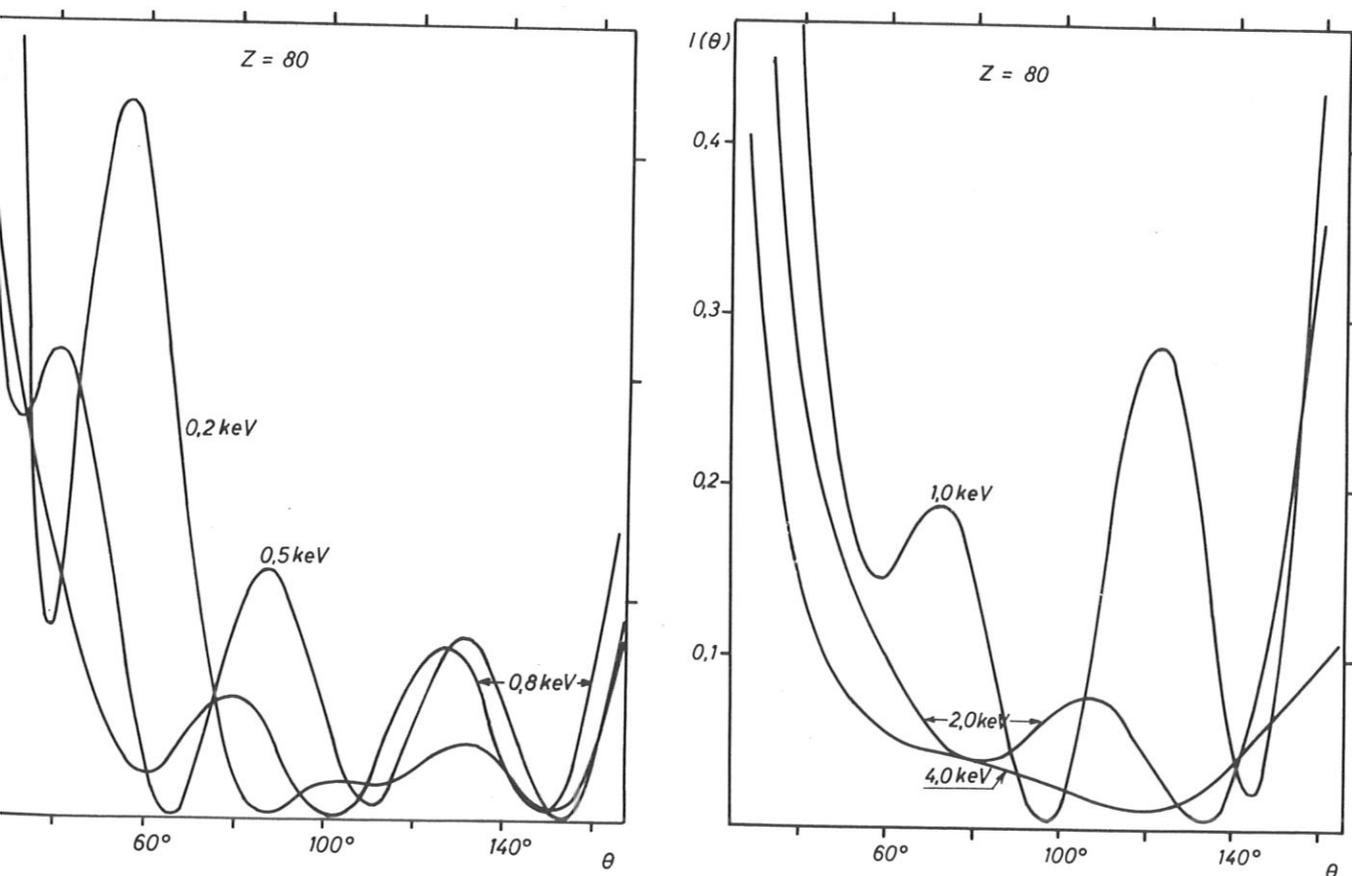


Abb.7 Winkelverteilungen für die elastische Elektronenstreuung an Hg bei Energien zwischen 200 eV und 4,0 keV. (Nach Werten von Holzwarth und Meister, 1964)

3.4.1.3. Energien unterhalb 10 keV

Rechnungen existieren hauptsächlich für Hg. Wie schon näherungsweise aus Abb.4 zu entnehmen war, tritt mit fallender Elektronenenergie eine zunehmende Beugungsstruktur auf, die für Hg zwischen 2000 eV und 100 eV am deutlichsten ausgeprägt ist. Winkelverteilungen in diesem Energiebereich gibt die Abb.7 wieder (nach Werten von Holzwarth und Meister, 1964). Hervorragende Übereinstimmung mit den Werten von Holzwarth und Meister zeigen die Rechnungen von Bunyan (1963, 1965) und Schonfelder (1966). Von Schonfelder existieren auch Rechnungen für Bi (siehe Abb.31 und Haug, 1968). Eine weitere Abbildung (Abb.8) zeigt, wie sich die Minima bzw. Maxima verschieben, wenn die Kernladungszahl Z geändert wird. Eine Erhöhung von Z um zwei Einheiten bewirkt eine Verschiebung der Maxima bzw. Minima zu größeren Streuwinkeln hin um ca.  $2^\circ$ . Einige Angaben findet man auch für Ar, J, Kr bei Yates und Strand (1968), die zeigen, daß für Ar eine Beugungsstruktur des DWQ erst unterhalb 100 eV auftritt. Allgemein läßt sich sagen, daß sich der Bereich der Beugungsstrukturen im DWQ mit fallender Kernladungszahl verkleinert und sich zu kleineren Energien hin verschiebt.

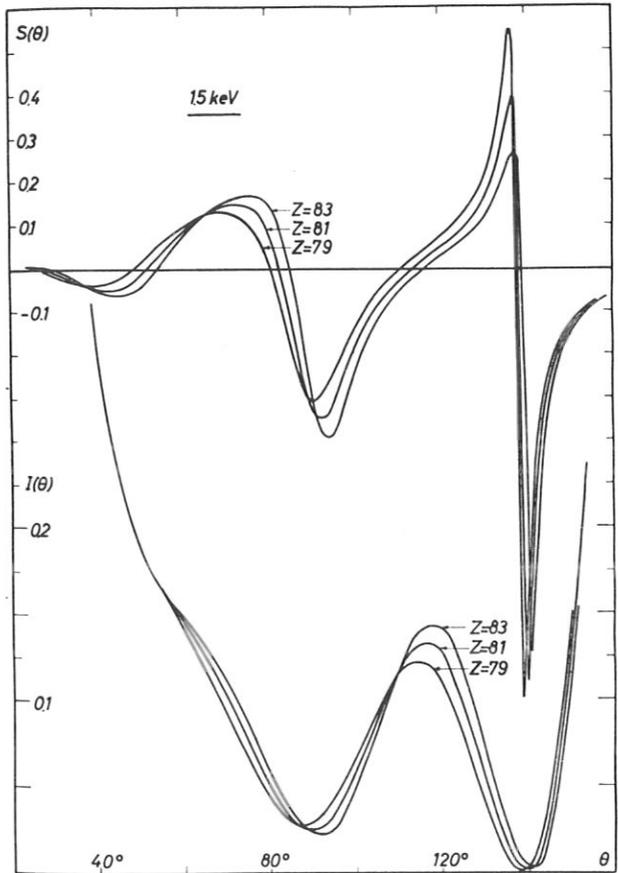


Abb.8 Abhängigkeit des DWQ der elastischen Elektronenstreuung als Funktion der Kernladungszahl Z bei 1,5 keV nach Holzwarth und Meister (1964)

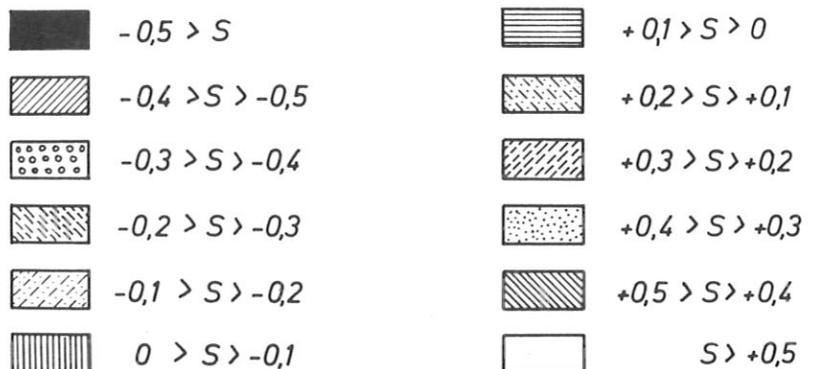
3.4.2. Die Shermanfunktion.

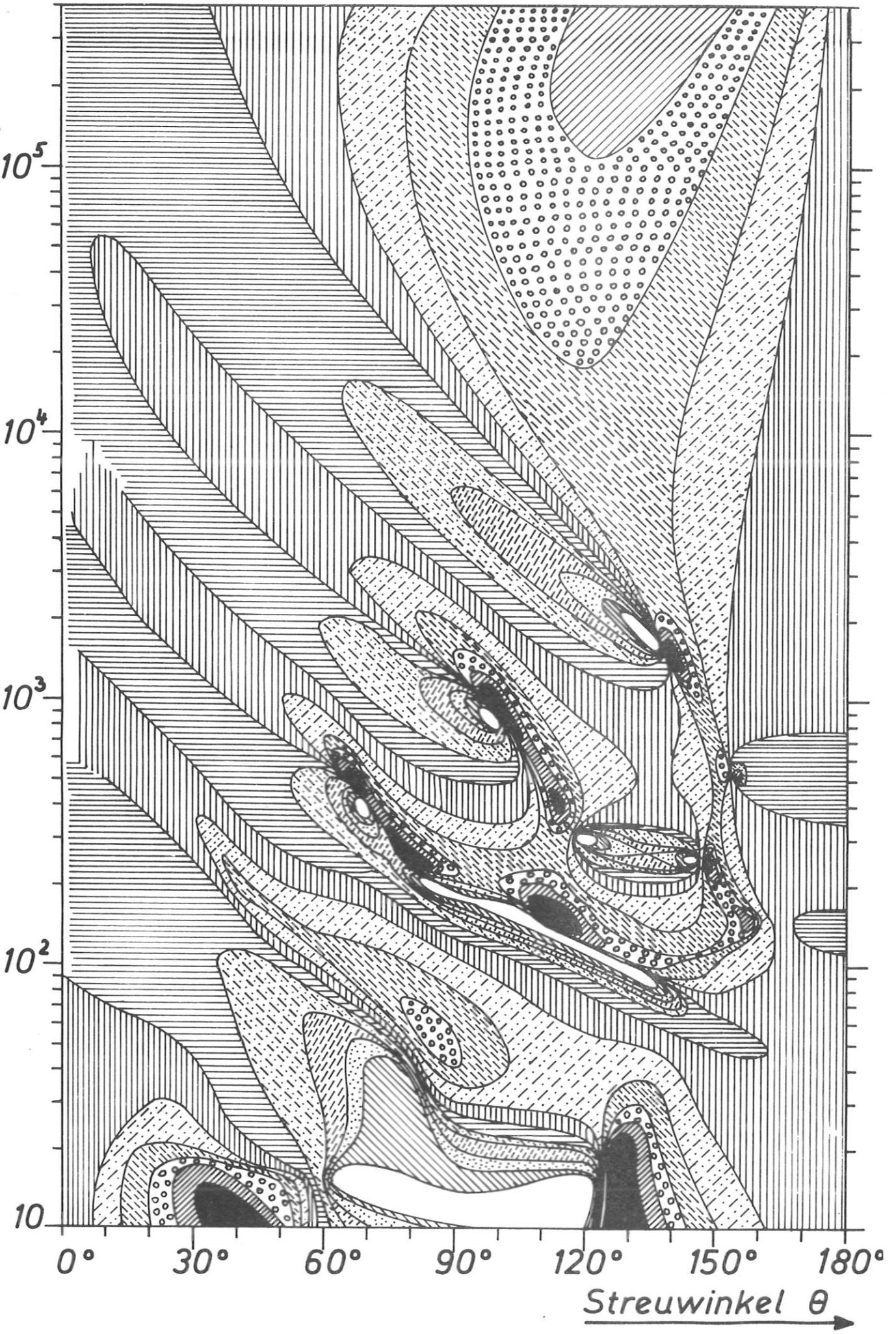
3.4.2.1. Allgemeiner Überblick

Analog zu Abb.4 sind hier in Abb.9 konstante Shermanfunktionswerte als Funktion der Energie und des Streuwinkels aufgetragen für Hg und einen Energiebereich von 10 eV bis 400 keV. Es läßt sich in dieser Abbildung schnell überblicken, wo positive und wo negative Werte der Shermanfunktion auftreten. Man erkennt außerdem, daß die Shermanfunktion bei Energien über 60 keV nur einen Nulldurchgang hat bei Streuwinkeln unter  $60^\circ$ . Es tritt in diesem Energiebereich ein tiefes Minimum auf von ca.  $-0,4$  in der Umgebung von  $120^\circ$ . Geht man zu niedrigeren Energien über, so werden die Nulldurchgänge von S häufiger, und es treten nahe der Null-Linie hohe positive und negative Spitzen der Shermanfunktion auf. Diese hohen absoluten

Zu Abb.9

Kurven konstanter Shermanfunktion (Spinpolarisation) als Funktion des Streuwinkels  $\theta$  und der Elektronenenergie  $T$  für die elastische Elektronenstreuung an Hg (nach Werten von Holzwarth und Meister, 1964; Lin, 1964 und Coulthard, 1967).





Shermanfunktionswerte treten dort auf, wo der DWQ ein Minimum hat, wie ein Vergleich mit Abb.4 zeigt. Man erkennt weiterhin, daß der Nulldurchgang in der Nähe der Spitzen von S sehr steil sein muß, d.h., daß hohe positive Werte von S nur wenige Grade von hohen negativen Werten von S entfernt liegen. Dieses charakteristische Verhalten von S tritt in dem Bereich auf, in dem der DWQ die stark ausgeprägte Beugungsstruktur besitzt. Für andere Kernladungszahlen Z wird das Bild qualitativ gleich bleiben, jedoch sich die Gestalt der Kurven ändern, und der Bereich der Beugungsstruktur mit abnehmenden Z kleiner werden und zu kleineren Energien hin verschoben werden. Für die Kurven unter 50 eV sind starke experimentelle Abweichungen zu erwarten, da für diese Rechnungen ein Austausch und eine Polarisation der Elektronenhülle nicht berücksichtigt wurde.

### 3.4.2.2. Energien über 10 keV.

Die erste Berechnung von Shermanfunktionswerten führte Mott (1929), (1932) für Au (Z = 79) durch. Inzwischen liegen viele Berechnungen von S vor, die ausführlichsten Tabellen stammen von Sherman (1956), Lin (1964), Holzwarth und Meister (1964) sowie Bühring (1968).

Die Funktion S wurde in diesem Energiebereich nur für die Atome Al (Z = 13) (Sherman, 1956; Sherman und Nelson, 1959), Cu (Z = 29) (Lin, 1964), Cd (Z = 48) (Sherman, 1956), Au (Z = 79) (Mott, 1932; Lin, 1964; Holzwarth und Meister, 1964; Mohr und Tassie, 1954; Lin u.a., 1963; Massey und Mohr, 1941; Sherman und Nelson, 1959) und Hg (Z = 80) (Sherman, 1956; Lin u.a., 1963; Bartlett und Welton, 1941; Holzwarth und Meister, 1964); Bühring, 1968) numerisch bestimmt. Die meisten Berechnungen wurden für Au und Hg durchgeführt, da für hohe Z die Shermanfunktion hohe Werte (absolut) annimmt und für diese Atome geeignete Potentiale vorlagen. Außerdem waren diese Atome vom experimentellen Standpunkt am interessantesten. Die Abb.10 zeigt das typische Verhalten von S als Funktion des Streuwinkels für Z = 79 und 29. Man erkennt sofort die starke Abhängigkeit von Z. Das Minimum von S ist für Z = 79 ca. 4mal tiefer als für Z = 29; für Z = 13 (Al) ist  $S < 0,05$ . Weiterhin ist den Kurven zu entnehmen, daß das Minimum von S sich mit steigender Energie zu größeren Streuwinkeln verschiebt, und die Tiefe des Minimums mit steigender Energie größer wird.

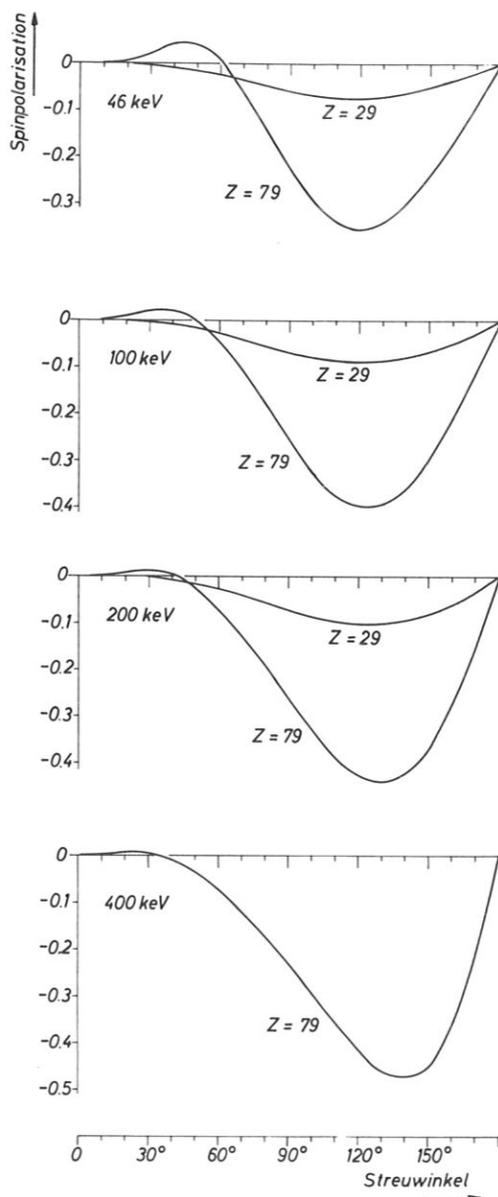


Abb.10 Die Shermanfunktion als Funktion des Streuwinkels für vier verschiedene Elektronenenergien (46, 100, 200, 400 keV) und zwei Kernladungszahlen Z (Cu, Au) nach (Lin, 1964).

### 3.4.2.3. Energien unter 10 keV

Zunächst wurden bei diesen Energien gar keine wesentlichen Polarisations-effekte erwartet, da für  $v/c \rightarrow 0$  die Funktion  $g(\theta) \rightarrow 0$  geht und somit

$$S = i \frac{fg^* - gf^*}{|f|^2 + |g|^2}$$

verschwinden sollte. Das ist aber nicht der Fall, da für endliche Geschwindigkeiten  $v$  die Funktion  $g(\theta)$  nicht Null, sondern nur klein wird. Polarisierungseffekte sollte man also gerade dort erwarten, wo  $|f|^2$  ein Minimum hat. Das Auftreten von Polarisierungseffekten in diesem Energiebereich wurde zuerst von Massey und Mohr 1941 gefunden. Ausführliche theoretische Daten wurden erst in den 60er Jahren veröffentlicht, vor allem für Au (Mohr und Tassie, 1954; Holzwarth und Meister, 1964; Massey und Mohr, 1941; Schonfelder, 1966) und Hg (Holzwarth und Meister, 1964; Schonfelder, 1966; Bunyan und Schonfelder, 1965; Bunyan, 1963; Meister und Weiss, 1968), jedoch auch für Ar (Meister und Weiss, 1968), Xe (Massey und Mohr, 1941; Meister und Weiss, 1968) und Bi (Schonfelder, 1966; Haug, 1968).

Die folgenden Abbildungen für die Streuung an Hg veranschaulichen das Verhalten der Shermanfunktion in diesem Energiebereich.

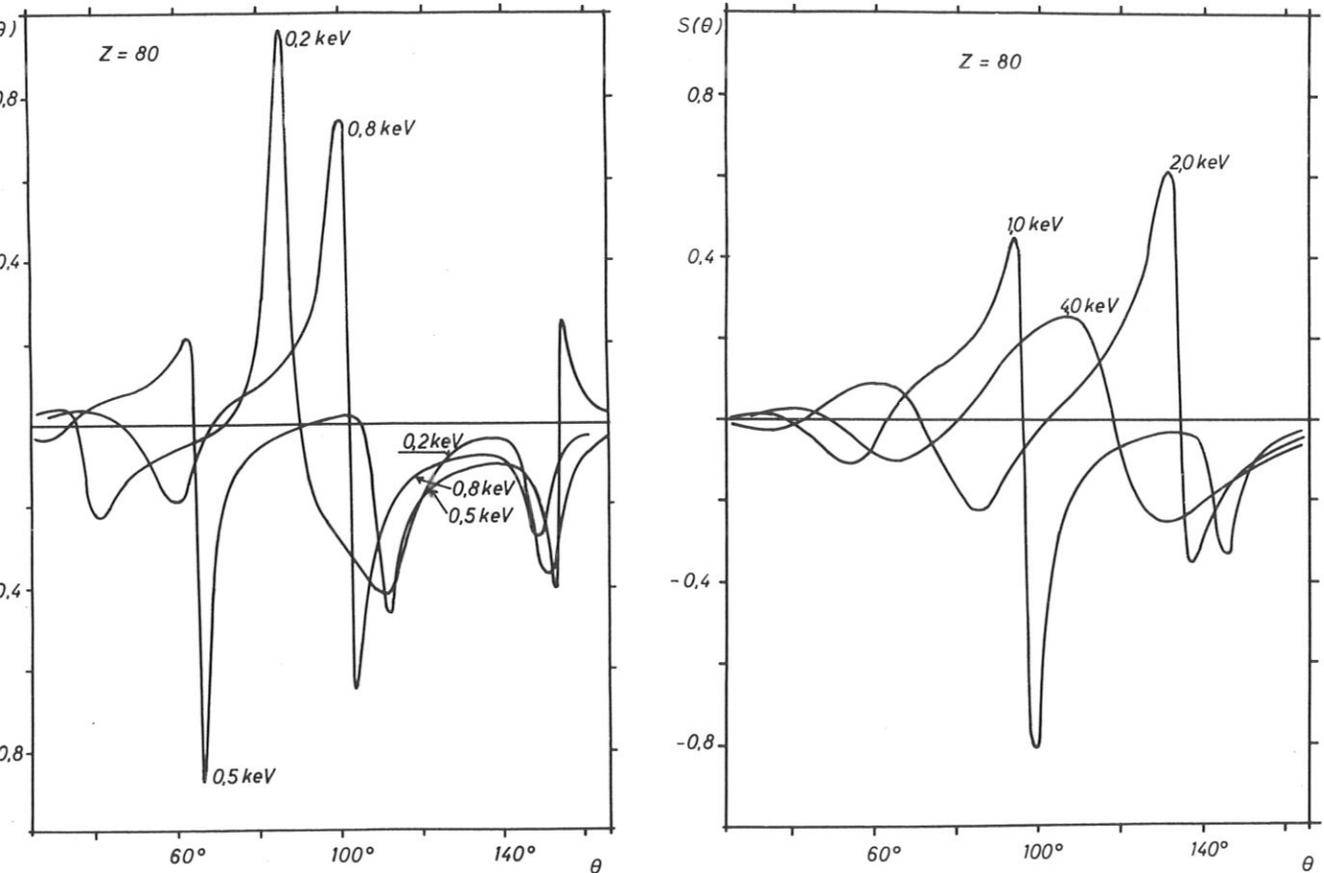


Abb.11 Die Shermanfunktion als Funktion des Streuwinkels  $\theta$  für Elektronenenergien zwischen 0,2 und 4,0 keV bei Streuung an Hg. (Nach Holzwarth und Meister, 1964)

Die Abbildung 11 zeigt die Winkelabhängigkeit der Shermanfunktion für Energien zwischen 0,2 und 4,0 keV. Auffallend sind die scharfen Spitzen und der Wechsel des Vorzeichens von  $S$  innerhalb kleiner Winkelbereiche. Für verschiedene Energien und Winkel treten Werte von  $|S| > 0,8$  auf, die bei Energien über 10 keV nicht erreicht werden. Wie schnell sich die Winkelabhängigkeit der Shermanfunktion mit der Energie ändert, zeigt die Abb.12 in der Umgebung von 0,2 keV. Das Verhalten der Shermanfunktion um das Maximum bei 1,68 keV und  $135,5^\circ$  gibt die Abb. 13 wieder.

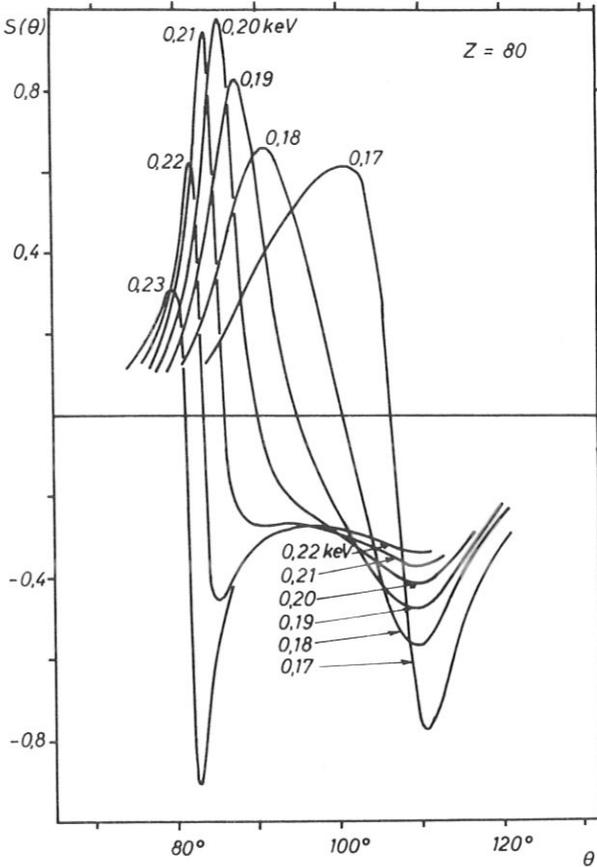


Abb.12 Änderung der Winkelabhängigkeit der Shermanfunktion mit der Elektronenenergie im Energiebereich von 170 bis 230 eV bei der Streuung an Hg. (Nach Holzwarth und Meister, 1964)

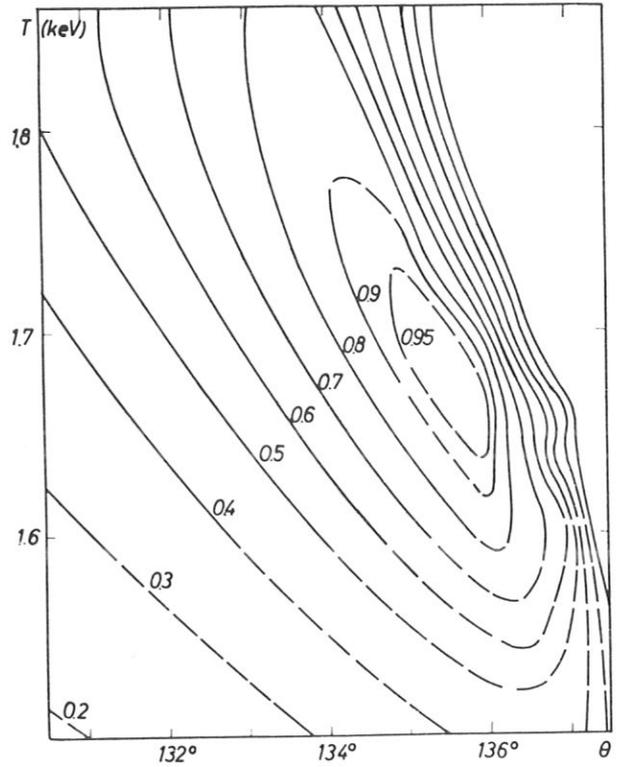


Abb.13 Kurven konstanter Shermanfunktion S als Funktion des Streuwinkels  $\theta$  und der Elektronenenergie T in der Umgebung des Maximums von S bei 1,7 keV und  $135,5^\circ$  für die Streuung an Hg. (Vergrößerter Ausschnitt aus Abb.9) (nach Holzwarth und Meister, 1964)

Man erkennt, daß Werte von  $|S| > 0,9$  nur in sehr kleinen Winkel- und Energiebereichen vorhanden sind. Die Variation der Kernladungszahl Z zeigt (Abb.8), daß sich die Minima und Maxima von S mit steigendem Z zu größeren Streuwinkeln verschieben (analog zu den Minima des DWQ). Außerdem ändern sich dabei die Höhen der Maxima von  $|S|$ . Über andere Z gibt es nur vereinzelte Zahlenangaben. Es läßt sich aus ihnen entnehmen, daß die Werte von  $|S|$  mit fallendem Z kleiner werden.

### 3.4.3. Diskussion der Beugungsstruktur bei kleinen Energien.

Nach einer Arbeit von Bühring (1968) läßt sich das Verhalten der Shermanfunktion bei kleinen Energien (unterhalb ca. 2 keV) auch folgendermaßen verstehen. Man betrachtet dazu die Funktion  $f(z)$  und ihre komplexen Nullstellen, wobei  $z = \cos \vartheta$ . Bei  $z_0 = x + iy$  mit  $f(z_0) = 0$  ist der DWQ minimal. Es wird daher der folgende Ansatz gemacht

$$f(z) = [ z - (a+ib) ] A(z)$$

oder, da man nur an der physikalischen Größe interessiert ist,

$$f(x) = [ x - (a+ib) ] A(x)$$

Mit den reellen Funktionen  $d(x) > 0$  und  $\varphi(x)$ , die durch

$$g(x) = A(x) d(x) e^{-i\varphi(x)}$$

definiert sein sollen, wird der Wirkungsquerschnitt  $I$  und die Polarisation  $S$  durch einfaches Einsetzen der obigen Ansätze in die allgemeinen Formeln für  $I$  und  $S$

$$I = [(x-a)^2 + b^2 + d^2] |A|^2$$

$$S = - \frac{2d [(x-a) \sin \varphi - b \cos \varphi]}{(x-a)^2 + b^2 + d^2}$$

In der Umgebung des Minimums des DWQ nimmt man an, daß die Funktionen  $A$ ,  $g$ ,  $\varphi$  und  $d$  nur schwach vom Streuwinkel abhängen (das wurde numerisch bestätigt); in einem kleinen Winkelbereich um  $x = a$  seien diese Funktionen also konstant. Dann folgt aus den obigen Formeln

$$S(x_0) = 0 \quad \text{für} \quad x_0 - a = b \cotg \varphi.$$

Der Nulldurchgang von  $S$  ist also um  $b \cotg \varphi$  aus der Lage des Minimums des DWQ verschoben.

Die Lage der Extrema von  $S$  erhält man durch Differenzieren

$$x_m = x_0 \pm (\sin \varphi)^{-1} \left| \sqrt{b^2 + d^2 \sin^2 \varphi} \right|$$

Sie liegen symmetrisch zum Nulldurchgang  $x_0$  der Polarisation. Einsetzen von  $x_m$  liefert die Extremwerte

$$S_m = S(x_m) = \frac{-d \sin^2 \varphi}{b \cos \varphi \pm \left| \sqrt{b^2 + d^2 \sin^2 \varphi} \right|} = - \frac{d \sin \varphi}{x_m - a} \quad ;$$

man erhält im allgemeinen ein Maximum und ein Minimum in der Nähe der Nullstelle von  $S$ . Einige einfache Spezialfälle sind interessant und auch von praktischem Wert:

1) Totale Polarisation  $S_m = \pm 1$  erhält man für

$$\begin{aligned} b &= \pm d \cos \varphi && \text{an den Stellen} \\ x_m &= x_0 \mp \frac{d}{\sin \varphi} && = a + \frac{b \cos \varphi \mp d}{\sin \varphi} \end{aligned}$$

2)  $f(z)$  hat eine reelle Nullstelle, das heißt  $b = 0$ . Dann hat  $S$  eine Nullstelle bei  $x_0 = a$  und je ein Maximum und ein Minimum gleicher absoluter Größe

$$S_m = \mp \sin \varphi \quad \text{bei} \quad x_m = x_0 \pm d$$

3) Ist  $\cos \varphi = 0$ , so ist  $S = 0$  bei  $x_0 = a$  und

$$S_m = \mp \operatorname{sign}(\sin \varphi) \frac{d}{\left| \sqrt{b^2 + d^2} \right|} \quad \text{bei} \quad x_m = x_0 \pm \left| \sqrt{b^2 + d^2} \right|$$

4) Ist  $\sin \varphi = 0$ , so hat  $S$  keine Nullstellen und entweder ein Maximum oder ein Minimum

$$S_m = \operatorname{sign}(\cos \varphi) \frac{2bd}{b^2 + d^2} \quad \text{bei} \quad x_m = a$$

Besonders der Fall 1, der angibt, bei welchen Energien und Winkeln totale Polarisation auftritt, ist interessant. Hierfür seien die Energien und Winkel oberhalb 100 eV angegeben:

Tabelle 1

E in eV	$\vartheta \approx \alpha$	$\vartheta_0 \approx x_0$	$\vartheta_m \approx x_m$	$S_m$
145	163° 45'	164° 5'	164° 40'	+ 1
148	161° 48'	162° 10'	162° 52'	- 1
259	147° 8'	147° 5'	147° 56'	- 1
263	147° 8'	147° 9'	146° 22'	+ 1
550	152° 52'	152° 51'	153° 11'	+ 1
555	152° 52'	152° 53'	152° 34'	- 1
1495	138° 35'	138° 4'	139° 31'	- 1
1664	136° 3'	136° 21'	134° 4'	+ 1
117	121° 20'	122° 45'	119° 56'	+ 1
145	111° 43'	111° 54'	109° 44'	+ 1
314	118° 41'	117° 53'	119° 36'	+ 1
345	117° 23'	119° 31'	116° 53'	- 1
826	100° 57'	100° 56'	102° 7'	- 1
848	100° 22'	100° 20'	101° 33'	- 1
211	88° 51'	93° 0'	88° 14'	+ 1
245	80° 13'	79° 11'	80° 29'	- 1
425	69° 31'	69° 44'	68° 42'	+ 1
469	67° 40'	67° 13'	67° 44'	- 1

Die Extremwerte der Polarisisation ( $S_m$ ) liegen bei  $\vartheta_m$ , der Nulldurchgang der Polarisisation (S) bei  $\vartheta_0$ .

Wie gut diese Näherungsrechnung ist, zeigt die Abb.14 Die ausgezogenen Linien sind die Kurven mit  $S = 0$  nach Holzwarth und Meister (1964), während die Kreise (offen und voll) die Punkte wiedergeben, bei denen  $|S| = 1$  nach Bühring sein sollte. Die Lage der Extremwerte von S fällt bis auf wenige eV und Bruchteile von Graden mit denen von Holzwarth & Meister zusammen (bis auf den Punkt bei 211 eV). Der Spezialfall 2 bzw. 3 ist näherungsweise für 800 eV und ca.  $100^\circ$  gegeben (siehe Abb.11). Eine asymmetrische Struktur wie bei 500 eV oder 1,0 keV läßt sich durch den allgemeinen Fall erklären, bei denen die Grenzfälle 1 bis 4 nicht erfüllt sind.

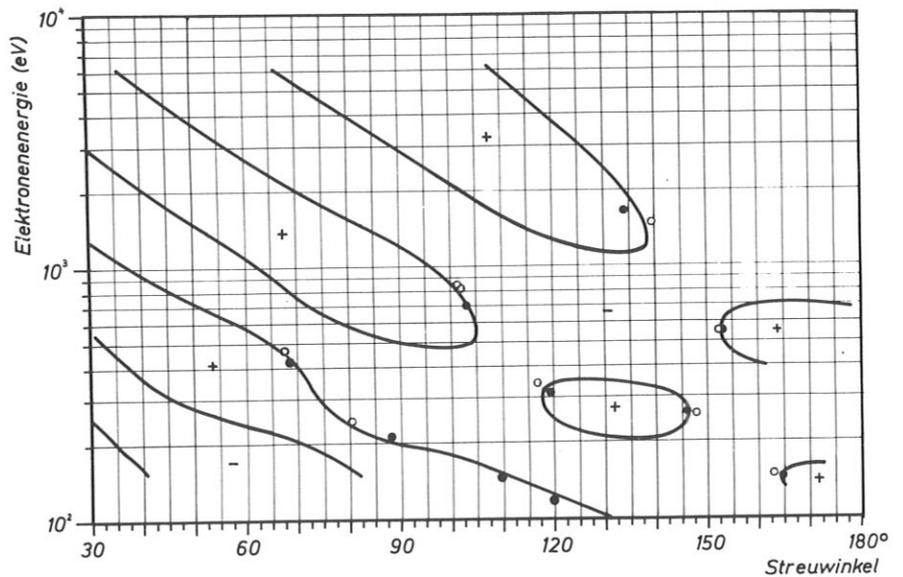


Abb.14 Kurven mit verschwindender Shermanfunktion ( $S = 0$ ) als Funktion des Streuwinkels  $\theta$  und der Elektronenenergie  $T$  für Hg. + bzw. - gibt an, daß in diesem Bereich S größer bzw. kleiner Null ist nach Werten von Holzwarth und Meister (1964).  
 ● Orte,  $S \approx + 1$  nach Bühring (1968)  
 ○ Orte,  $S \approx - 1$  nach Bühring (1968)

### 3.4.4. Einfluß des Potentials

Der DWQ und die Shermanfunktion hängen über die Streuphasen vom Potential ab. Es ist rein anschaulich zu erwarten, daß die Abschirmung des Coulombpotentials durch die Hüllenelektronen des Atoms für hohe Elektronenenergien einen geringeren Einfluß hat als für kleine Elektronenenergien. Dieser Screening-Effekt kann durch verschiedene Potentiale berücksichtigt werden. Da diese Potentiale die Elektronenverteilung des Atoms nur summarisch berücksichtigen, ist es interessant, ob der DWQ und die Shermanfunktion wesentlich von der Art des Potentials abhängen, und welches Potential die experimentellen Ergebnisse am besten wiedergibt.

#### 3.4.4.1. Energien über 200 eV.

Es werden neben dem Coulomb-Potential im wesentlichen die folgenden Potentiale, die eine Abschirmung berücksichtigen, verwendet:

- 1) Relativistische Hartree Potentiale (Mayers, 1957; Cox und Bonham, 1967)
- 2) Hartree-Fock Potentiale (nichtrelativistisch) (Cox und Bonham, 1967; Froese-Fischer, 1968)
- 3) Hartree Potentiale (Hartree, 1946; Freeman, 1953; Byatt, 1957)
- 4) Potentiale nach Hartree-Fock-Slater und Thomas-Fermi (für große Z).

Die realistischsten und genauesten Potentiale dürften das relativistische Hartree-Potential und das Hartree-Fock-Potential sein. Welches von diesen beiden Potentialen das bessere ist, können nur Experimente entscheiden, und zwar bei kleinen Elektronenenergien, da die Streuphasen bei hohen Elektronenenergien nicht sehr empfindlich auf das Potential sind. Die Potentiale werden meist in numerischer Darstellung angegeben oder in einer Summe über Yukawa-Terme (Ruark, 1940; Byatt, 1956; Cox und Bonham, 1967).

$$(59) \quad V_H = \frac{Z}{r} \sum_{i=1}^m v_i \exp(-\lambda_i r) \quad \text{in natürlichen Einheiten}$$

Die Maximalanzahlen  $m$  der Summanden in (59) liegen bei 10 in den neuesten Arbeiten.

Abb.15 zeigt einen Vergleich von verschiedenen Potentialen für Hg. Das relativistische Hartree-Potential (Mayers, 1957) unterscheidet sich nicht von dem durch Yukawa-Terme (Byatt, 1957) angepaßten Potential in diesem Maßstab. Das Coulomb-Potential weicht erst für  $r > 10^{-2} r_0$  merklich von dem Hartree-Potential ab. Für das zweifach ionisierte Hg differiert das Potential von dem für Hg erst bei ca.  $r = r_0$ . Vergleichende Berechnungen des DWQ und der Shermanfunktionen mit verschiedenen Potentialen liegen für hohe Energien nur für Hg, Au und Cu vor. In Abb.16 sind Ergebnisse verschiedener Autoren für diverse Potentiale von Hg aufgezeichnet. Die mittlere Kurve wurde von Lin (1964) und unabhängig von Bühring (1968) angegeben. Beide haben sowohl mit einem relativistischen Hartree-Potential (Mayers, 1957) und einem Potential aus 3 Yukawa-Termen (nach Byatt, 1957) gerechnet und innerhalb 3% Übereinstimmung gefunden. - Man erkennt, daß in diesem Energiebereich die verschiedenen Potentiale mit Abschirmung innerhalb weniger Prozente das gleiche Ergebnis liefern.

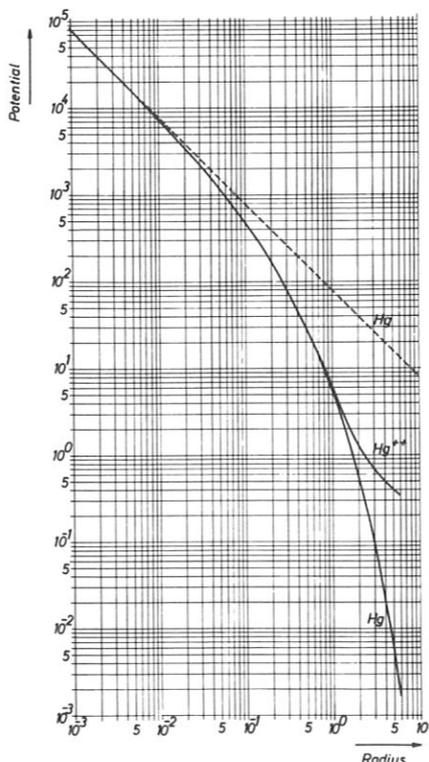
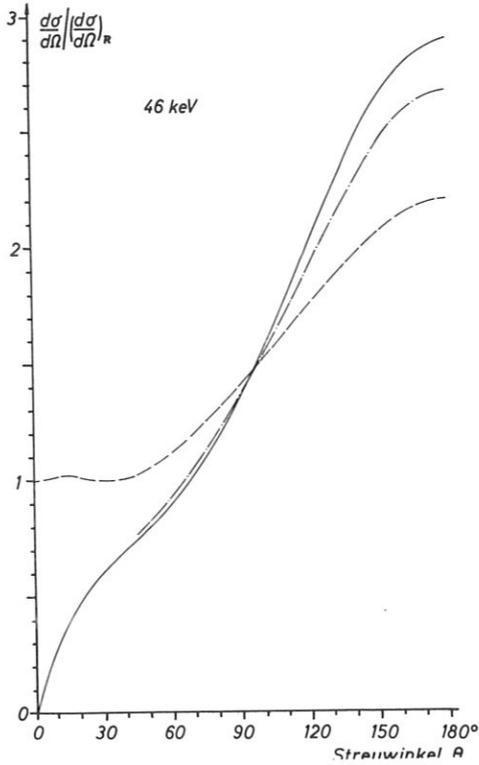


Abb.15 Potentiale für Hg (Radius in atomaren Einheiten)

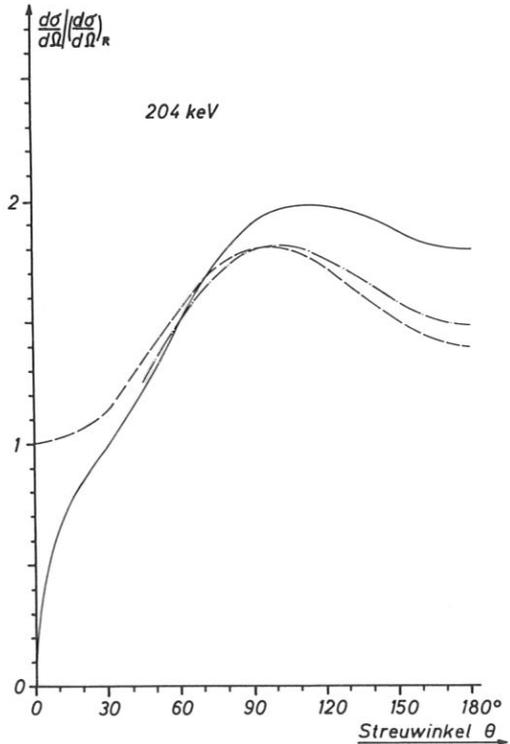
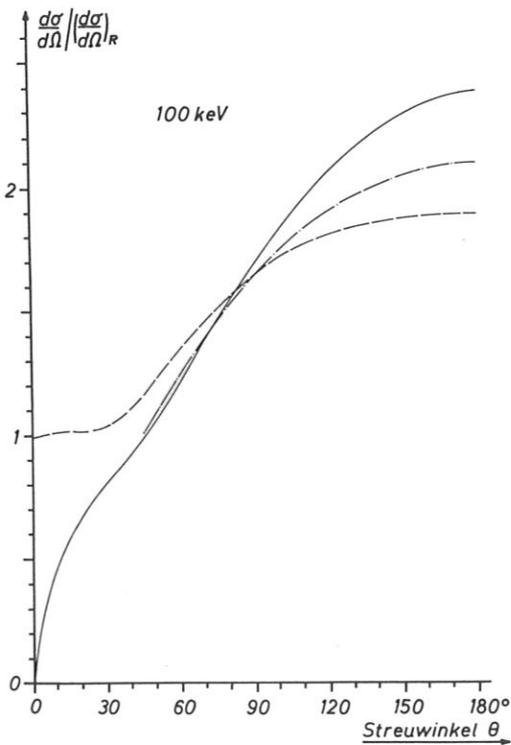
- - - - Coulombpotential
- Hg, relativistisches Hartree-Potential, (Mayers, 1957)
- Hg<sup>++</sup>, relativistisches Hartree-Potential für das zweifache ionisierte Quecksilberatom (Mayers, 1957)

Abb.16

Verhältnis des DWQ zum Rutherfordquerschnitt bei der elastischen Elektronenstreuung an Hg für verschiedene Elektronenenergien und Atom-potentiale



- Coulombpotential (Sherman, 1956)
- .-.- relativistisches Hartree-Potential (Mayers, 1957) und Potentiale nach (50) (Byatt, 1957) nach Lin (1964) und Bühring (1968)
- relativistisches Hartree-Potential (Holzwarth und Meister, 1964)



Die Kurve von Holzwarth und Meister (1964) stimmt bei kleinen Streuwinkeln (bis ca. 90°) mit den Kurven von Bühring (1968) und Lin (1964) überein, weicht jedoch für größere Streuwinkel merklich von den anderen Autoren ab. Das beruht sehr wahrscheinlich darauf, daß bei der Berechnung keine Transformation nach 3.3.1. oder andere Kunstgriffe angewendet wurden, um die Genauigkeit bei großen Streuwinkeln zu erhöhen. Für dieses Argument spricht auch, daß die Übereinstimmung der Kurven von Holzwarth und Meister (1964) und Bühring (1968) mit abneh-

mender Elektronenenergie besser wird, weil die Anzahl der Summanden in f und g mit fallender Energie kleiner wird.

Das Coulombpotential liefert für kleine Streuwinkel natürlich falsche Werte, für hohe Energien (> 204 keV) und große Streuwinkel erhält man jedoch fast Übereinstimmung mit den exakten Werten von Bühring (1968). Diese Übereinstimmung wird für höhere Elektronenenergien noch besser (bis nuclear size-Effekte zu berücksichtigen sind). Die Abweichung von der Bühringschen (1968) Kurve wird um so größer, je niedriger die Elektronenenergie wird, das heißt, der screening-Effekt spielt mit abnehmender Energie eine größere Rolle.

- Das gleiche Ergebnis zeigen auch die entsprechenden Kurven der Sherman-Funktion, siehe Abb.17. Auch hier zeigen die Werte von Bühring (1968) und Lin (1964) Übereinstimmung und sind als die zuverlässigsten in diesem Energiebereich zu betrachten. Die Abweichungen der Kurven von Holzwarth und Meister (1964) erreichen über 50 keV und bei großen Streuwinkeln Beträge von wenigen Prozenten. Für das Coulombpotential werden die Diskrepanzen unter 200 keV merklich (einige Prozent).

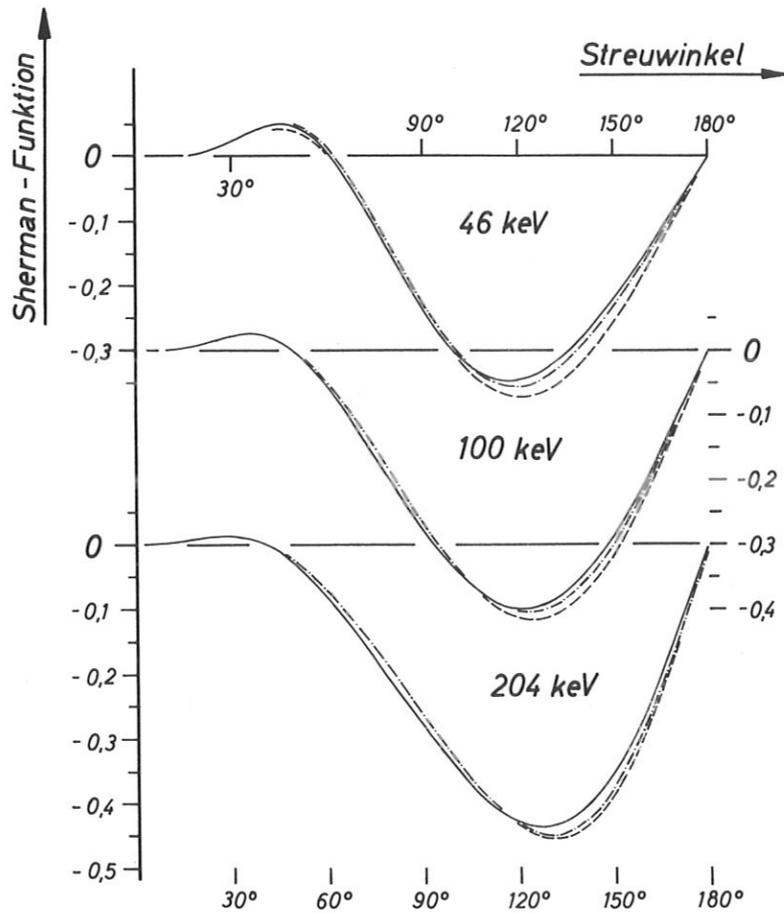


Abb.17

Shermanfunktion bei der elastischen Elektronenstreuung an Hg für verschiedene Elektronenenergien und Atompotentiale

- Coulombpotential (Sherman, 1956)
- .-.- relativistisches Hartree-Potential (Mayers, 1957) und Potentiale nach (50) (Byatt, 1957) (nach Lin, 1964; Bühring, 1968)
- relativistisches Hartree-Potential (Holzwarth und Meister, 1964)

#### 3.4.4.2. Energien unter ca. 200 eV.

Für Elektronenenergien unter ein paar hundert eV beschreibt keines der bisher angegebenen Potentiale die Streuung richtig. Hier muß zusätzlich Polarisierung und Austausch berücksichtigt werden. (Der Einfluß dieser Effekte ist für Hg bei einigen hundert eV gering, wird aber in der Gegend um 100 eV merklich.)

Eine Polarisierung der Elektronenhülle durch das ankommende Elektron wird meist durch die beiden folgenden Potentiale, die im wesentlichen von dem erzeugten Dipolmoment herrühren, berücksichtigt :

$$V_p = \frac{\alpha}{2r^4} \left\{ 1 - \exp \left[ -\left(\frac{r}{fr_0}\right)^n \right] \right\} \quad (60)$$

(Barmann und Harting, 1942; Garrett und Mann, 1963; Lenander, 1966),

wobei  $\alpha$  die Polarisierbarkeit des Atoms bedeutet und  $n \geq 4$  ist, jedoch meist gleich 8 gesetzt wird.  $fr_0$  ist der Abstand, bei dem die Kraft, die die Polarisierung bewirkt, verschwindet.  $f$  ist ein Parameter, der nahe bei eins liegt und zur Anpassung an experimentelle Ergebnisse in engen Grenzen variiert werden kann.

$$V_p = -\frac{\epsilon^2}{2a_0} \cdot \frac{\alpha}{(x_p^2 + x^2)^2} \quad (61)$$

(Garret und Mann, 1963; Robinson, 1962)

wobei  $\alpha$  die Polarisierbarkeit des Atoms  
 $x_p$  eine Abschirmkonstante,  
 $\epsilon$  die Energie und  
 $a_0$  der Bohrsche Wasserstoffradius

ist.

Rechnungen für Cs mit dem Polarisierungspotential nach (60) lieferten die bessere Übereinstimmung mit dem Experiment. Im Polarisierungspotential (60) sind Austauscheffekte mit eingeschlossen, wenn der Parameter  $f$ , bzw.  $fr_0$ , nur hinreichend klein (unabhängig vom speziellen Atom) angenommen wird. (Lenander, 1966; Klein und Brueckner, 1958; Weiss, 1969). Der Parameter  $f$  bestimmt die Lage und Größe des Maximums von  $V_p$  in (60); mit steigendem  $f$  rückt das Maximum des Polarisierungspotentials zu größeren Kernabständen und die Höhe des Maximums wird verringert (siehe Abb.18).

Die Austauscheffekte, die durch den Austausch des ankommenden Elektrons mit irgendeinem Atomelektron als auch durch den Austausch verschiedener Atomelektronen innerhalb des Atoms zustandekommen, werden meistens pauschal durch ein Potential der Form (Gasper, 1954; Yates und Strand, 1968)

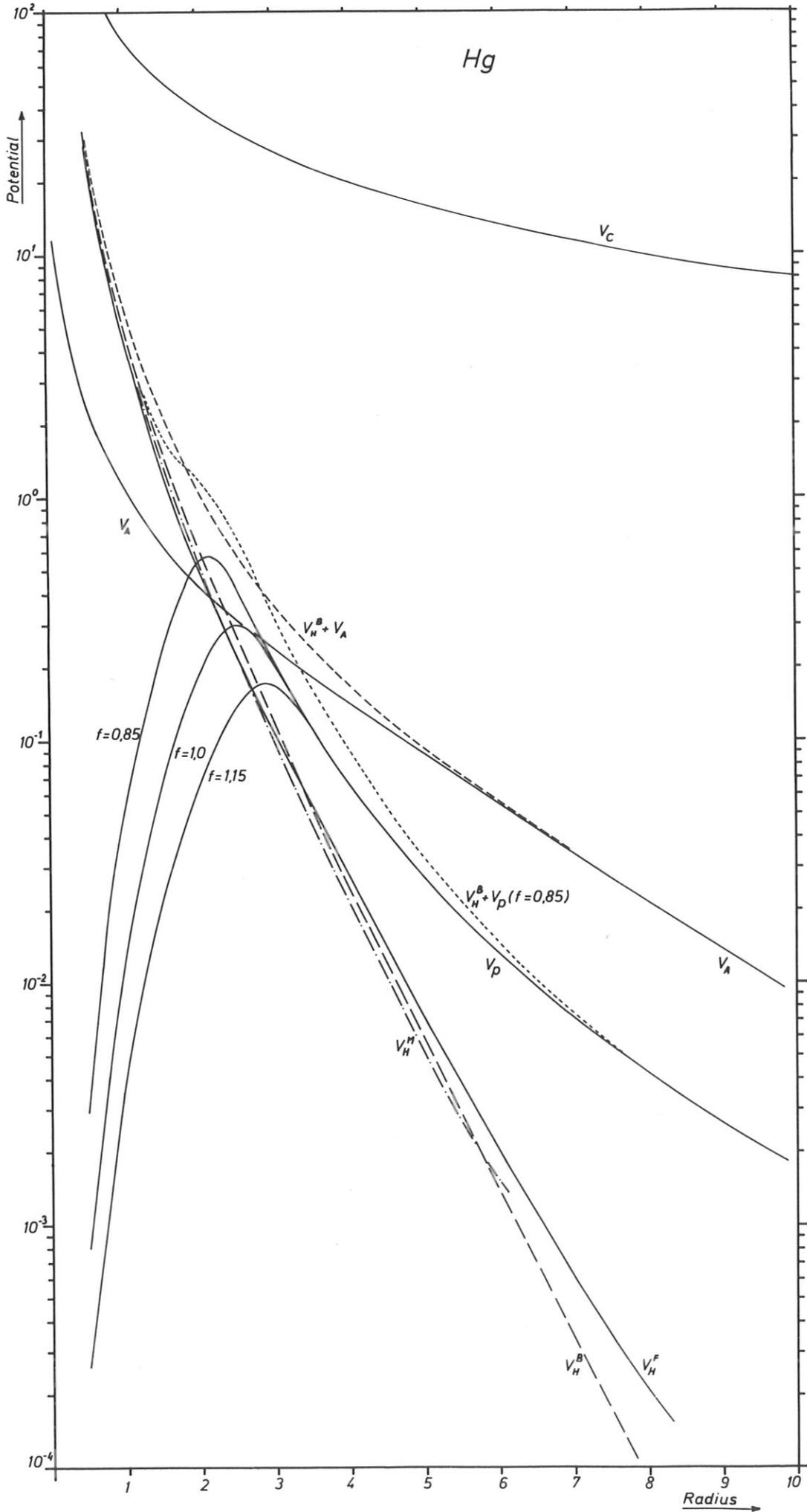
$$V_A = \frac{1}{\pi} \left[ 3 \pi^2 \rho(r) \right]^{1/3} \quad (62)$$

mit 
$$\rho(r) = \frac{Z}{4\pi r} \sum_1 \gamma_1 \lambda_1^2 e^{-\lambda_1 r}$$

beschrieben. Es wird daneben noch das Austauschpotential nach Slater verwendet, das sich von (62) nur durch einen Faktor 1,5 unterscheidet. Rechnungen für Ar (Yates u.a., 1968) zeigen, daß das Austauschpotential erst unterhalb 100 eV merkliche Abweichungen liefert.

Zu Abb.18 Potentiale für Hg

- $V_H^F$  Hartree-Fock-Potential nach Froese (nicht veröffentlicht)
- .-.-  $V_H^M$  relativistisches Hartree-Potential nach Mayers (1957)
- $V_H^B$  Hartree-Potential nach Byatt (1957)
- $V_p$  Polarisierungspotential nach (60) für drei verschiedene Parameter  $f$
- $V_A$  Austauschpotential nach (62) mit  $V_H^B$
- $V_c$  Coulomb-Potential



Das zur Berechnung der Streudaten einzusetzende Potential ist

$$V = V_H + V_D \quad \text{bzw.} \quad V = V_H + V_A$$

Für Hg sind in Abb.18 die verschiedenen Potentiale für  $r > 0,1$  (in Einheiten von  $a_0$ ) eingetragen, so daß man erkennen kann, in welchem  $r$ -Bereich sie eine Rolle spielen. Die drei angegebenen Hartree-Potentiale differieren stärker mit zunehmendem Radius, wobei das von Froese-Fischer  $V_H^F$  das zuverlässigste ist. Dem Austauschpotential liegt das Hartree-Potential von Byatt zugrunde. Für die Berechnung des Polarisierungspotentials wurde die Formel (60) mit  $\alpha = 34,5$ ,  $r_0 = 2,46$  und drei verschiedenen Parametern  $f$  verwendet.

Eine grundsätzlich bessere Methode für die Berücksichtigung des Austausches ist die von Walker (1969) verwandte. Er betrachtet die elastische Streuung eines Elektrons an einem Atom, dessen Hülle aus geschlossenen Gruppen von Elektronen besteht. Die dazu geeigneten relativistischen Hartree-Fock-Gleichungen führen zu einer Wellengleichung

$$(H_1 - E - V) \psi - W - \sum_A O_{AS} (\epsilon_A + E) \psi_A = 0$$

Hier ist 
$$H_1 = -i\alpha \vec{\nabla} + \beta - \frac{Ze^2}{r} \quad (h = m = c = 1)$$

der Hamilton-Operator für das einzelne Elektron (Dirac),

$$V = \sum_A \int \psi_A^*(r_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_A(r_2) dr_2$$

der Beitrag zum Potential, der von der Abschirmung der Atomelektronen herrührt,

$$W = \sum_A \psi_A(r_1) \int \psi_A^*(r_{12}) \frac{1}{r_{12}} \psi(r_2) dr_2$$

ist der Austauschterm, und das letzte Glied

$$\sum_A O_{AS} (\epsilon_A + E) \psi_A$$

dient dazu, die Orthogonalität der gestreuten Wellenfunktion und der des gebundenen Zustands zu gewährleisten. Dabei bedeutet

$$O_{AS} = \int \psi_A^*(r_2) \psi(r_2) dr_2$$

$\epsilon_A$  = der Eigenwert der Energie des gebundenen Zustands

$E$  = die Energie des einfallenden Elektrons

$\psi_A(r)$  = die Wellenfunktion des gebundenen Zustands

$\psi(r)$  = die Wellenfunktion des gestreuten Elektrons.

Der Index  $A$  gibt die Elektronengruppe im Atom an. Die weitere Durchführung der Rechnung führt auf Integro-Differentialgleichungen, die numerisch gelöst werden müssen.

Die mit dieser Methode bestimmten Streuphasen für Hg und drei Elektronenenergien zeigt Tabelle 2.  $H$  bedeutet ein relativistisches Hartree-Potential ohne Austausch,  $H-F$  bedeutet ein relativistisches Hartree-Fock-Potential, das den Austausch von Elektronen verschiedener gebundener Zustände berücksichtigt, und  $exchange$  sind die Ergebnisse von Walker, wo zusätzlich auch der Austausch des einfallenden Elektrons mit Atomelektronen eingeschlossen wird. Die Differenzen in den Phasen sind bei kleinen Elektronenenergien größer, beschränken sich jedoch auf wenige Werte von  $l$ . Die Exchange-Phasen stimmen für kleine  $l$  besser mit den  $H$ -Phasen, für größere  $l$  besser mit den  $H-F$ -Phasen überein.

Tabelle 2

Energie (eV)	l	Spin up			Spin down		
		H	H-F	Austausch	H	H-F	Austausch
3.5	0	0.86	0.15	1.35			
	1	0.30	0.01	1.00	0.50	0.12	1.32
	2	0.53	0.06	0.03	-0.75	0.06	0.04
	3	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01
45	0	-1.09	-1.44	-1.01			
	1	-0.58	-0.94	-0.48	-0.28	-0.65	-0.20
	2	-0.67	-1.18	-0.51	-0.59	-1.09	-0.44
	3	0.92	0.51	1.07	0.93	0.52	1.07
	4	0.30	0.18	0.26	0.30	0.18	0.26
	5	0.12	0.07	0.09	0.12	0.07	0.09
	6	0.05	0.03	0.04	0.05	0.03	0.04
	7	0.02	0.01	0.01	0.02	0.01	0.01
300	0	-0.24	-0.46	-0.26			
	1	0.60	0.37	0.58	0.90	0.67	0.88
	2	1.26	1.00	1.23	1.34	1.07	1.30
	3	1.56	1.23	1.49	-1.56	1.26	1.51
	4	-1.21	-1.52	-1.36	-1.21	-1.52	-1.35
	5	0.99	0.79	0.84	1.00	0.79	0.83
	6	0.60	0.45	0.48	0.60	0.45	0.47
	7	0.39	0.28	0.30	0.39	0.28	0.29
	8	0.26	0.19	0.19	0.26	0.19	0.19
	9	0.18	0.12	0.12	0.18	0.12	0.12

Streuphasen für Hg und drei verschiedene Energien nach Walker (1969); H, kein Austausch, Hartree-Potential; H-F, kein Austausch, Hartree-Fock Potential.

Einen Vergleich der DWQ und der Shermanfunktionen zwischen den Austauschrechnungen und denen ohne Austausch (relativistisches Hartree-Potential) zeigen die Abb.19 und 20. Die Kurven, die den Austausch berücksichtigen, zeigen eine kleine Winkelverschiebung zu größeren Streuwinkeln; außerdem wird die Diskrepanz beider Rechnungen um so größer, je geringer die Elektronenenergie ist. Groß wird dann der Einfluß des Austauschs insbesondere bei den Polarisationspitzen.

Auswirkungen der Austauscheffekte lassen sich bis hinauf zu 500 eV erkennen. Die Abb.21 demonstriert, daß für Hg am Austausch im wesentlichen die Elektronen mit  $n = 4$  und  $5$  beteiligt sind.

### 3.4.5. Anwendung von relativistischen und nichtrelativistischen Rechnungen bei kleinen Energien

Bei kleinen Elektronenenergien unter 200 eV (entspricht  $\frac{v}{c} < 10^{-2}$ ) erhält man entgegen aller Erwartungen für den DWQ nach relativistischen und nichtrelativistischen Rechnungen zum Teil unterschiedliche Ergebnisse, worauf von einigen Autoren hingewiesen wurde (Spruch, 1966; Browne und Bauer, 1966; Rotenberg, 1968). Die zusätzliche Berechnung der Shermanfunktion und der experimentelle Vergleich ermöglichen eine weitere Prüfung der Theorie (Meister und Weiss, 1968). Um Polarisierungseffekte zu berücksichtigen, ist es jedoch notwendig, die zweite nichtrelativistische Näherung der Dirac-Gleichung zu betrachten. Man erhält diese Näherung, indem man die Dirac-Gleichung mit dem Foldy-Wouthuysen-Operator in eine Reihe nach Potenzen von  $\alpha$  entwickelt. Der so gewonnene nicht-relativistische Hamilton-Operator  $H_{FW}$  hat die Form (Messiah, 1962)

$$H_{FW} = \frac{1}{\alpha^2} + \frac{\vec{p}^2}{2} + V + \frac{\alpha^2}{8} \left( \Delta V + 4 \vec{s} \cdot \vec{L} \frac{V'}{r} + p^4 \right) + O(\alpha^4) \quad (63)$$

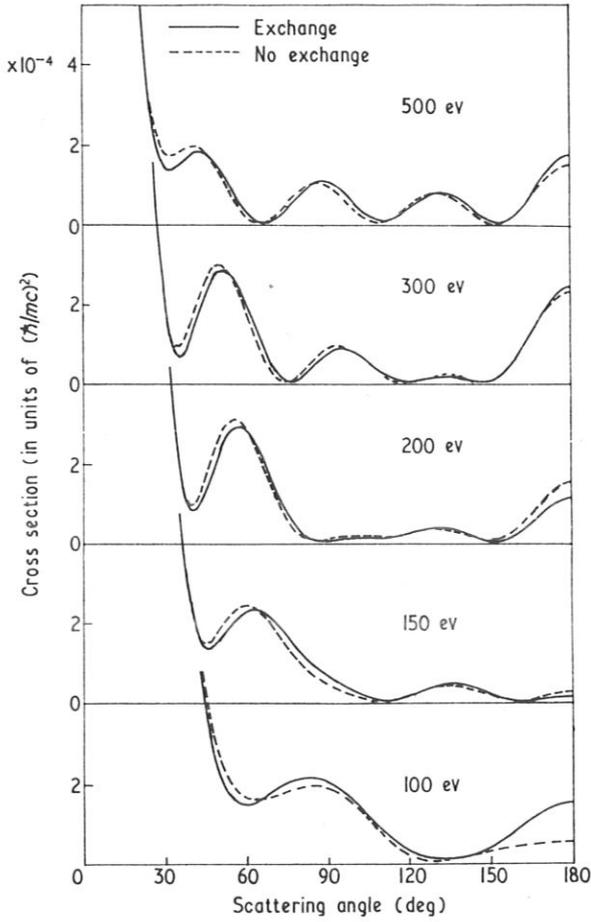


Abb. 19 DWQ mit und ohne Berücksichtigung von Austauscheffekten nach Walker, (1969)

Abb. 20 Shermanfunktion mit und ohne Berücksichtigung von Austauscheffekten nach Walker (1969)

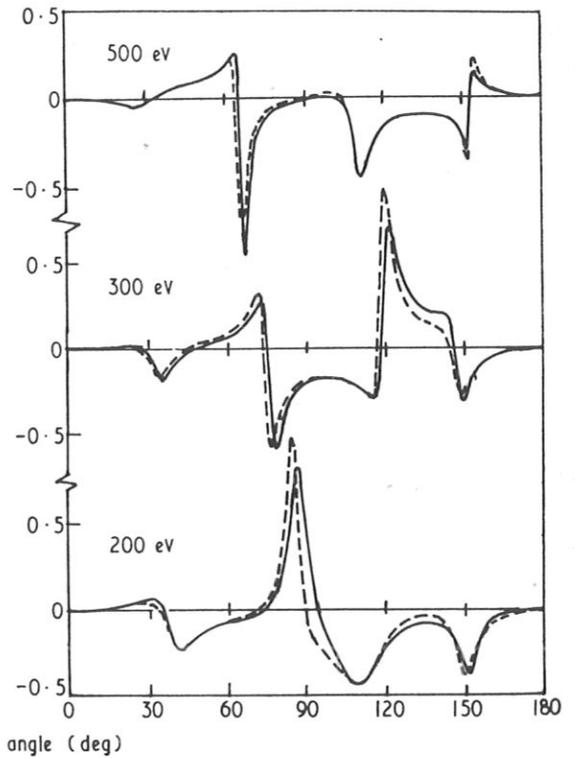
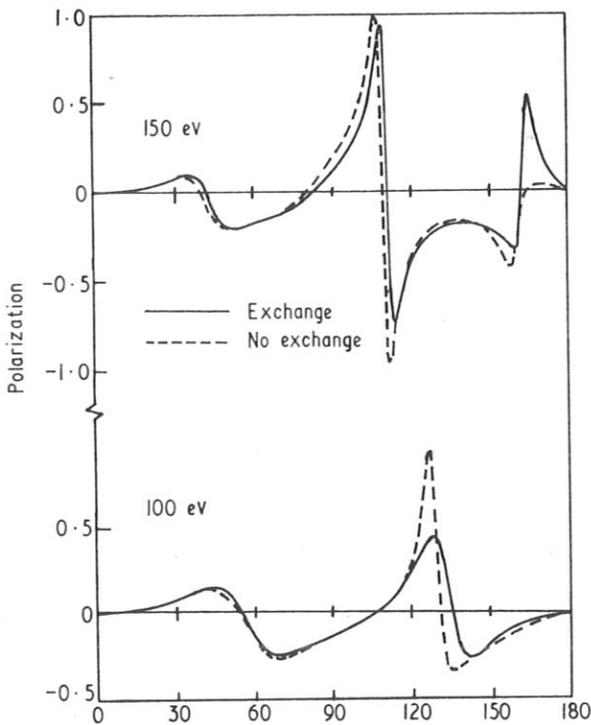
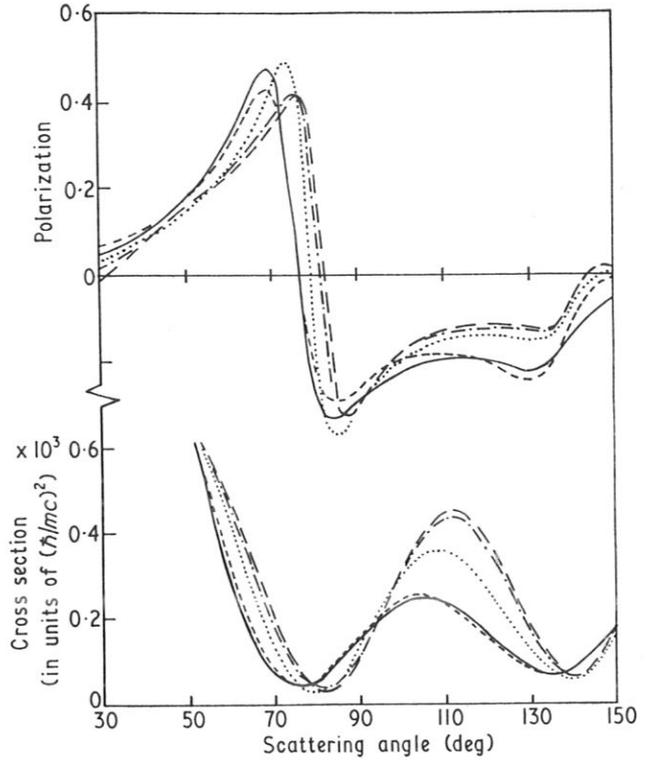


Abb.21 DWQ und S für die Streuung von 45 eV-Elektronen an Hg. Einfluß des zusätzlichen Austausches mit den äußeren Elektroenschalen.

- kein Austausch (Hartree-Fock-Potential)
- Austausch nur mit den 6s Elektronen
- ..... Austausch mit n = 5 und 6
- .-.- Austausch mit n = 4, 5, 6
- Austausch mit allen Atomelektronen



wenn man alle Glieder einschließlich  $\alpha^2$  berücksichtigt. Hierbei bedeutet  $\vec{s} = \frac{\hbar}{2} \sigma$  den Spinoperator und  $\vec{L}$  den Operator des Bahndrehimpulses. Um die Dgl.  $(H_{FW} - E) \psi = 0$  zu lösen, entwickelt man die Gesamtenergie  $E = v/\alpha^2$  nach Potenzen von  $\alpha$

$$E = \frac{1}{\alpha^2} + \frac{k^2}{2} - \frac{\alpha^2}{8} k^4 + O(\alpha^4)$$

wegen  $v = (1 + \alpha^2 k^2)^{1/2}$  nach (11).

Nach einigen Zwischenrechnungen findet man die folgende radiale Dgl. (Anhang 7)

$$\begin{aligned} \bar{H}_K'' + \left( k^2 - \frac{K(K+1)}{r^2} - \bar{U}_K(r) \right) \bar{H}_K &= 0 \\ \text{mit} \quad -\bar{U}_K(r) &= -2 \left( 1 + \frac{\alpha^2 k^2}{2} \right) V + \alpha^2 \left( V^2 + \frac{K}{2r} V' - \frac{V''}{4} \right) \end{aligned} \quad (64)$$

Das gleiche  $U_K(r)$  erhält man aus dem relativistischen Ausdruck (37), wenn man

$$-U_K(r) = -2 \sqrt{V + \alpha^2 V^2} - \frac{3}{4} \left( \frac{\eta'}{\eta} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{\eta''}{\eta} - \frac{K}{r} \frac{\eta'}{\eta}$$

nach Potenzen von  $\alpha$  entwickelt

$$-U_K = -2 \left( 1 + \frac{\alpha^2 k^2}{2} \right) V + \alpha^2 V^2 - \frac{3}{4} \left( \frac{\alpha^2 V'}{\eta} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{\eta} V'' + \frac{K}{r} \frac{\alpha^2}{\eta} V' \quad (65)$$

(einschließlich Potenzen von  $\alpha^2$ )

wobei man berücksichtigen muß, daß  $\bar{\eta} = 1 + v - \alpha^2 V = \alpha \eta$  und der Term mit  $\left( \frac{\eta'}{\eta} \right)^2$  vernachlässigt wird.  $v$  ist praktisch gleich 1 bei den hier betrachteten kleinen Elektronenenergien und damit kann  $\alpha^2/\bar{\eta}$  durch  $\alpha^2/2$  ersetzt werden, wenn nur

$$\frac{1}{2} \alpha^2 V < 1 \quad (66)$$

ist.

Da  $\alpha$  konstant ist, kann diese Ungleichung für große Werte von  $V$ , das heißt für kleine  $r$ , falsch werden. Für kleine  $r$  ist das Atompotential näherungsweise ein Coulomb-Potential und man erhält (Meister und Weiss, 1968)

$$2,66 \cdot 10^{-5} Z < r \quad (67)$$

Hieraus folgt, daß der  $r$ -Bereich, in dem die Ungleichung (67) gültig ist, mit fallender Kernladungszahl ansteigt. Das führt dazu, eine bessere Übereinstimmung von relativistischer und nichtrelativistischer Rechnung mit fallender Kernladungszahl zu erwarten. Ebenso läßt sich verstehen (Meister und Weiss, 1968), warum die relativistischen und nichtrelativistischen Streuphasen  $\delta_l$  mit zunehmender Quantenzahl  $l$  weniger differieren. Der minimale Abstand einer Bahn eines klassischen Teilchens von dem Zentrum eines Coulomb-Potentials ist nämlich (Mott und Massey, 1965, chap.II, 2)

$$r_l = \frac{l(l+1)}{2Z}$$

und daher ist die Näherungsbedingung (67) hauptsächlich wichtig für  $r \geq r_l$ .

Eine Bestätigung der oben ausgeführten Betrachtungen für die Streuphasen geht aus den Angaben von Meister und Weiss (1968) hervor, daß die Streuphasen von relativistischen und nichtrelativistischen Rechnungen bei Ar gut übereinstimmen, dagegen nicht die Streuphasen mit kleinem  $l$  für Hg.

Wie Yates und Strand (1968) als auch Meister und Weiss (1968) gezeigt haben, stimmen für Ar ( $Z = 18$ ) DWQ und Sherman-Funktion nach relativistischen und nichtrelativistischen Rechnungen sehr gut überein. Jedoch schon für Xe ( $Z = 54$ ) und für Hg ( $Z = 80$ ) ergeben sich zum Teil sehr starke Abweichungen für die Sherman-Funktion (siehe Abb.22), während für den DWQ relativistische und nichtrelativistische Näherung bei Kr (Yates und Strand, 1968) kaum voneinander abweichen, dagegen für Hg (Browne und Bauer, 1966) stärker differieren (siehe Abb.23).

### 3.4.6. DWQ und Shermanfunktion bei der Streuung an Molekülen

Das einfachste Modell, um Polarisierungseffekte bei der Streuung an Molekülen zu beschreiben, besteht darin, daß man die Atome, die das Molekül bilden, als unabhängig voneinander betrachtet (Mott und Massey, 1965; Walker, 1968; Yates, 1968). Für die DWQ der Elektronenstreuung an Molekülen im Energiebereich zwischen 6 und 50 keV ist das eine recht gute Näherung (Yates, 1968). Die Voraussetzungen für diese Näherung sind:

Das Molekül besteht aus  $N$  kugelsymmetrischen Atomen, die entsprechend der Molekülgeometrie angeordnet sind. Vernachlässigt werden dabei Bindungseffekte und eine Mehrfachstreuung innerhalb desselben Moleküls. Mathematisch läuft das darauf hinaus, daß anstelle der Funktionen  $f$  und  $g$  die Funktionen  $F(s)$  und  $G(s)$  treten, die man durch lineare Superposition der  $f_1$  und  $g_1$  für die verschiedenen Atome des Moleküls erhält

$$F(s) = \sum_{i=1}^N f_1(s) \exp i(\vec{s} \cdot \vec{r}_i)$$

$$G(s) = \sum_{i=1}^N g_1(s) \exp i(\vec{s} \cdot \vec{r}_i)$$

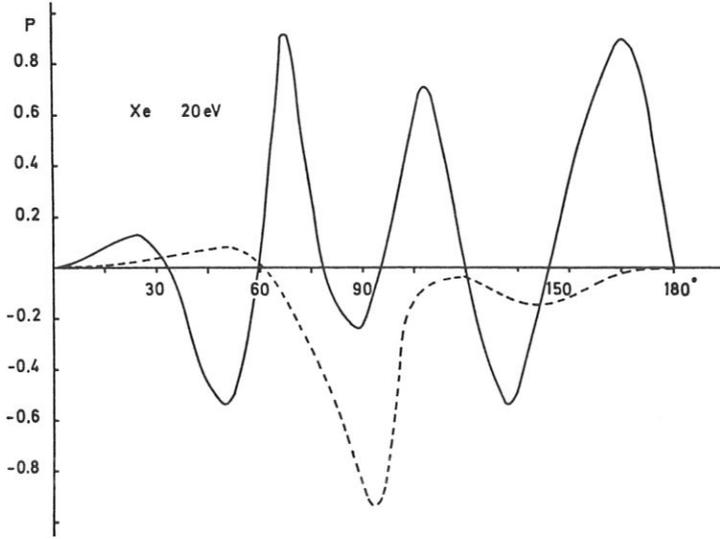
mit  $\vec{s} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$ , wobei  $\vec{k}_1$  der Wellenzahlvektor des einfallenden und  $\vec{k}_2$  der Wellenzahlvektor des gestreuten Elektrons ist. Es ist  $s = 2k \sin\theta/2$ , da  $|k_1| = |k_2| = k$ ,  $\vec{r}_i$  der Ortsvektor zum  $i$ -ten Atom, wenn der Schwerpunkt des Moleküls der Ortsnullpunkt ist. Die  $\vec{r}_i$  lassen sich durch die Gleichgewichtsabstände annähern, wenn nur kleine Schwingungen des Moleküls angeregt sind. Für den DWQ ergibt sich, falls der Primärstrahl unpolarisiert ist

$$I_m(\theta, E) = |F|^2 + |G|^2$$

$$= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (f_1^* f_j^* + g_1^* g_j^*) \exp i(\vec{s} \cdot \vec{r}_{1j}), \quad \vec{r}_{1j} = \vec{r}_1 - \vec{r}_j$$

Abb. 22

Shermanfunktion bei relativistischer und nicht-relativistischer Rechnung (Meister und Weiss, 1968)

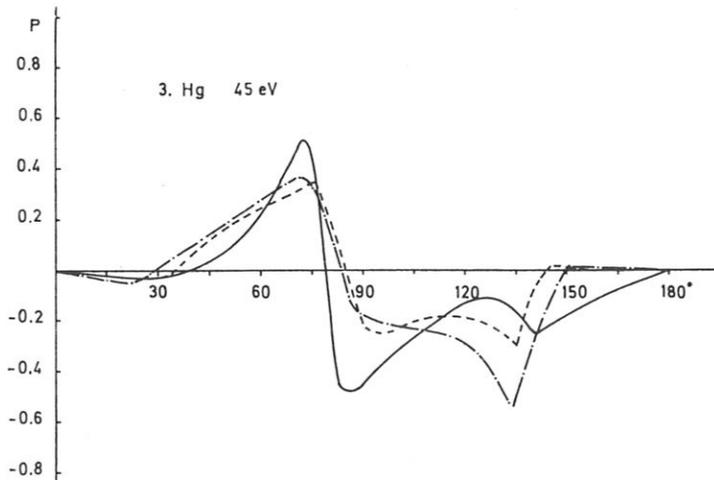


a)

Xe, 20 eV, Hartree-Fock-Potential (Froese-Fischer, 1968)

— relativistische Rechnung

---- nichtrelativistische Rechnung



b)

Hg, 45 eV und 7 eV

— relativistische Rechnung mit relativistischem Hartree-Potential (Mayers, 1957)

---- nichtrelativistische Rechnung mit relativistischem Hartree-Potential (Mayers, 1957)

.... relativistische Rechnung mit Hartree-Fock-Potential

-.-. nichtrelativistische Rechnung mit Hartree-Fock-Potential (Froese-Fischer, 1968).

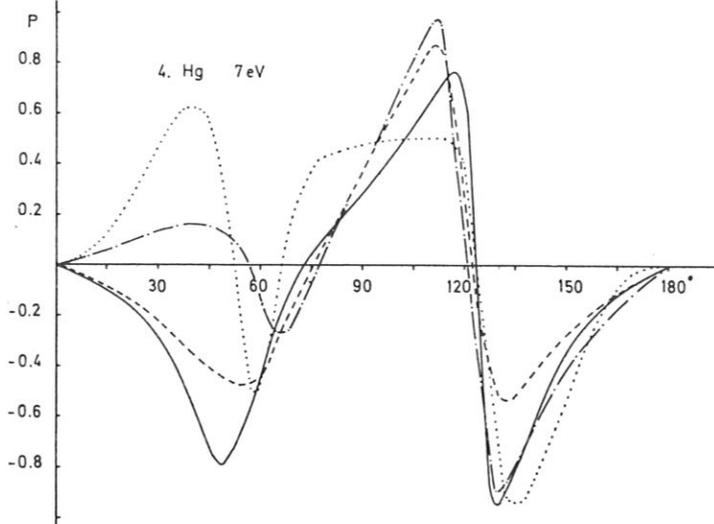
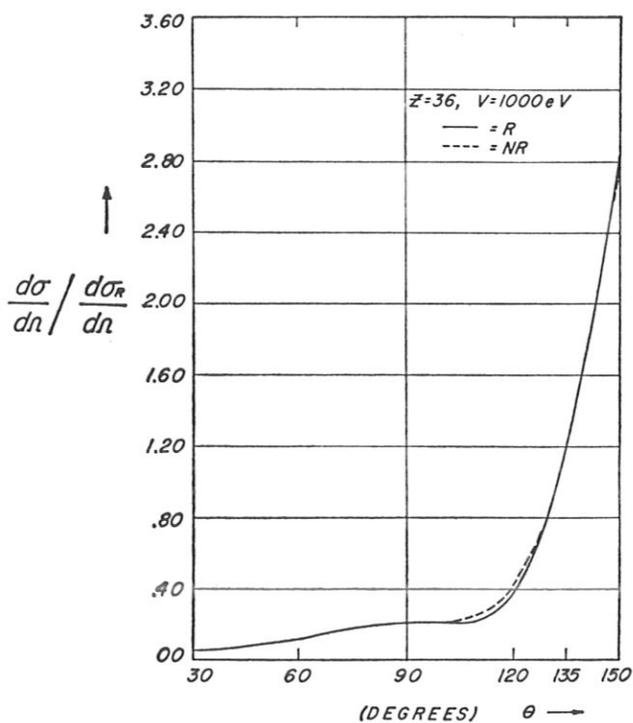


Abb. 23

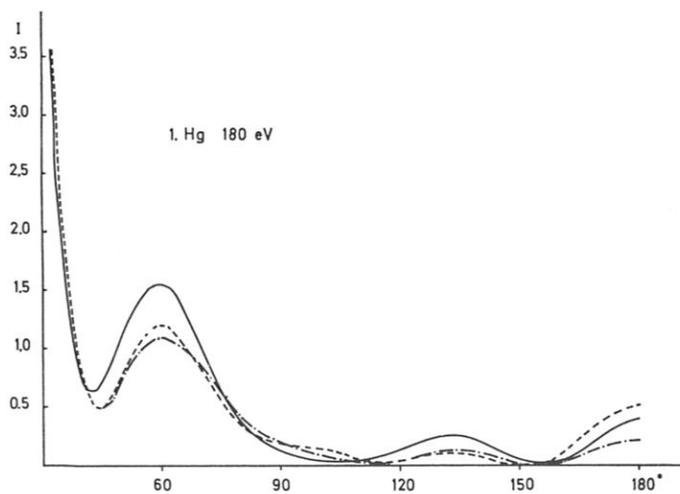
DWQ bei relativistischer und nicht-relativistischer Rechnung



a) Kr, 1000 eV

— relativistische Rechnung

---- nichtrelativistische Rechnung  
(Yates und Strand, 1968)



b) Hg, 180 eV (Meister und Weiss, 1968)

— relativistische Rechnung mit relativistischem  
Hartree-Potential (Mayers, 1957)

---- nichtrelativistische Rechnung mit relativistischem  
Hartree-Potential (Mayers, 1957)

-.- nichtrelativistische Rechnung mit Hartree-Fock-  
Potential (Froese-Fischer, 1968)

Analog erhält man für die Shermanfunktion

$$S_M(\theta, E) = i \frac{FG^* - GF^*}{|F|^2 + |G|^2}$$

$$= \frac{i}{I_M} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (f_i g_j^* - g_i f_j^*) \exp i (\vec{s} \cdot \vec{r}_{ij})$$

Durch Mittelung über alle Orientierungen des Moleküls bezüglich des einfallenden Elektronenstrahls kommt man zu

$$I_M(\theta, E) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (f_i f_j^* + g_i g_j^*) j_0(s r_{ij}) \quad (68)$$

$$\text{mit } r_{ij} = |\vec{r}_{ij}| \text{ und } j_0(s r_{ij}) = \frac{\sin s r_{ij}}{s r_{ij}}$$

$$S_M(\theta, E) = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N i (f_i g_j^* - g_i f_j^*) j_0(s r_{ij})}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (f_i f_j^* + g_i g_j^*) j_0(s r_{ij})} \quad (69)$$

oder, wenn das Molekül aus N gleichen Atomen aufgebaut ist

$$I_M = (|f|^2 + |g|^2) \left\{ N + \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N j_0(s r_{ij}) \right\} \quad (70)$$

$$S_M = i \frac{fg^* - gf^*}{|f|^2 + |g|^2} \cdot \frac{N + \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N j_0(s r_{ij})}{N + \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N j_0(s r_{ij})} = S$$

Führt man die Abkürzungen

$$I_{1j} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{1j} = (f_i f_j^* + g_i g_j^*) j_0(s r_{ij})$$

und

$$S_{1j} = i \frac{f_i g_j^* - g_i f_j^*}{f_i f_j^* + g_i g_j^*}$$

ein, so schreiben sich die Formeln (68) und (69)

$$I_M = \sum_{i,j} I_{1j} \quad \text{und} \quad S_M = \frac{\sum_{i,j} S_{1j} I_{1j}}{\sum_{i,j} I_{1j}}$$

Es hat sich bei numerischen Rechnungen gezeigt, daß die Interferenzterme ( $i \neq j$ ) für nicht zu kleine Streuwinkel ( $\theta \geq 50^\circ$ ) nur unbedeutende Beiträge liefern, so daß man in vielen Fällen näherungsweise nur die Summanden mit  $i = j$  zu berücksichtigen braucht (Hilgner und Kessler, 1968).

Ist der primäre Elektronenstrahl polarisiert, so folgt aus (26) für den DWQ

$$I_m = \sum_{ij} I_{1j} + \sum_{ij} \{ S_{1j} I_{1j} \} \vec{P} \cdot \vec{n}$$

Polarisationsmessungen bei der elastischen Streuung an Molekülen bieten eine weitere Möglichkeit, die Anwendbarkeit des diskutierten Modells zu prüfen. Berechnungen des DWQ und der Shermanfunktion liegen für die Moleküle  $J_2$  und  $C_2H_5J$  (Walker, 1968; Yates, 1968) vor.

#### 4. Experimentelle Ergebnisse und Vergleich mit der Theorie.

Dieses Kapitel ist nach drei Gesichtspunkten hin unterteilt. Die erste Einteilung nach der Art des Steuers, Gas oder Festkörper, ist vorwiegend aus experimentellen Gründen vorgenommen. Eine weitere Unterscheidung nach der Art des Gases, Kernladungszahl bzw. Verbindungen, soll den größenordnungsmäßigen Unterschieden in den Meßergebnissen Rechnung tragen. Die Unterteilung in die drei Energiebereiche ist etwas willkürlich. Für diese Einteilung spricht, daß unterhalb 10 keV die schon erwähnten Beugungseffekte auftreten und unterhalb 100 eV die Polarisierung der Elektronenhülle und Austauscheffekte wichtig werden. Das gilt vorwiegend für Elemente mit hoher Kernladungszahl wie Hg, während sich für leichtere Elemente die angegebenen Energiegrenzen zu kleineren Elektronenenergien verschieben.

##### 4.1. Meßanordnung.

Die prinzipielle Meßanordnung für die hier zu besprechenden Experimente zeigt Abb.24. Senkrecht zur horizontal liegenden Streuebene strömt das Targatgas aus einem Ofen oder einer Lavaldüse. Die Elektronenkanone wird im allgemeinen um den Gasstrahl geschwenkt. Nach dem Durchgang durch den Gasstrahl trifft der primäre Elektronenstrahl in einen Faradaykäfig (Elektronensumpf). Der gestreute Strahl gelangt durch eine Filterlinse, die unelastisch gestreute Elektronen aussiebt, in einen Detektor zum Nachweis des Streustroms bzw. in einen Polarisationsdetektor mit eventuell vorgeschaltetem Beschleuniger. Bei Streuung an festen Targets befindet sich eine Folie an der Stelle des Streuzentrums; außerdem wird bei hohen Elektronenenergien auf die Filterlinse verzichtet. Weitere experimentelle Einzelheiten sind im letzten Abschnitt über die Polarisationsdetektoren zu finden.

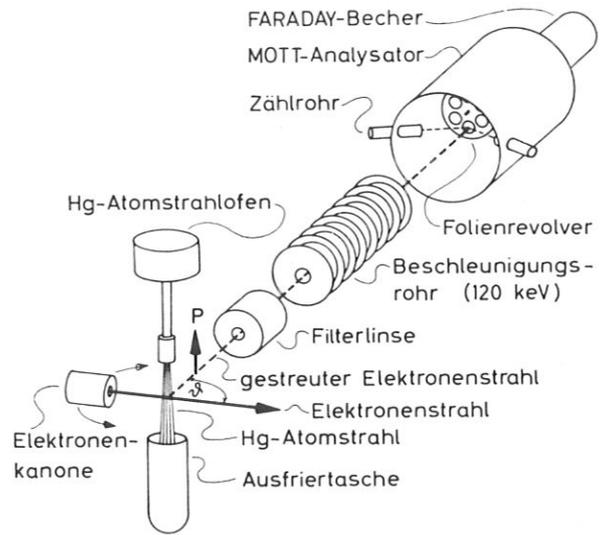


Abb.24 Prinzipielle Meßanordnung, nach Jost und Kessler, 1966

Eine abweichende Anordnung zur Bestimmung des relativen DWQ bei hohen Elektronenenergien gibt die Abb.25 wieder. Hier liegt die Richtung des primären Elektronenstrahls fest und der Streuwinkel wird durch ein Apertursystem vor dem energie-analysierenden Kugelkondensator bestimmt. Die hier erwähnten Meßanordnungen dienen nur zur Messung relativer DWQ. Die Bestimmung absoluter DWQ ist wesentlich schwieriger (Bromberg, 1969).

##### 4.2. Fehlerquellen und Meßgenauigkeit.

Unelastisch gestreute Elektronen haben durch Ionisierung und Anregung von Atomen Energie verloren. Die Filterlinse hat die Aufgabe, für Elektronen, deren Energieverlust eine Schwelle überschreitet, als Spiegel zu wirken. Die Schwelle wird meist um ca. 1 eV niedriger gelegt als die kleinste Anregungsenergie der streuenden Atome (Schwelle bei Hg ca. 4 eV). Die Auflösung der verwendeten Filterlinsen liegt bei etwa 1 ‰. (Keck und Deichsel, 1960; Simpson und Marton, 1961; Kessler und Lindner, 1964). Diese Filterung ist vor allem bei kleinen Energien (unterhalb einiger keV) notwendig, da hier die Anregungs- und Ionisierungsquerschnitte (Maximum 50 bis 150 eV) groß werden.

Die Messung des Streustroms liefert noch nicht den relativen DWQ, da der Detektor ein verschieden großes, winkelabhängiges Streuvolumen sieht. Durch die Sinuskorrektur (Silverstein, 1959), das heißt Multiplikation des gemessenen Streustroms mit dem Sinus des Streuwinkels, erhält man die Winkelverteilung bei konstantem Streuvolumen, den relativen DWQ, in hinreichend guter Näherung (Fehler < 1 % für die hier betrachteten Streuwinkel).

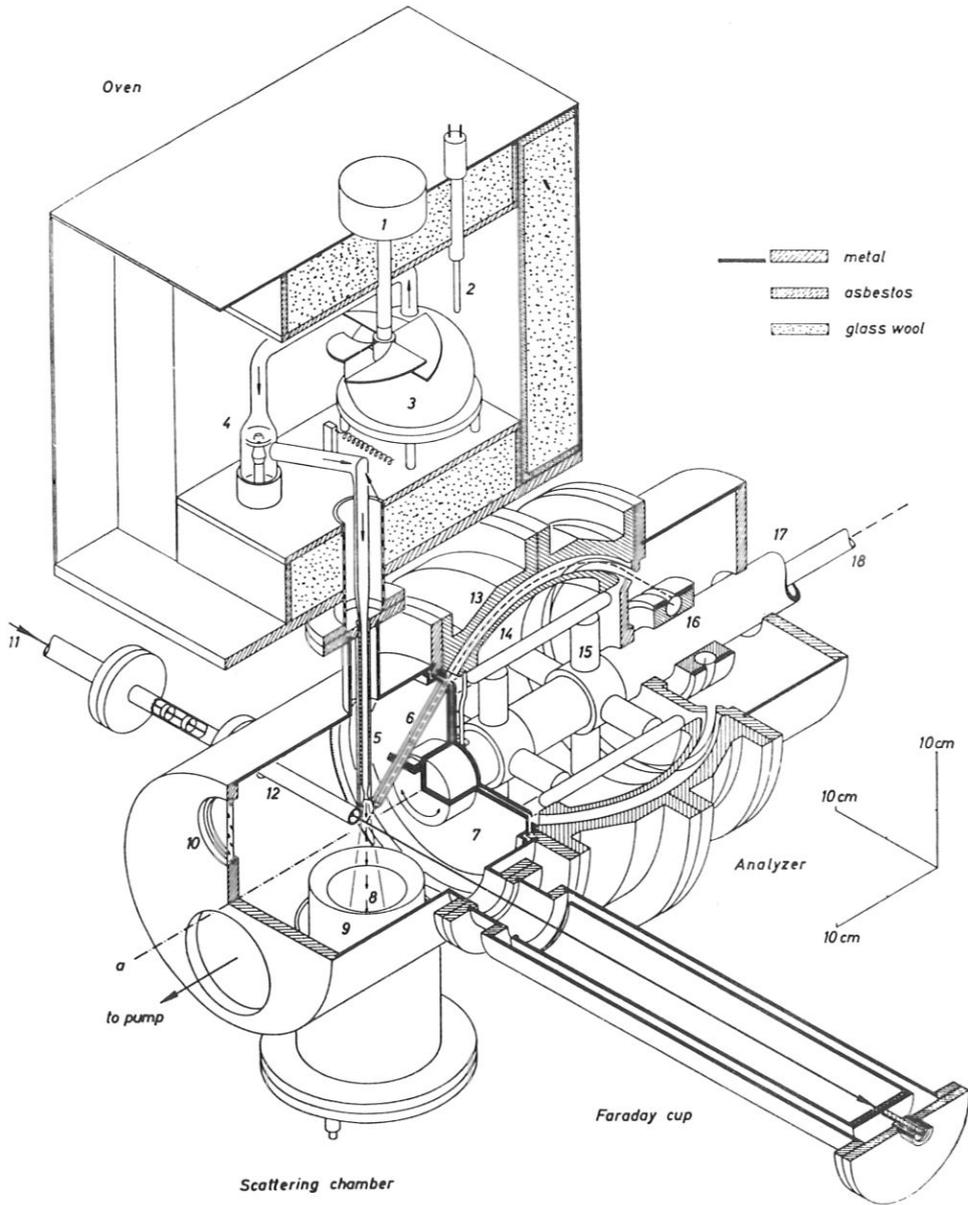


Abb.25 Apparatur zur Bestimmung des relativen DWQ bei hohen Energien nach Kessler und Weichert, 1968

- 1 Ventilator, 2 Thermoelement, 3 Hg-Vorratsgefäß, 4 Ventil, 5 Atomstrahldüse, 6 Apertursystem für den gestreuten Strahl, 7 rotierende Scheibe, 8 Atomstrahl, 9 Kühlfalle, 10 Fenster, 11 Primärstrahl, 12 Kollimator, 13 Äußere Kugelschale und Vakuumgefäß für den Analysator, 14 innere Kugelschale, 15 Stützisolator, 16 Geiger-Müller-Ringzähler, 17 Halterung für die innere Kugelschale, 18 Hochspannungszuführung für die innere Kugelschale.

Der Fehler im Streuwinkel setzt sich aus der Divergenz des primären und gestreuten Elektronenstrahls sowie der Winkelmessung zusammen. Man hat bei einer Strahldivergenz von  $< \pm 0,5^\circ$  eine Winkelauflösung von  $\pm 1^\circ$  bis  $2^\circ$  erreicht (Jost und Kessler, 1966). Diese hohe Winkelauflösung ist insbesondere bei kleinen Elektronenenergien wegen der starken Winkelabhängigkeit der Spinpolarisation notwendig. Bei Elektronenenergien unter 100 eV wird die Winkelauflösung im allgemeinen wieder schlechter, da der Öffnungswinkel des Primärstrahls größer wird. Voraussetzung ist die Kompensation des magnetischen Erdfeldes bis auf 1% bis 2% ( $< 10$  mOe).

Die Energieauflösung ist im wesentlichen durch die Energieunschärfe des primären Elektronenstrahls gegeben. Sie beträgt bei den hier erwähnten Messungen bis zu 1 eV und wird durch Kontaktpotentiale, Stabilität der Versorgungsspannungen und deren Messung verursacht. Die Energieauflösung wird mit abnehmender Elektronenenergie schlechter.

Die relativen Fehler der Streuintensitäten liegen meist bei 2%, sind jedoch größer in den Minima der Winkelverteilungen. Hier sind die Intensitäten zum Teil so klein, daß die Meßwerte durch das Rauschen des Gleichstromverstärkers mit größeren Fehlern behaftet sind. Die Streuintensitäten bewegen sich zwischen  $10^{-8}$  und  $10^{-13}$  A bei Primärstromstärken von  $10 \mu\text{A}$  bis 1 mA. Von den Wänden elastisch rückgestreute Elektronen können durch Graphitieren (oder ein anderes Element mit niedriger Kernladungszahl) weitgehend unterdrückt werden.

Die Polarisationswerte haben statistische Fehler, die von der Intensität des zu untersuchenden Strahls abhängen. Bei hohen Intensitäten (im allgemeinen kleine Polarisationsgrade) liegt der Statistische Fehler im Mittel bei 2%, bei niedrigen Intensitäten (hohe Polarisationsgrade und Nulldurchgänge) bis zu 8%. Der systematische Fehler, der seinen Ursprung im Detektor (Folie) hat, bewegt sich in der Gegend einiger Prozente. In Präzisionsmessungen mit  $\beta$ -Zerfallselektronen wurde eine Gesamtgenauigkeit im Polarisationsgrad von 0,9% erreicht (Brosi u.a., 1962). Für eine genauere Diskussion sei auf den Abschnitt 5. hingewiesen.

#### 4.3. Streuung an Gasen.

##### 4.3.1. Energien über 10 keV.

Es sollen hier nur solche Messungen besprochen werden, die im Zusammenhang mit der Polarisation interessant erscheinen. Ältere Messungen von Kessler an Hg, Xe, Kr und Ar (Kessler, 1959) zeigen eine Übereinstimmung mit Rechnungen von Doggett und Spencer (1956) (Mottische Theorie ohne Abschirmung) gegenüber älteren theoretischen Ergebnissen. Diese Meßergebnisse sind jedoch zu ungenau, um zwischen verschiedenen neueren Rechnungen (Mottische Theorie mit Abschirmung) unterscheiden zu können. Erst die neuen zuverlässigen Experimente an Hg von Kessler und Weichert (1968) entscheiden klar für die Rechnungen von Lin (1964), die mit denen von Bühring (1968) übereinstimmen, siehe Abb. 26.

Die theoretischen Abweichungen der Rechnungen von Holzwarth und Meister (1964) haben ihre Ursachen in der Aufsummierung der vielen Streuphasen insbesondere bei hohen Streuwinkeln, wie Bühring (1968) zeigen konnte. Wie aus Abb. 26 zu erkennen ist, werden die Abweichungen um so geringer, je kleiner die Elektronenenergie ist (weniger Streuphasen). Auf Grund dieser Messungen von Kessler und Weichert (1968) sollten auch die Bestimmungen der Shermanfunktion von Lin (1964) und Bühring (1968) für Energien oberhalb 10 keV zuverlässiger sein als die von Holzwarth und Meister (1964). Polarisationsmessungen an Gasen liegen in diesem Energiebereich bis jetzt nicht vor, da die Streuraten zu gering sind.

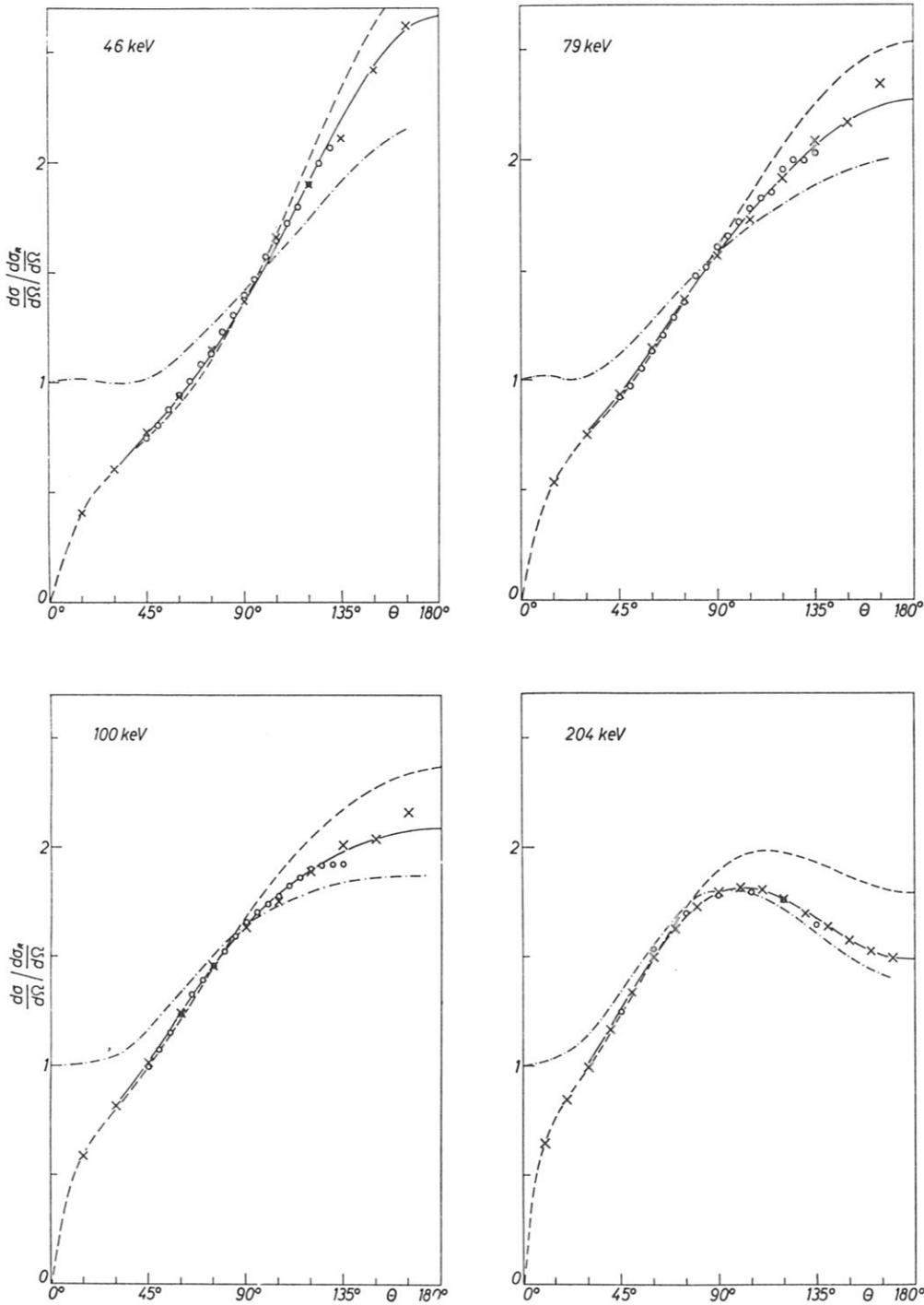


Abb.26 Normalisierte DWQ für die elastische Elektronenstreuung an Hg-Atomen. Verhältnis DWQ zum relativistischen Rutherfordquerschnitt als Funktion des Streuwinkels.

- o Experimentelle Ergebnisse nach Kessler und Weichert, 1968
- Theoretische Werte (mit Abschirmung) nach Bühring, 1968
- xx Theoretische Werte (mit Abschirmung) nach Lin, 1964
- Theoretische Werte (mit Abschirmung) nach Holzwarth und Meister, 1964
- .-.- Theoretische Werte (Coulombpotential) nach Sherman, 1956

- 4.3.2. Energien unter 10 keV.
- 4.3.2.1. Streuer mit hoher Kernladungszahl.
- 4.3.2.1.1. Energien über ca. 100 eV.
- 4.3.2.1.1.1. Differentieller Wirkungsquerschnitt.

Das am besten untersuchte Atom ist zweifelsohne Quecksilber (Kollath, 1958, dort auch die frühere Literatur; Deichsel, 1961; Kessler und Lindner, 1964; Kessler und Lindner, 1965; Deichsel und Reichert, 1965; Steidl, Reichert und Deichsel, 1965; Eitel, Jost und Kessler, 1968), da sich hiermit am leichtesten Gasstrahlen erzeugen lassen.

Abb.27 gibt Messungen des DWQ über einen weiten Energie- und Winkelbereich wieder. Man erkennt deutlich das Herauswachsen der Beugungsstruktur, wenn man die Kurven von hohen Elektronenenergien (unten) zu niedrigen Energien (oben) verfolgt. Die Übereinstimmung von Experiment und Theorie ist ausgezeichnet, wenn man von einer kleinen Winkelverschiebung ( $< 2^\circ$ ) der theoretischen Kurven zu kleineren Streuwinkeln absieht. Diese geringfügige Winkelverschiebung wird weitgehend durch Rechnungen von Walker (1969) durch Berücksichtigung des Austausches (siehe 3.4.4.2. und Abb.19) beseitigt.

Analoge Winkelverteilungsmessungen wurden für Gold (Reichert, 1963) und Wismut (Haug, 1968) durchgeführt, siehe Abb.28 und 29. Die Winkelverteilungen für Gold und Quecksilber unterscheiden sich nur wenig (Abb.30). Die Kurven für Gold (Z um eine Einheit kleiner) sind um  $1^\circ$  bis  $2^\circ$  zu kleineren Streuwinkeln verschoben, während die Kurven für Wismut um einige Grad zu größeren Streuwinkeln verschoben sind.

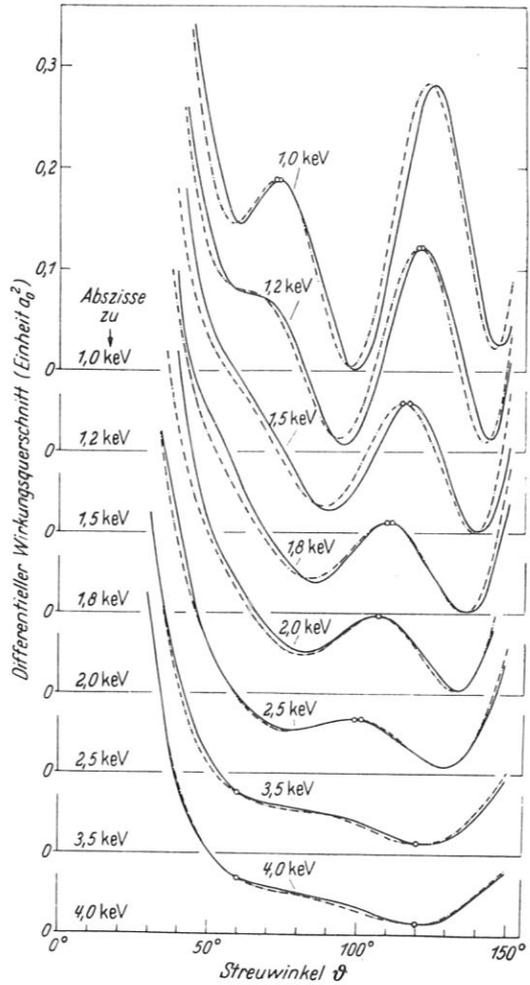
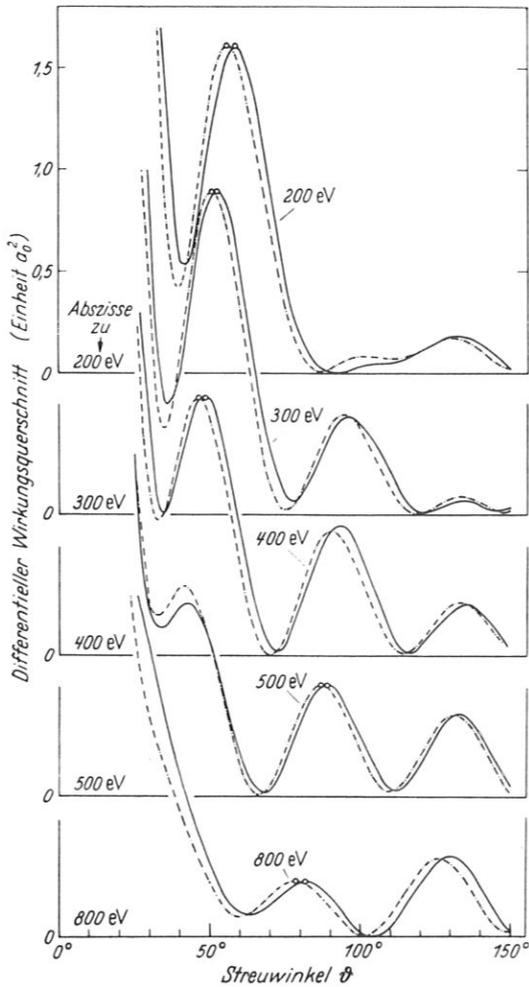
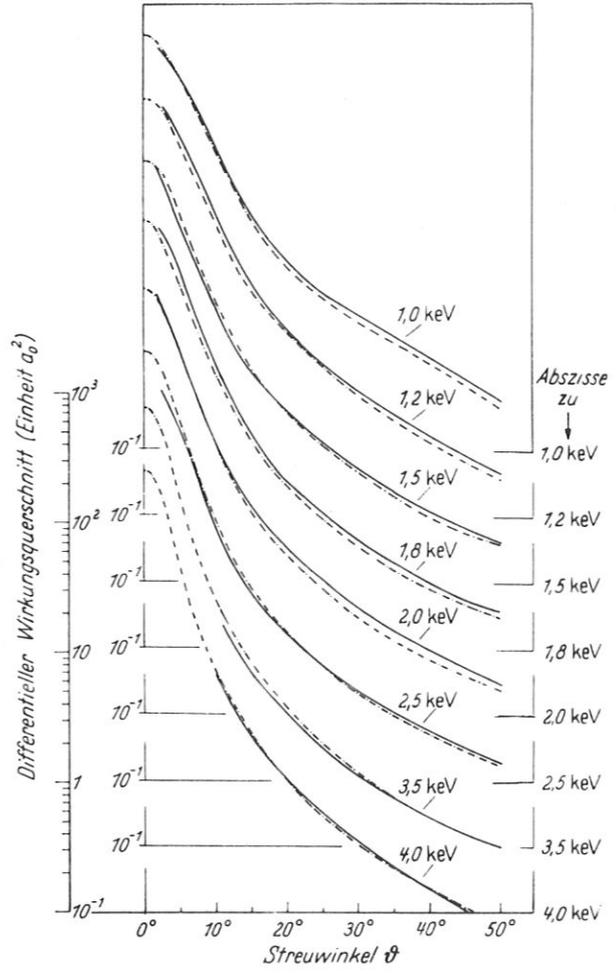
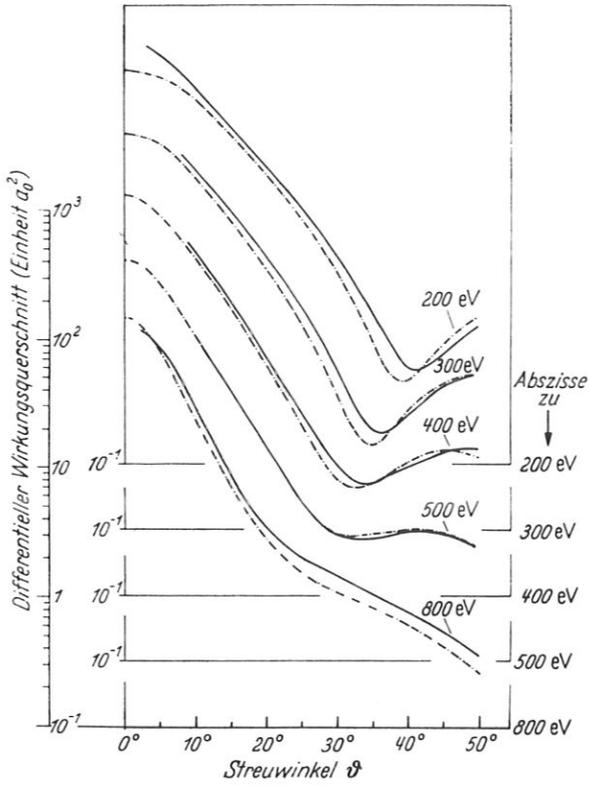
---

Abb.27 Winkelverteilungen von elastisch an Hg gestreuten Elektronen mit Energien zwischen 200 eV und 4 keV im Streuwinkelbereich  $0^\circ$  bis  $150^\circ$

— Experiment (Kessler und Lindner, 1965)

----- Theorie (Holzwarth und Meister, 1964)

Die mit einem Kreis versehenen Maxima der theoretischen und experimentellen Kurven wurden auf gleiche Ordinate gebracht;  $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$  (Bohrscher Wasserstoffradius).



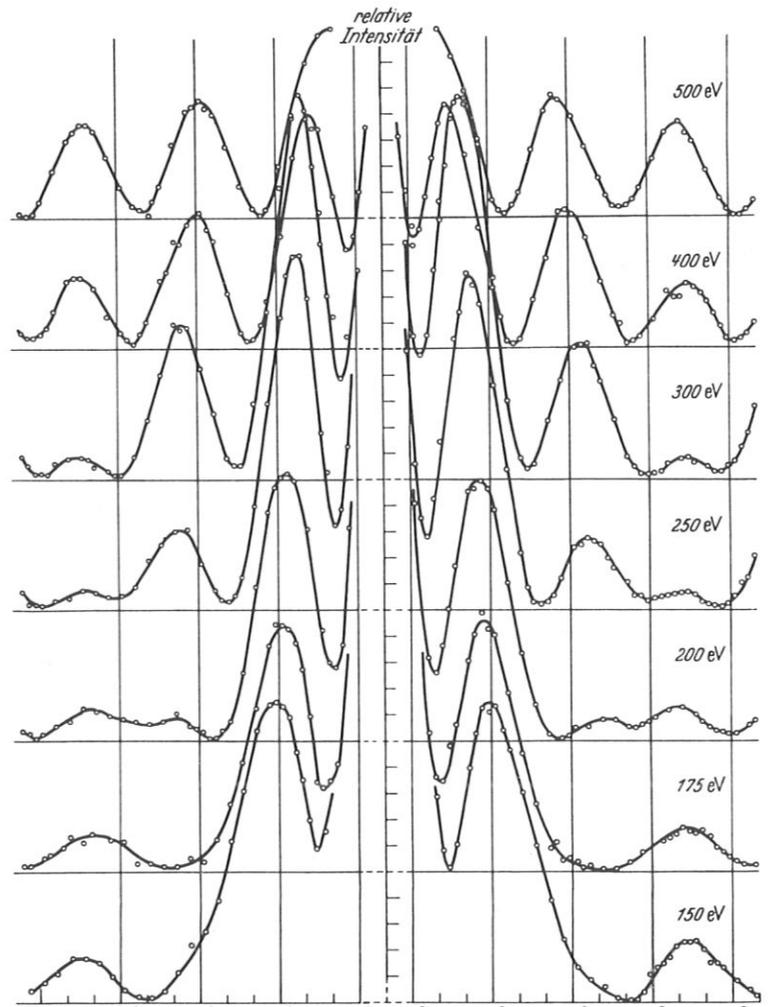
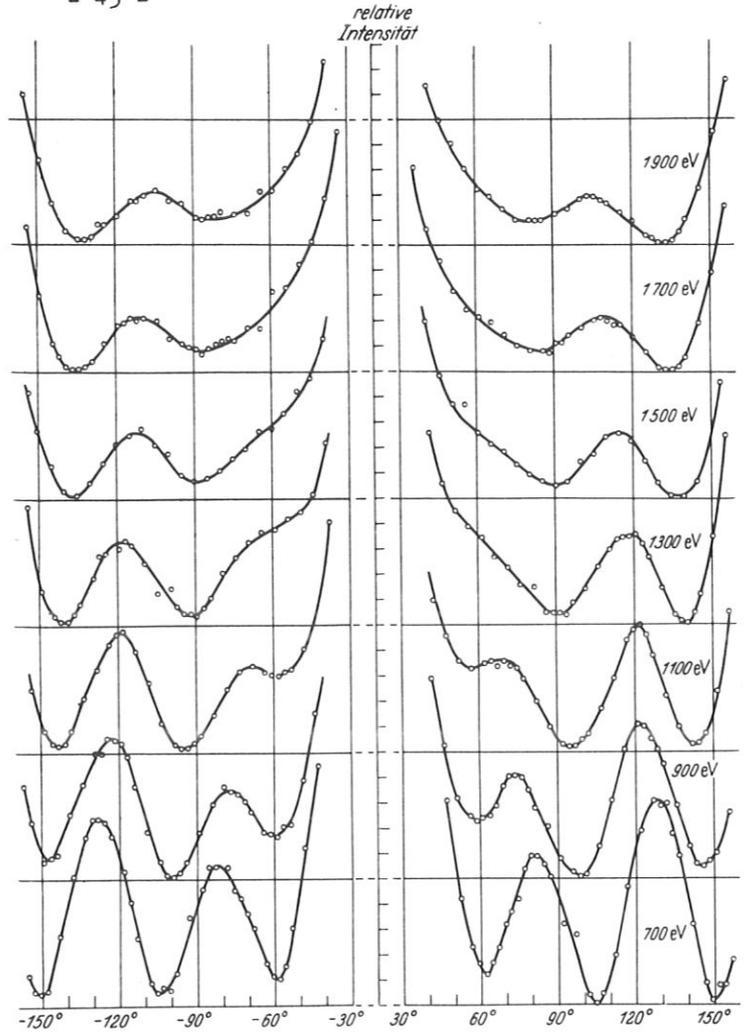


Abb.28

Winkelverteilungen von an Au elastisch gestreuten Elektronen mit Energien zwischen 150 eV und 1,9 keV im Streuwinkelbereich von 30° bis 150°. Die Kurven sind in der Ordinate vergleichbar. Nach Reichert (1963).

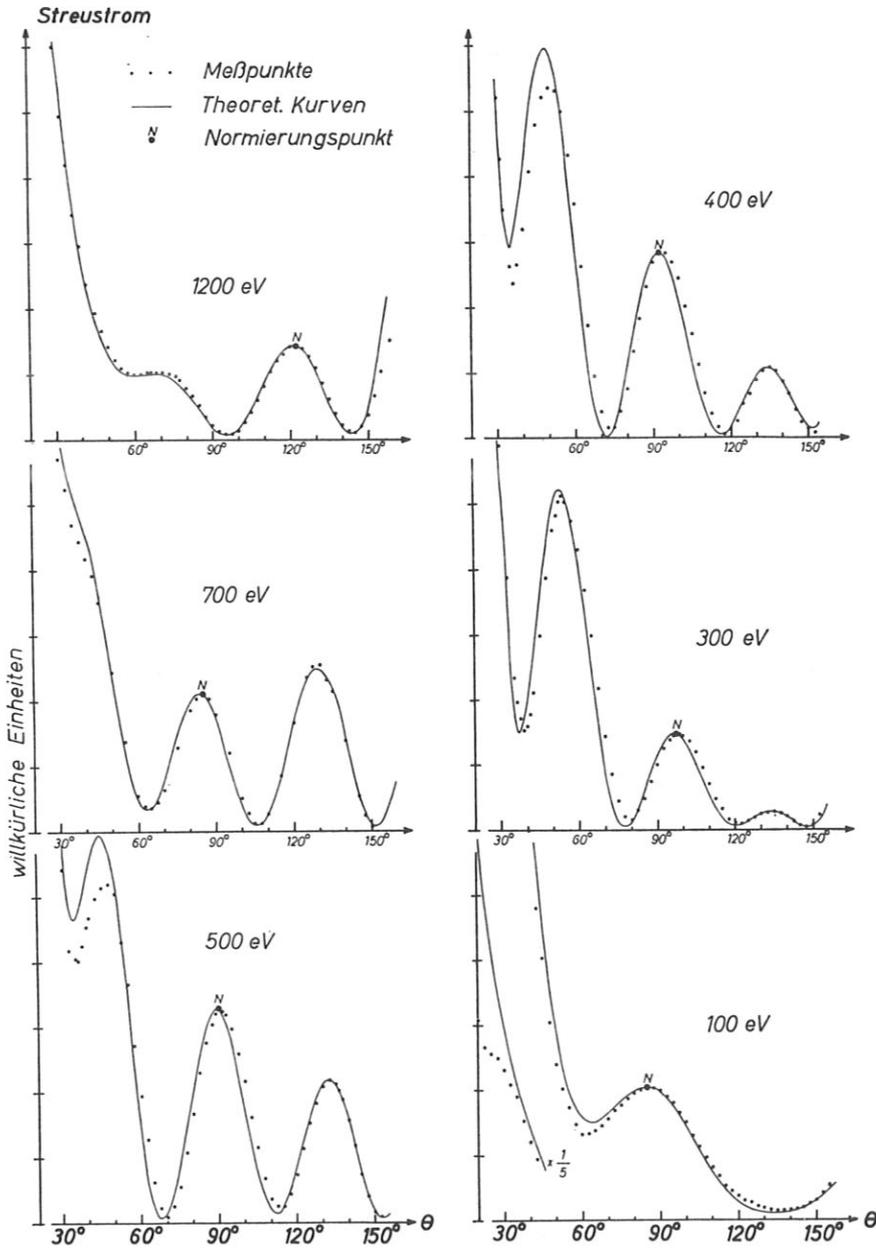


Abb.29 Elastische Elektronenstreuung an einem Bi-Atomstrahl nach Haug (1968).

- Experimentelle Werte
- Theoretische Kurven von Schonfelder
- N Normierungspunkt

Die zu verschiedenen Elektronenenergien gehörigen Kurven sind bezüglich ihrer Ordinaten nicht miteinander vergleichbar.

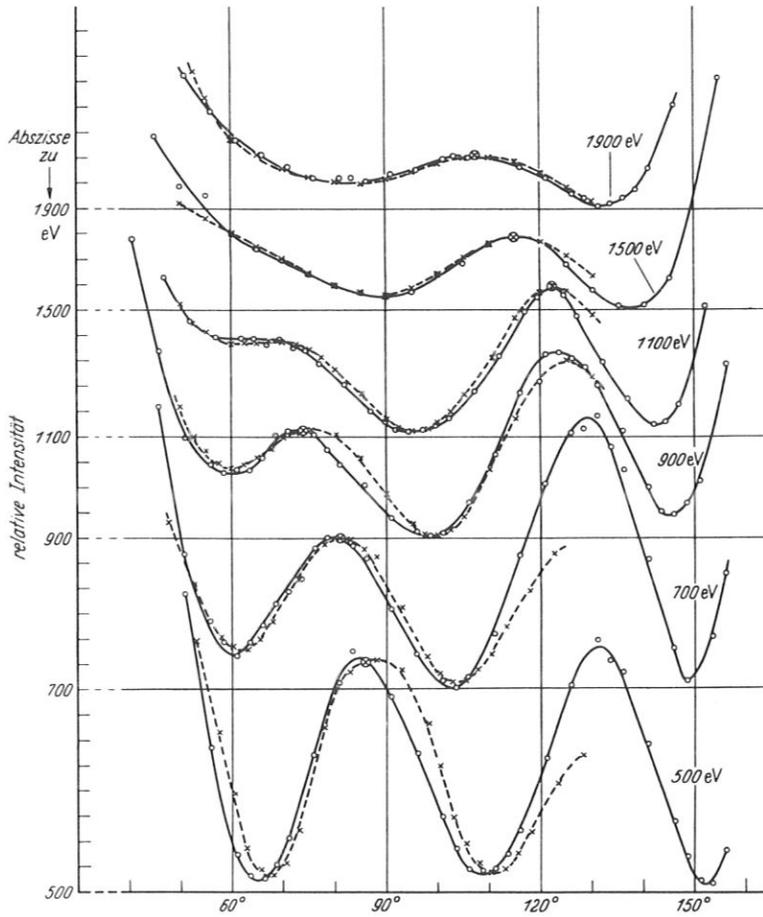


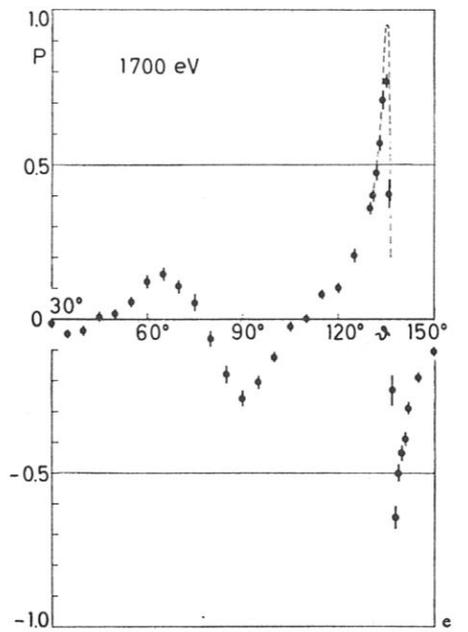
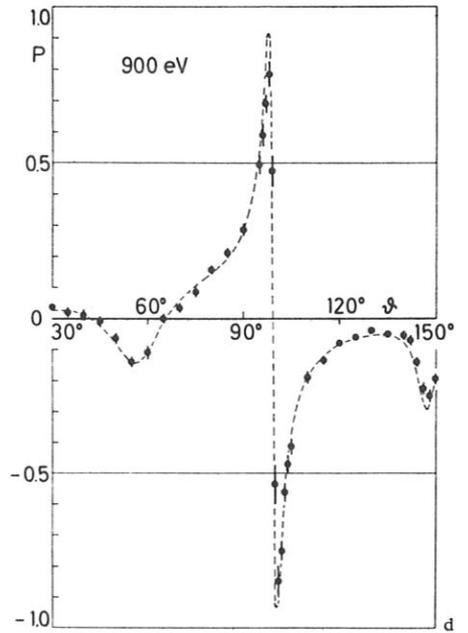
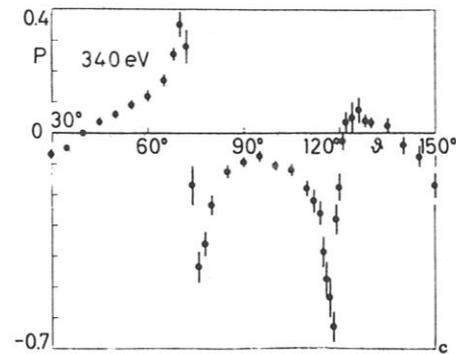
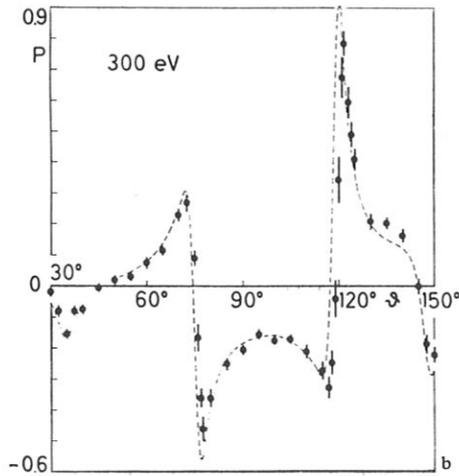
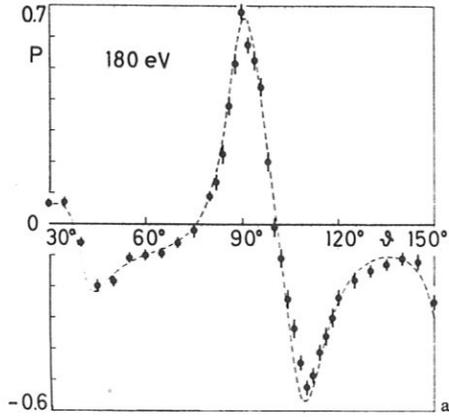
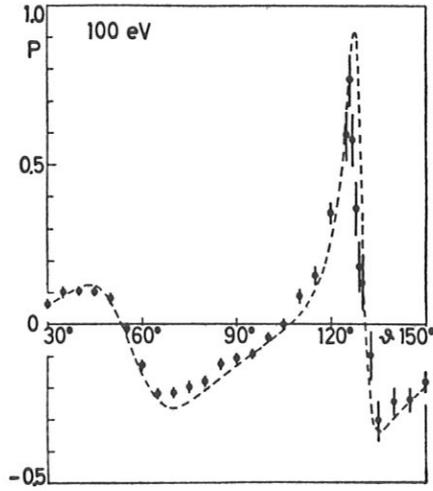
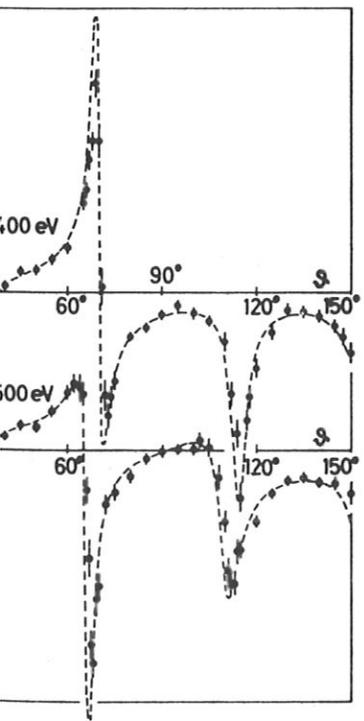
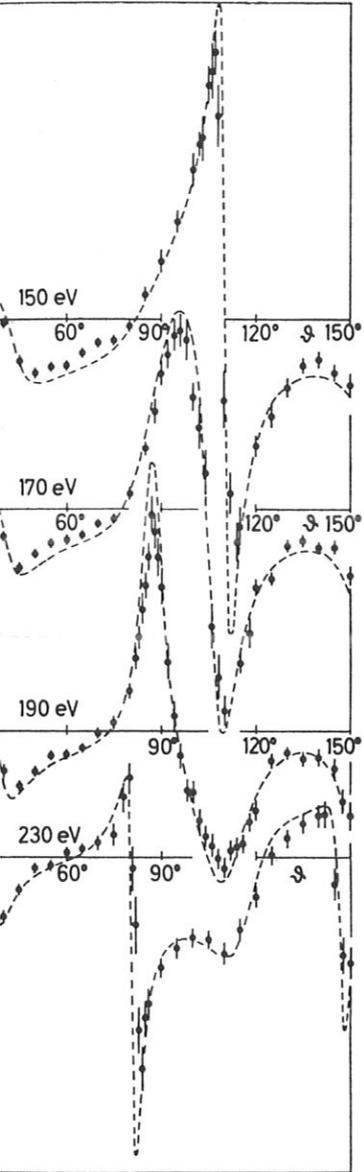
Abb.30 Vergleich der Winkelverteilungen bei elastischer Streuung von Elektronen an Au und Hg nach Reichert (1963).

--o--o-- Au  
-x--x- Hg  
⊗ Normierungspunkte

#### 4.3.2.1.1.2. Spinpolarisation.

Polarisationsmessungen an Atomen mit hoher Kernladungszahl liegen bis jetzt nur an Hg vor (Deichsel, 1961; Deichsel und Reichert, 1965; Steidl, Reichert und Deichsel, 1965; Deichsel und Reichert, 1964; Jost und Kessler, 1966; Jost und Kessler, 1965; Eitel, Jost und Kessler, 1967). Die Abb.31 und 32 zeigen einen Vergleich zwischen experimentellen Ergebnissen und theoretischen Werten für Energien von 100 eV bis 1,7 keV. Man erkennt,

Abb.31 Winkelabhängigkeit des Polarisationsgrades P bei der Streuung an Hg für Elektronenenergien zwischen 100 eV und 1700 eV. Volle Kreise sind Meßpunkte mit statistischen Fehlern, gestrichelte Kurven sind theoretische Werte (Holzwarth und Meister, 1964; unveröffentlichte Werte von Coulthard und von Meister); Winkelauflösung 1°. Nach Jost und Kessler (1966) und Eitel u.a. (1967).



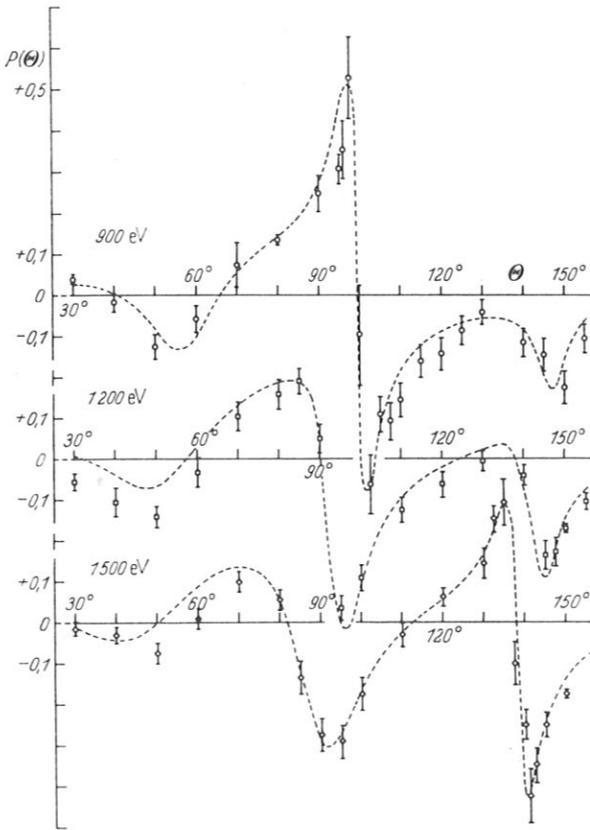
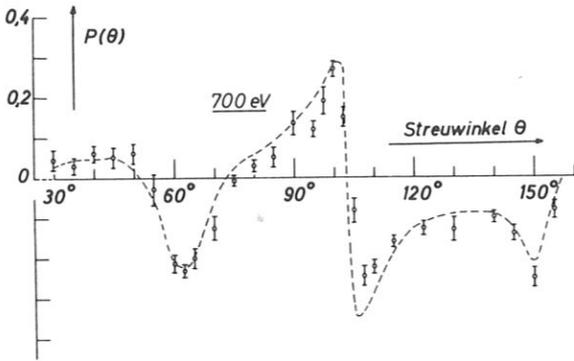


Abb.32

Winkelabhängigkeit des Polarisationsgrades  $P$  für die Streuung an Hg bei Elektronenenergien zwischen 700 eV und 1500 eV.

⊕ Meßpunkte mit statistischen Fehlern (Steidl u.a., 1965; Deichsel und Peichert, 1965) Winkelauflösung  $6^\circ$

---- Theorie, umgerechnet auf  $6^\circ$  Winkelauflösung (Holzwarth und Meister, 1964).

daß die Meßergebnisse bis auf kleine Abweichungen außerordentlich gut mit der Theorie übereinstimmen. Die Diskrepanzen sind wie bei den Winkelverteilungen eine geringe Winkelverschiebung (ca.  $1^\circ$  bis  $2^\circ$ ) bei einigen Elektronenenergien. Durch die Berücksichtigung von Austauschereffekten wird diese Winkelverschiebung fast vollkommen beseitigt, jedoch wird die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment für Energien unter 200 eV zunehmend schlechter, da die Höhe der Extremwerte stark beeinflusst wird, siehe Abb.33 (Walker, 1969). Ob eine zusätzliche Einbeziehung von Polarisationsereffekten diese neu entstandenen Differenzen beseitigen kann, ist noch ungeklärt.

Die theoretisch vorhergesagten Polarisationsereffekte werden im Experiment nicht immer erreicht. Das liegt an dem endlichen Winkelauflösungsvermögen der Apparatur. Wie stark sich das Winkelauflösungsvermögen besonders bei den Polarisationsereffekten bemerkbar macht, geht aus den beiden 900 eV-Kurven in Abb.31 ( $1^\circ$  Winkelauflösung) und Abb.32 ( $6^\circ$  Winkelauflösung) hervor. Bei Polarisationsgraden über 80 % liegen die Elektronenstrahlintensitäten bei maximal  $10^{-12}$  A und der statistische Fehler wird entsprechend groß. Wie schnell sich die Polarisationsereffekte mit der Energie ändern, zeigt Abb.34. Innerhalb eines Energiebereiches von 20 eV bildet sich das positive Polarisationsmaximum bei  $120^\circ$  heraus, um dann innerhalb 40 eV ganz zu negativen Werten durchzuschwingen. Aus Abb.35 kann man entnehmen, daß auch die Energieabhängigkeit des Polarisationsgrades bei einem Streuwinkel von  $90^\circ$  experimentell und theoretisch gut übereinstimmt.

Nach den Angaben mehrerer Autoren sind der DWQ und die Shermanfunktion nicht sehr stark vom Potential im betrachteten Energiebereich abhängig, das unterstreicht Abb.36. Von Yates und Fink (1968) wird der Standpunkt vertreten, daß der DWQ empfindlicher auf das Potential reagiert als die Shermanfunktion und daher die Messung des DWQ, insbesondere bei kleinen Streuwinkeln, eine bessere experimentelle Prüfung der Theorie zulassen sollte. Diese Argumentation ist nicht sehr überzeugend, an Hand der Kurven (Abb.36) und der Tatsache, daß nur für drei verschiedene Elektronenenergien (340, 800, 1700 eV) gerechnet wurde.

Aus der Ähnlichkeit der Winkelverteilungen für Elemente mit nah beieinander liegenden Kernladungszahlen kann man schließen, daß auch bei Gold und Wismut ganz ähnliche Polarisationsereffekte wie bei Quecksilber zu erwarten sind.

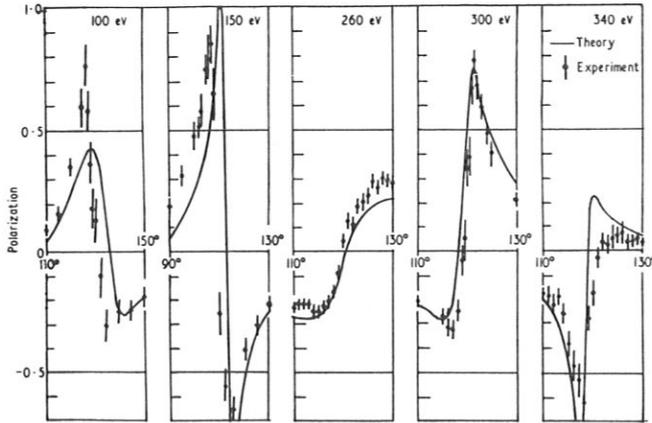


Abb.33 Vergleich von experimentellen und theoretischen Polarisationswerten bei der Streuung an Hg

‡ Experimentelle Ergebnisse von Eitel u.a. (1967)

— Theorie mit Berücksichtigung des Austausches nach Walker (1969)

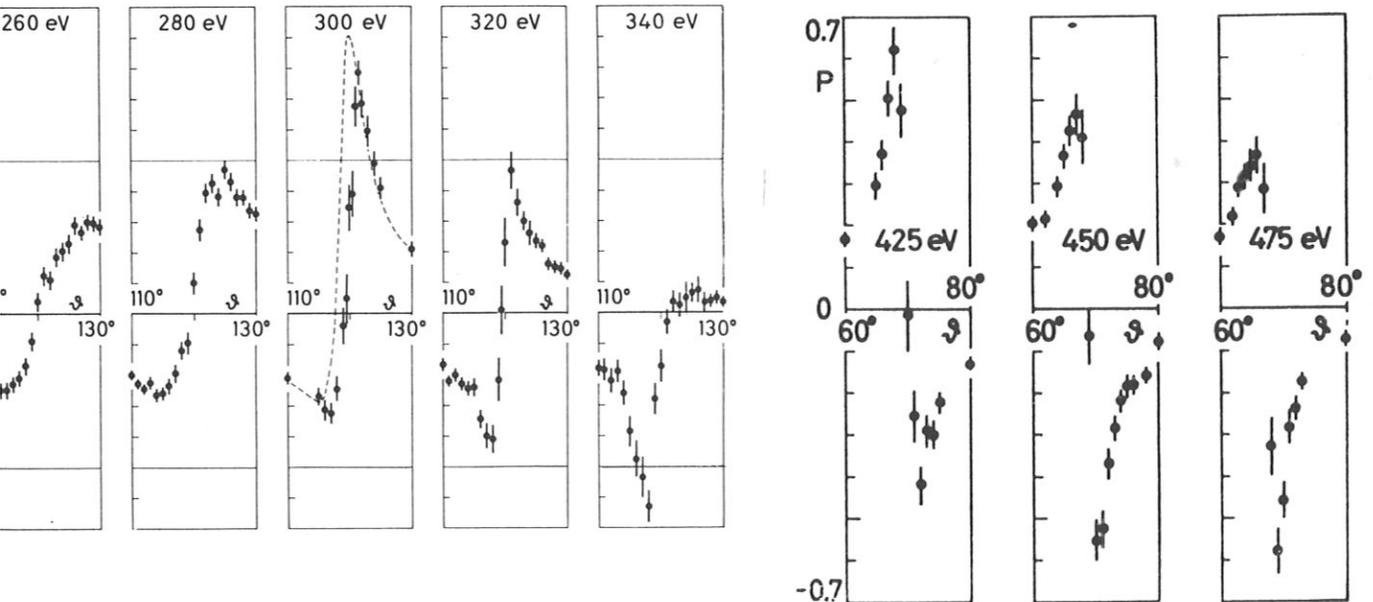


Abb.34 Energie- und Winkelabhängigkeit des Polarisationsgrades P für die Streuung an Hg in der Umgebung von (300 eV, 120°) und (450 eV, 70°).

‡ Meßpunkte mit statistischen Fehlern (Jost und Kessler, 1966; Eitel u.a., 1967) Winkelauflösung 1°

---- Theorie (Holzwarth und Meister, 1964).

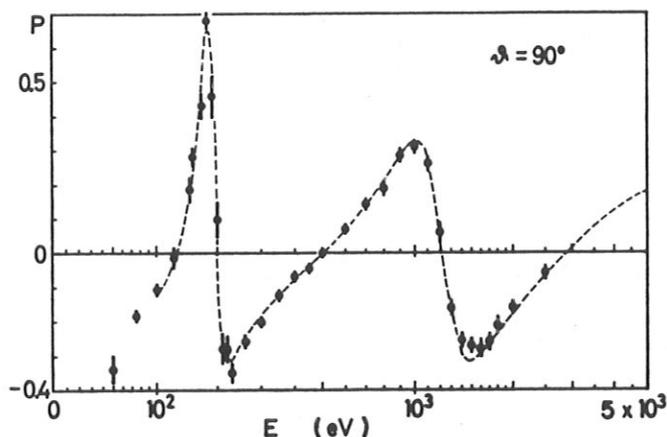


Abb.35 Energie-Abhängigkeit der Polarisation P für die Streuung an Hg zwischen 50 eV und 2,5 keV für einen Streuwinkel  $\vartheta = 90^\circ$  nach Eitel u.a. (1967)

• Meßpunkte mit statistischen Fehlern (Eitel u.a., 1967)  
Winkelauflösung  $1^\circ$ .

---- Theorie (Holzwarth und Meister, 1964).

Um einen klaren Überblick über den betrachteten Energiebereich zu bekommen, wurde der pseudo-logarithmische Maßstab  $\log(1 + E/100 \text{ eV})$  auf der Abszisse benutzt; er ist linear für kleine E und logarithmisch für große E.

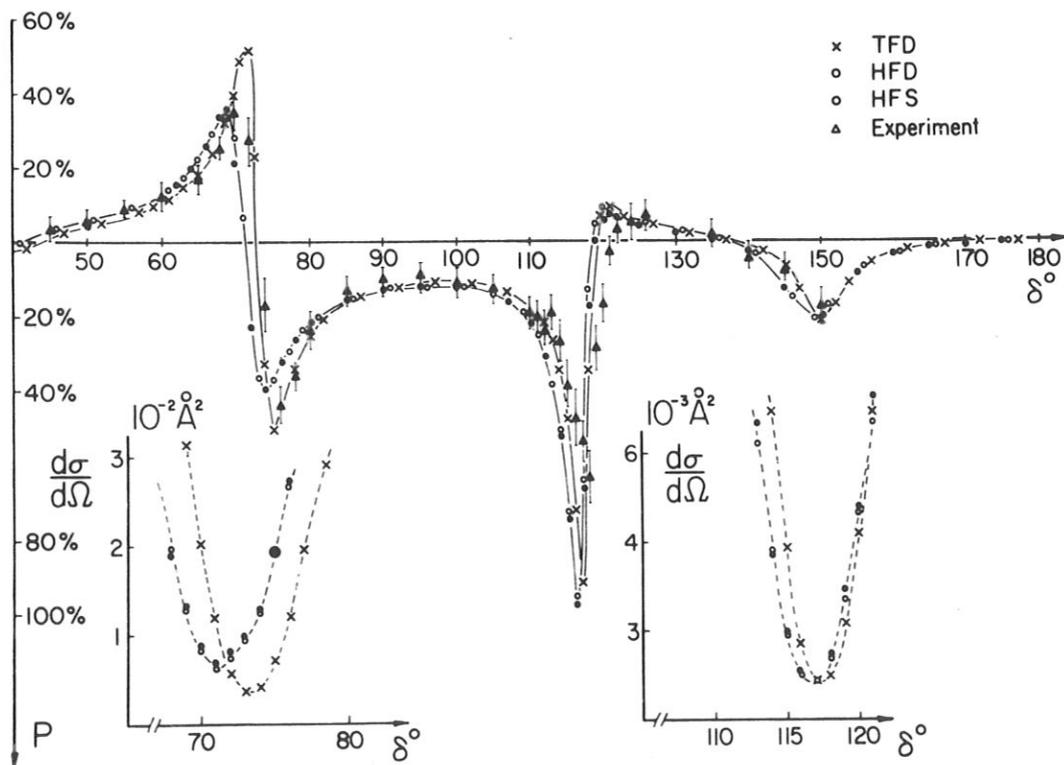


Abb.36 Vergleich von gemessenen Polarisationsgraden und DWQ mit theoretischen Ergebnissen für verschiedene Potentiale. Energie der Elektronen 340 eV. Nach Yates und Fink (1969).

- x TFD Thomas-Fermi-Dirac Potential
- o HFD Hartree-Fock-Dirac Potential
- HFS Hartree-Fock-Slater Potential

4.3.2.1.2. Energien unter 100 eV.

In diesem niederenergetischen Bereich existieren Messungen für Hg (Eitel u.a., 1968; Deichsel u.a., 1966) und Bi (Haug, 1968); Edelgase siehe 4.3.2.2. . Die Abbildung 37 zeigt, daß die Beugungsstruktur in den Winkelverteilungen unterhalb 20 eV nahezu verschwindet.

Weiterhin ist zu erkennen, (siehe Abb.38) daß die Abweichungen von den theoretischen Werten, bei denen weder Austausch noch Polarisierung berücksichtigt wurde, mit fallender Energie immer größer werden. Jedoch wird der qualitative Verlauf der Winkelverteilungen bis herunter zu 25 eV von der einfachen Theorie (ohne Austausch und Polarisierung), insbesondere für Streuwinkel über  $50^\circ$ , gut wiedergegeben. Das trifft nicht für die Polarisationsmessungen (Deichsel u.a., 1966; Wilmers u.a., 1969) zu. Rechnungen mit Berücksichtigung des Austausches (Walker, 1969) zeigen eine bessere Übereinstimmung mit den Experimenten (Abb.39). Die erzielte Verringerung der Diskrepanzen ist im DWQ stärker als in der Spinpolarisation.

Neuere Rechnungen von Weiss (1969) demonstrieren, daß das Austauschpotential

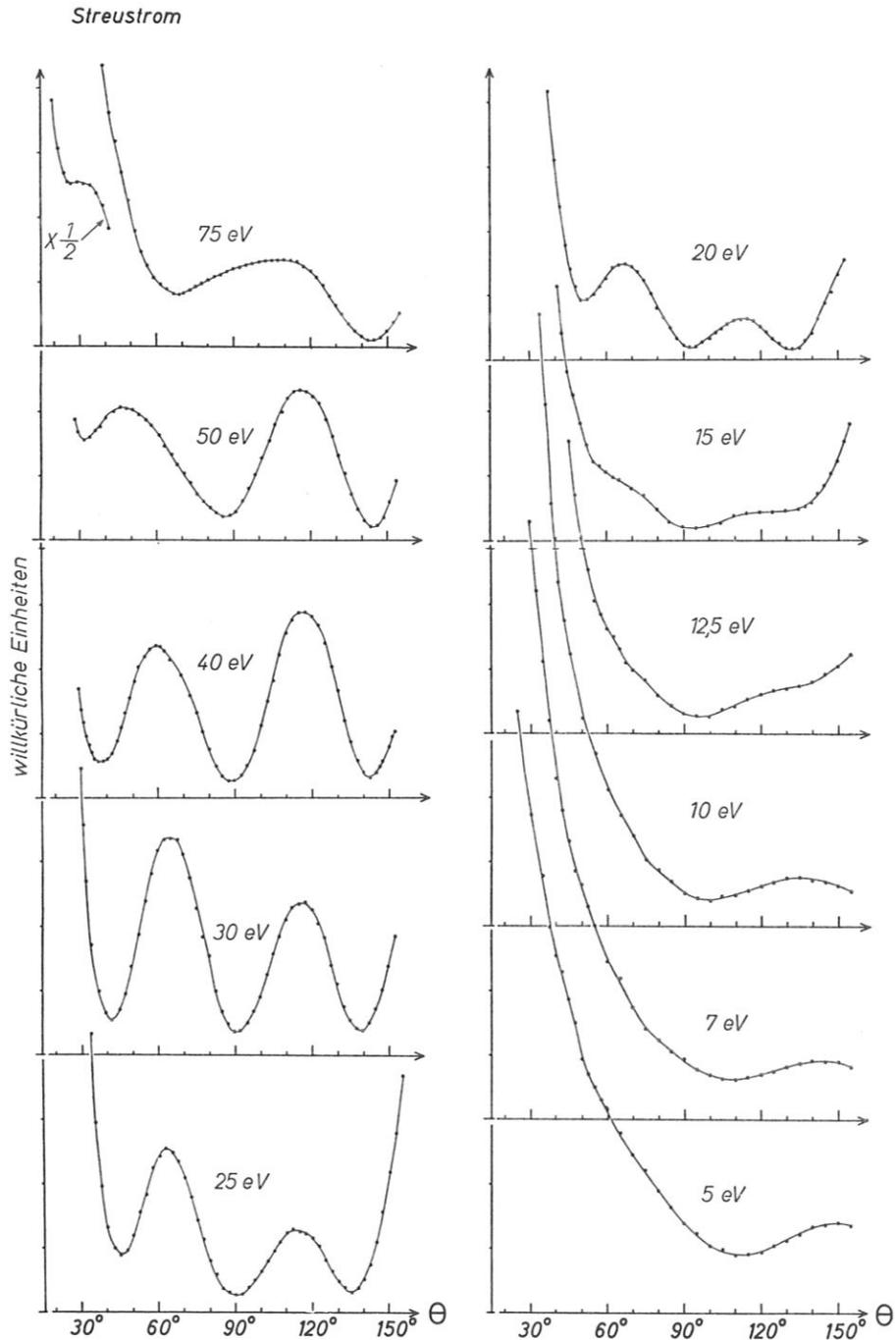


Abb.37

Elastische Elektronenstreuung an Bi im Elektronenenergiebereich von 5 bis 75 eV. Die zu verschiedenen Elektronenenergien gehörenden Kurven sind bezüglich ihrer Ordinaten nicht vergleichbar (Haug, 1968).

$V_A$  (62) als auch die Summe von Austausch- und Polarisierungspotential  $V_p(60)$  die Meßergebnisse nicht wiedergeben (Abb.40). Dagegen kann eine wesentlich bessere Annäherung an die experimentellen

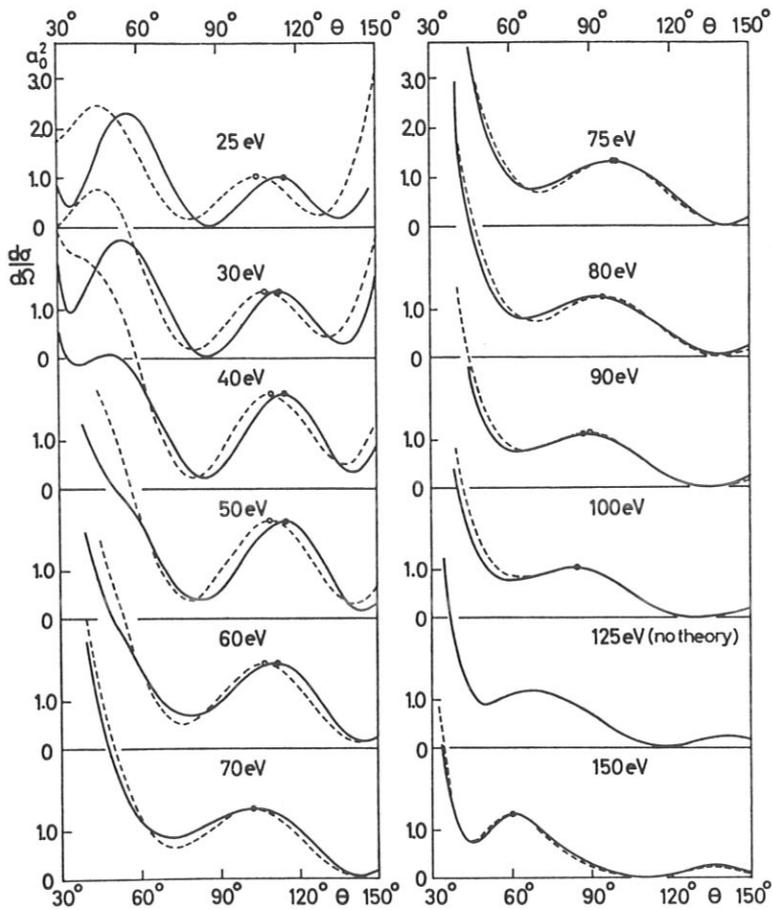


Abb. 38

Elastische Streuung von Elektronen an Hg im Energiebereich von 25 - 150 eV nach Eitel u.a. (1968).

- Experimentelle Werte
- Theorie (Coulthard und Walker, unveröffentlicht)
- Anpassungspunkte für die theoretischen Werte an die experimentellen Kurven

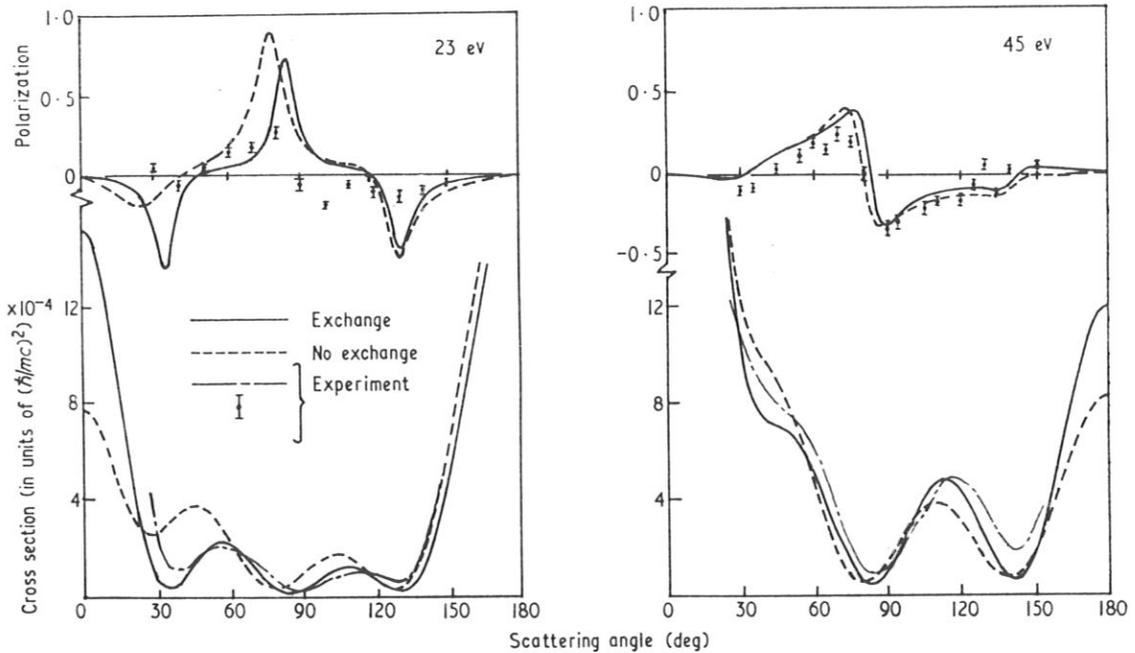


Abb. 39 DWQ und Polarisation bei der Streuung an Hg für Elektronenenergien von 23 und 45 eV.

- Rechnungen mit Berücksichtigung des Austausches (Walker, 1969)
- Rechnungen ohne Berücksichtigung des Austausches (Walker, 1969)

{ — | — } Experimentelle Ergebnisse (Deichsel u.a., 1966)

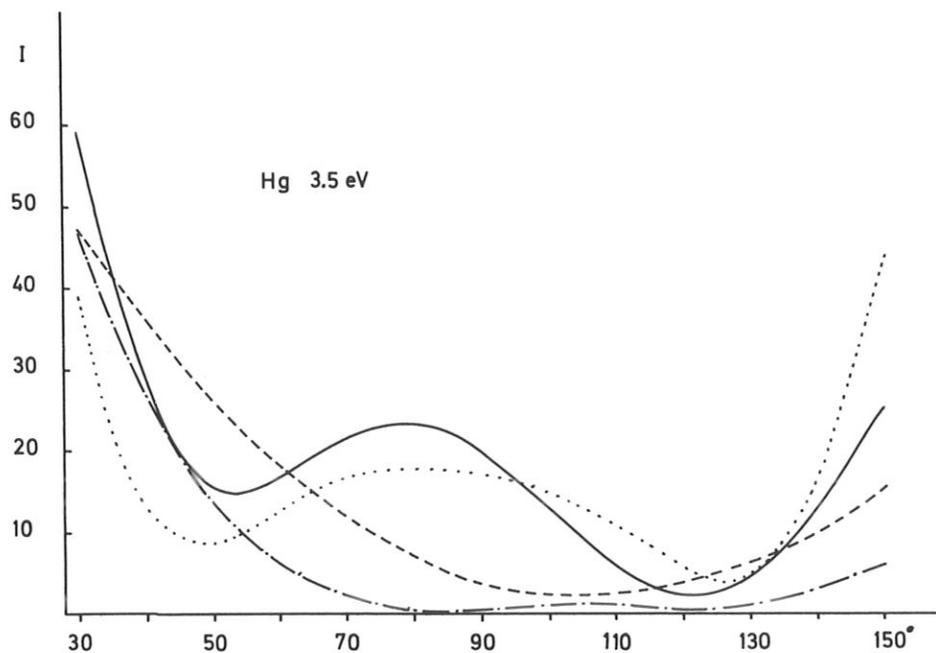


Abb.40 DWQ bei der Streuung an Hg für 3,5 eV-Elektronen und verschiedene Potentiale nach Weiss, (1969).

- Theoretische Werte mit Berücksichtigung des Austausches nach (62)
- .... Theoretische Werte mit Berücksichtigung von Austausch (62) und Polarisierung (60)
- .-.- Theoretische Werte ohne Berücksichtigung von Austausch und Polarisierung
- Experimentelle Ergebnisse (Deichsel u.a., 1966)

Ergebnisse erreicht werden, wenn man nur das Polarisierungspotential (60) verwendet, das durch geeignete Wahl des Parameters  $f$  den Austausch miteinfaßt (siehe 3.4.4.2.). Das bestätigen die Rechnungen von Weiss (1969), siehe Abb.41. Sie ergeben weiterhin, daß die Polarisierung erst unterhalb 1 eV wesentliche Beiträge liefert. Das läßt sich prüfen durch Variation des Parameters  $f$  : große  $f$  nur Polarisierung, kleine  $f$  Austausch und Polarisierung (Übergang natürlich fließend). Für Energien von 45 eV und darüber ist das Polarisierungspotential (60) auf die elastische Streuung an Hg nicht mehr anwendbar (Weiss, 1969). Einen Vergleich der Rechnungen von Walker (nahezu exakte Berücksichtigung des Austausches) und Weiss (pauschale Berücksichtigung von Austausch und Polarisierung durch ein Potential  $V_p$ ) mit Meßergebnissen von Deichsel (1966) für die Streuung von 8 eV-Elektronen an Hg zeigt Abb.42. Man erkennt die qualitative Übereinstimmung der Rechnungen, die den Austausch berücksichtigen, jedoch bewirkt die Hinzunahme der Polarisierung eine bessere Annäherung an die experimentellen Werte.

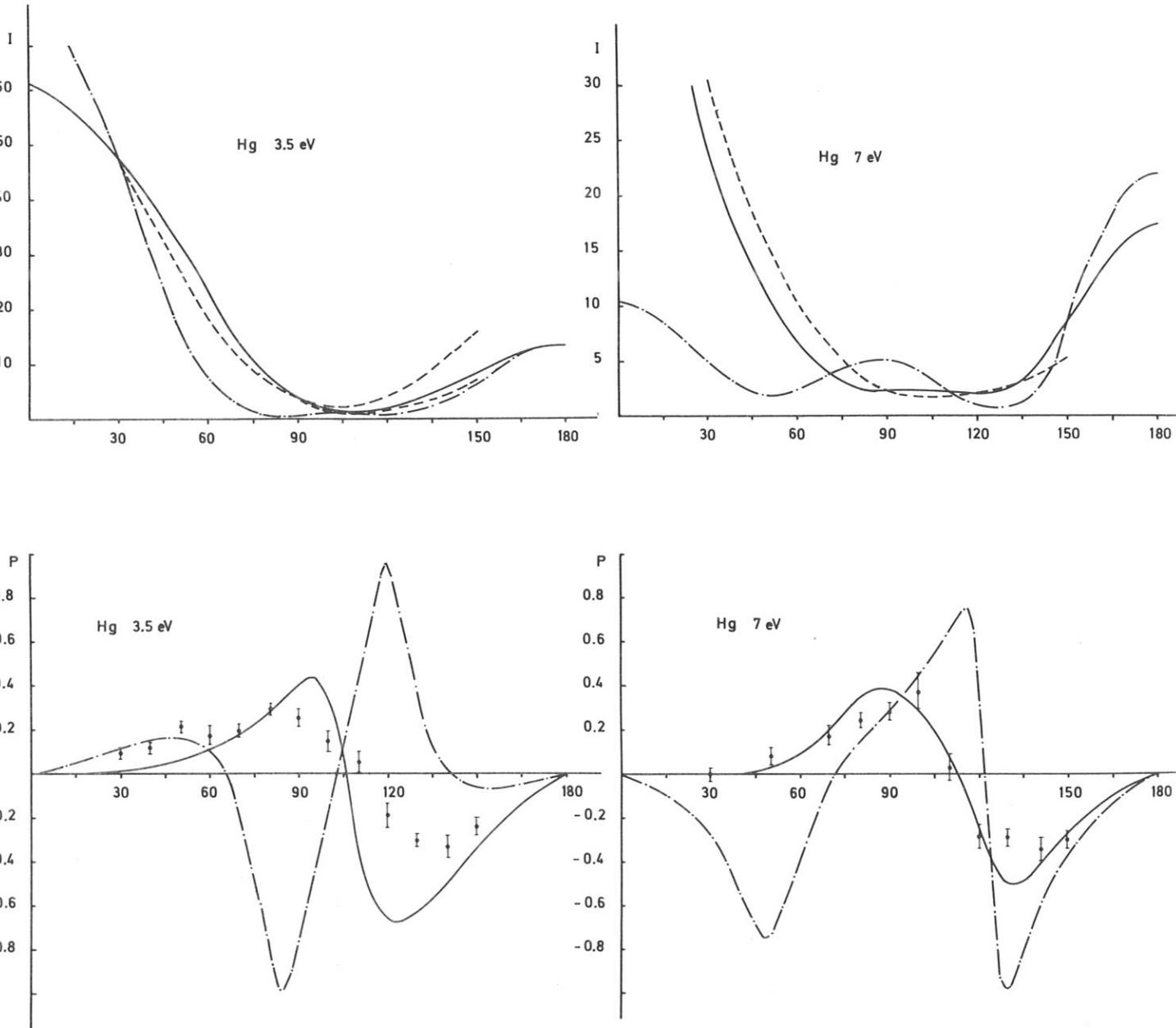


Abb.41 DWQ und Polarisation bei der Streuung an Hg für Energien von 3,5 und 7 eV nach Weiss (1969)

- Theoretische Werte mit Berücksichtigung von Austausch und Polarisierung
- · - Theoretische Werte ohne Austausch und Polarisierung
- ⊙ Experimentelle Ergebnisse (Deichsel u.a., 1966)

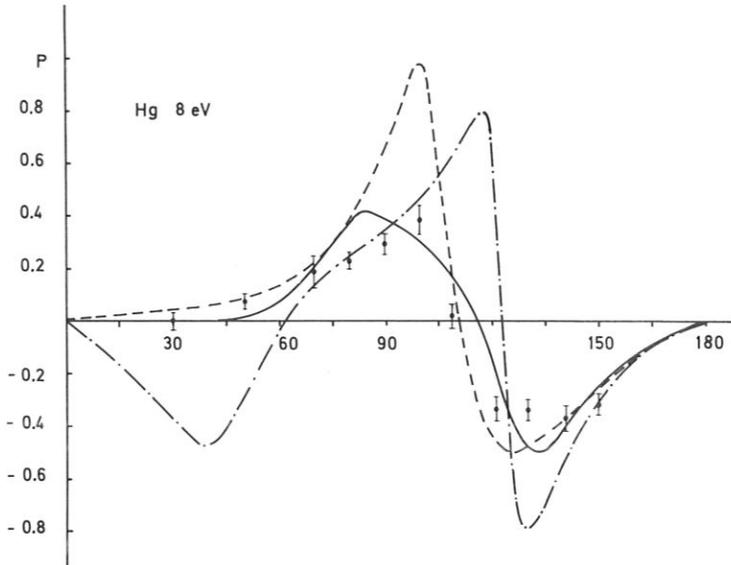


Abb.42 Spinpolarisation für die Streuung an Hg bei 8 eV nach Weiss (1969)

- Theoretische Werte mit Austausch und Polarisierung (Weiss, 1969)
- Theoretische Werte mit Austausch ohne Polarisierung (Walker, 1969)
- · - Theoretische Werte ohne Austausch und Polarisierung (Weiss, 1969)
- ⊥ Experimentelle Werte für 7 eV (Deichsel u.a., 1966).

#### 4.3.2.2. Edelgase.

##### 4.3.2.2.1. Differentieller Wirkungsquerschnitt.

Neuere Streumessungen an den Edelgasen He, Ne, Ar, Kr und Xe liegen für den Energiebereich von 5 eV bis 1 keV vor (Mehr, 1966; Mehr, 1967; Schackert, 1968). Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 43 bis 45 angegeben. Sie lassen die folgenden Gesetzmäßigkeiten erkennen: Die Beugungsstruktur (mindestens zwei Minima im Winkelbereich von  $30^\circ$  bis  $150^\circ$ ) ist um so ausgeprägter, je größer die Kernladungszahl  $Z$  ist. Bei He ( $Z = 2$ ) ist keine Beugungsstruktur vorhanden, bei Ne deutet sie sich schwach an, während sie bei Ar voll ausgebildet ist. Die Beugungsstruktur beginnt bei Elektronenenergien um 10 eV. Die Energie, bei der sie wieder verschwindet, wächst mit steigender Kernladungszahl  $Z$ : ca. 3 keV bei Hg ( $Z = 80$ ), ca. 1,4 keV bei Xe ( $Z = 54$ ), ca. 600 eV bei Kr ( $Z = 36$ ) und ca. 150 eV bei Ar ( $Z = 18$ ). Der Energiebereich, in dem die Beugungserscheinungen auftreten, vergrößert sich mit der Kernladungszahl, ebenso wie der Energiebereich, in dem die Beugungsstruktur am ausgeprägtesten ist: 250 eV - 450 eV bei Hg ( $Z = 80$ ), 80 eV - 150 eV bei Xe und 30 eV - 90 eV bei Ar. Weiterhin steigt die Maximalanzahl der Minima und Maxima mit zunehmender Kernladungszahl im Winkelbereich von  $30^\circ$  bis  $155^\circ$  langsam an: Vier Minima und drei Maxima bei Hg und Xe, drei Minima und zwei Maxima bei Kr, zwei Minima und ein Maximum bei Ar. Daraus folgt, daß im allgemeinen die Minima mit fallender Kernladungszahl flacher werden (siehe Abb.46), und damit auch die Polarisierungsspitzen bei kleiner Kernladungszahl niedriger sein werden. Durch Interpolieren kann man schließen, daß unterhalb einer Kernladungszahl von ca.  $Z = 12$  (Mg) keine Beugungserscheinungen mehr auftreten. - Die Abb. 47 erläutert, daß sich die Winkelverteilungen innerhalb kleiner Energiebereiche sehr merklich ändern können.

Neuere theoretische Rechnungen ohne Berücksichtigung von Austausch und Polarisierung zeigen zwar für Xe bei 300 eV eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen, während für Ar bei 40 eV die Intensitätsverhältnisse zwischen Maximum und Minima nicht richtig wiedergegeben werden (Abb.48). Durch die Hinzunahme von Austauschereffekten in die Rechnungen kann man

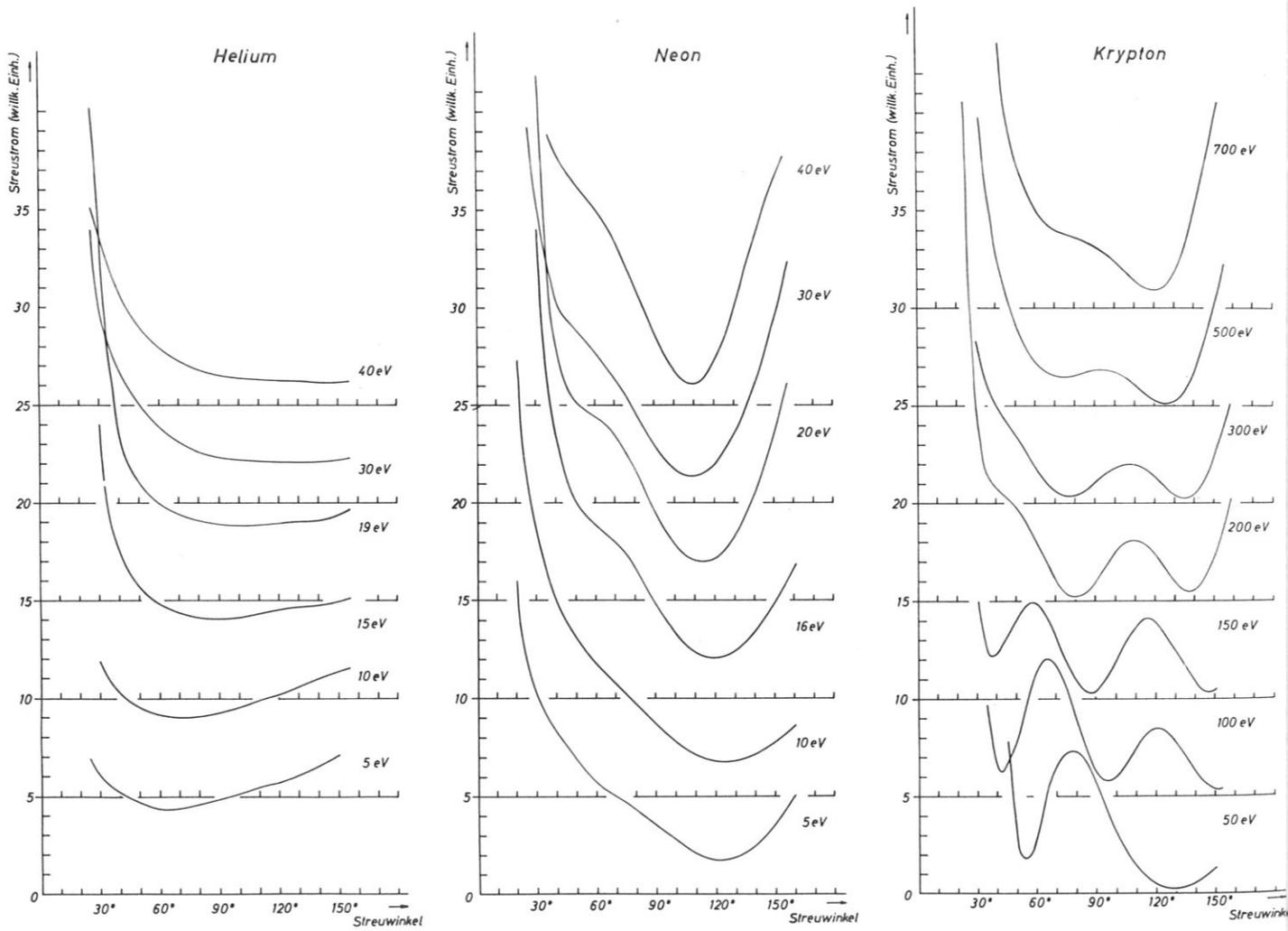


Abb. 43 Winkelverteilungen bei der elastischen Elektronenstreuung an Helium, Neon und Krypton nach Mehr (1966)

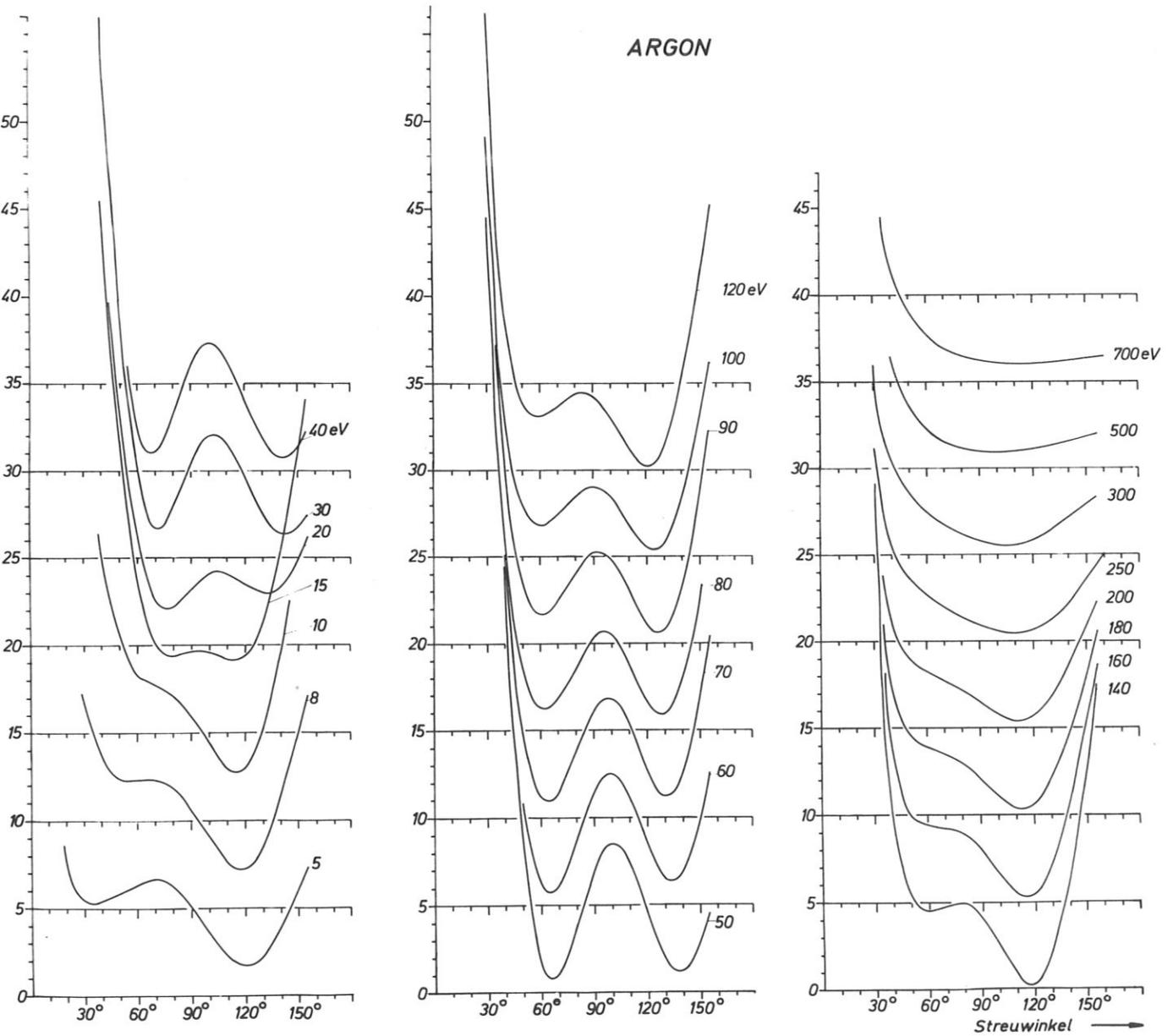


Abb. 44 Winkelverteilungen bei der elastischen Elektronenstreuung an Argon nach Mehr (1966).

XENON

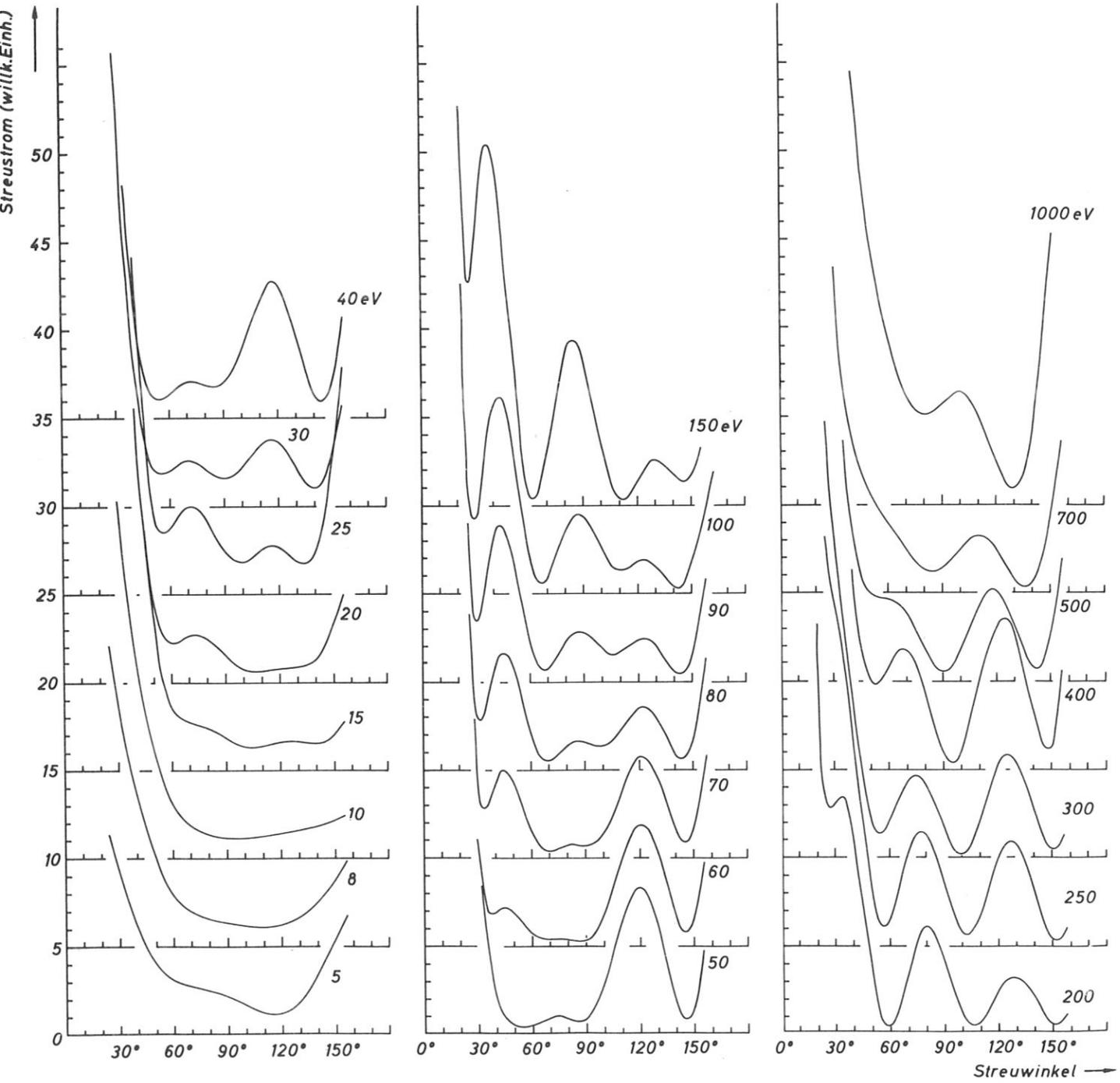


Abb.45 Winkelverteilungen bei der elastischen Elektronenstreuung an Xenon nach Mehr (1966)

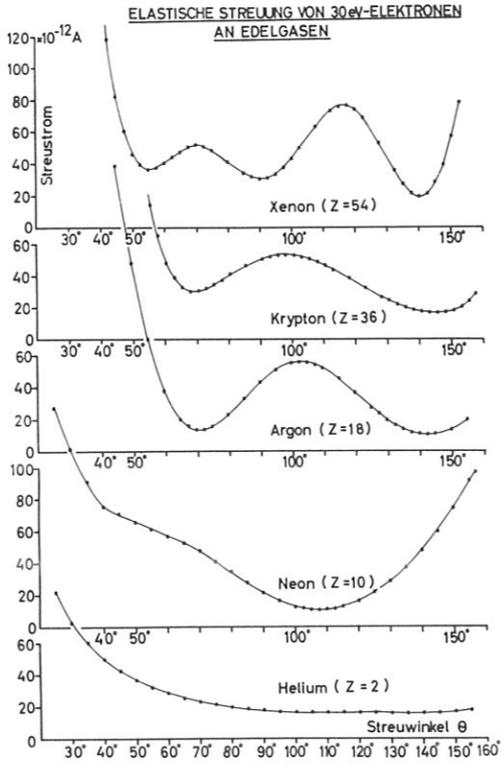


Abb. 46

Elastische Streuung von 30 eV-Elektronen an den Edelgasen von Helium bis Xenon nach Mehr (1967).

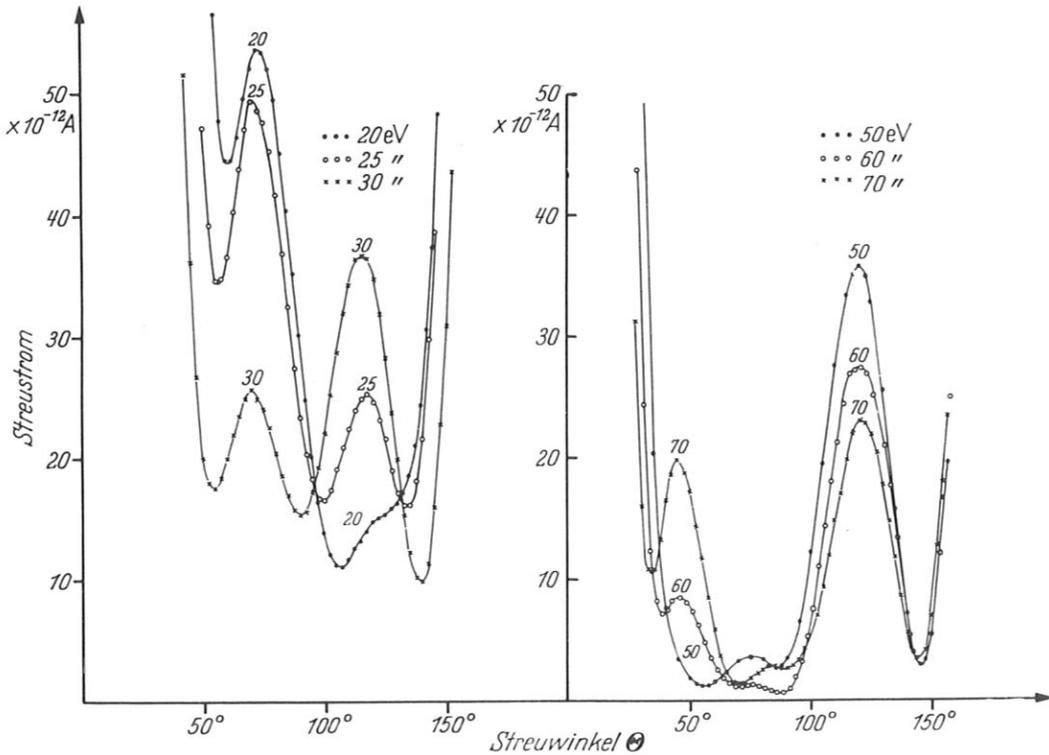


Abb. 47 Elastische Elektronenstreuung an Xe im Energiebereich von 20 eV bis 30 eV und 50 eV bis 60 eV nach Mehr (1967).

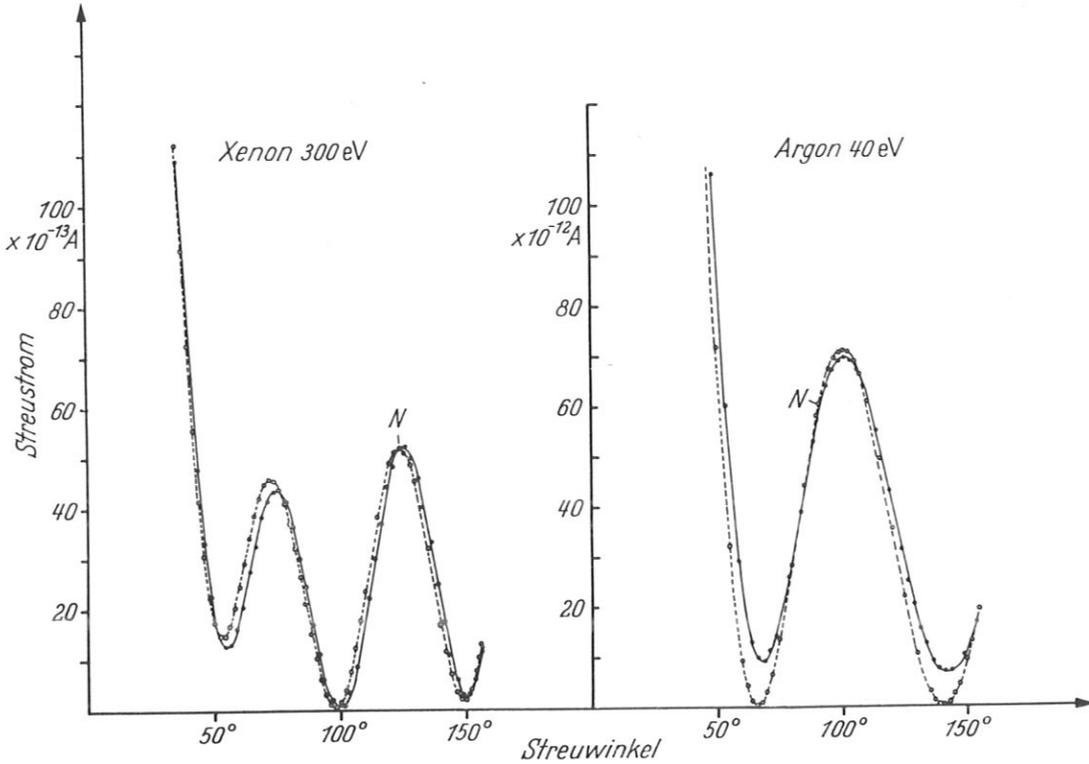
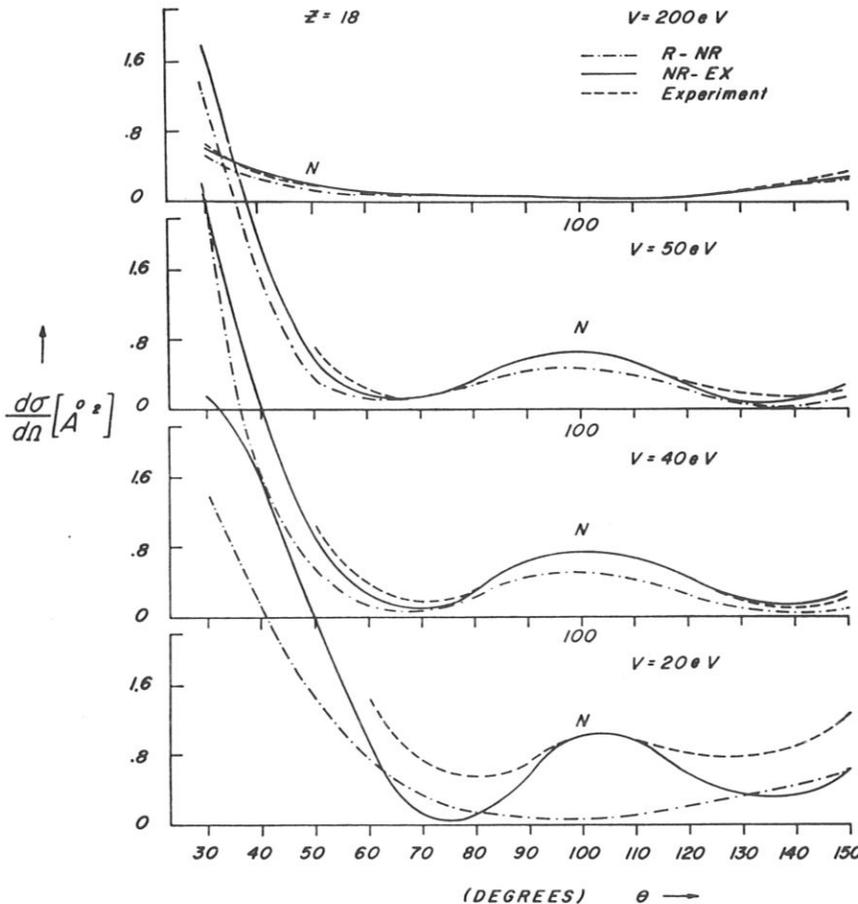


Abb.48 Elastische Elektronenstreuung an Ar und Kr nach Mehr (1967)

... experimentelle Werte  
 ooo theoretische Werte nach Coulthard (unveröffentlicht)  
 N Normierungspunkt

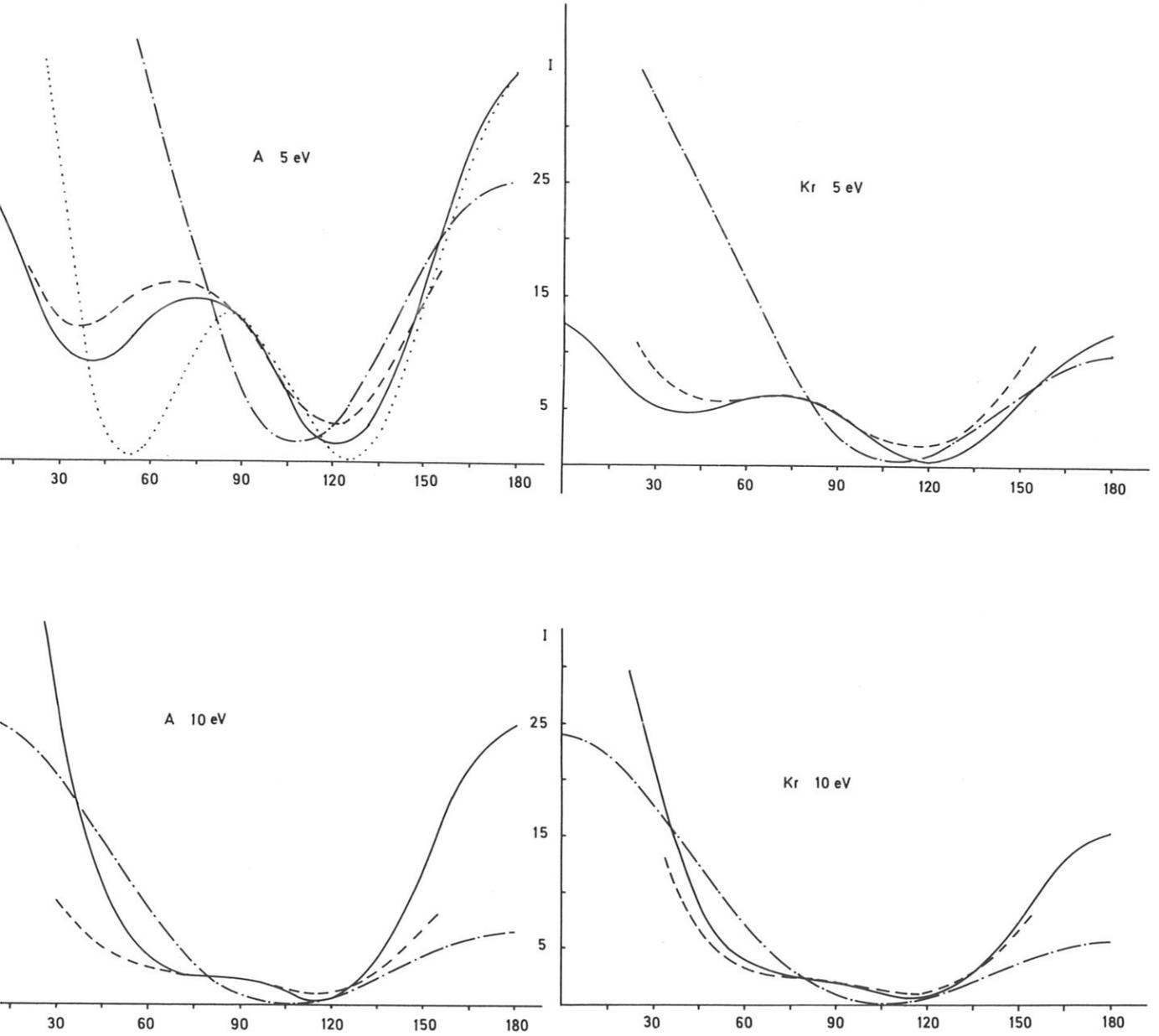


auch für Ar bis hinunter zu 40 eV zu einer guten Übereinstimmung mit den Experimenten kommen (Abb.49). Für Ar und Kr bei 5 eV liefert die Verwendung eines Polarisierungspotentials nach (60) bei der Berechnung des DWQ ein befriedigendes Resultat (Abb.50).

Abb.49

Vergleich des DWQ nach Theorie und Experiment bei der elastischen Elektronenstreuung an Argon nach Yates und Strand (1968)

- - - - relativistische und nicht-relativistische Rechnung  
 ——— nichtrelativistische Rechnung mit Austausch nach Yates und Strand (1968)  
 - · - · - Experiment  
 N Normierungspunkt



bb.50 DWQ für Ar und Kr bei 5 und 10 eV nach Weiss (1969)

- Theoretische Werte mit Austausch und Polarisierung ( $v_p$ )
- .... Theoretische Werte mit Austausch und Polarisierung ( $v_A + v_p$ )
- .- Theoretische Werte ohne Austausch und Polarisierung
- Experimentelle Ergebnisse (Mehr, 1966)

4.3.2.2.2. Spinpolarisation

Die Abbildungen 51 und 52 zeigen Messungen der Spinpolarisation im Winkelbereich von  $30^\circ$  bis  $150^\circ$  für Elektronenenergien zwischen 40 eV und 150 eV. Man entnimmt den Meßergebnissen, daß um so höhere Polarisationsspitzen auftreten, je größer die Kernladungszahl ist. Außerdem nimmt der Winkelbereich, in dem die Spinpolarisation kleiner als z.B. 5% ist, mit fallender Kernladungszahl zu. Die Nulldurchgänge der Spinpolarisation liegen bei den Streuwinkeln, bei denen die entsprechende Winkelverteilung ihre Minima hat. Theorie und Experiment stimmen um so besser überein, je größer die Kernladungszahl des Streuers und je höher die Elektronenenergie ist. Auffallend sind die zum Teil etwas zu kleinen theoretischen Polarisationsgrade. Allerdings sind die theoretischen Kurven ohne Berücksichtigung von Austausch und Polarisierung berechnet worden.

Die Messungen an den Edelgasen geben einen Überblick über die an anderen Atomen zu erwartenden Ergebnisse bei der Elektronenstreuung, sofern die Elektronenenergie nicht zu klein wird.

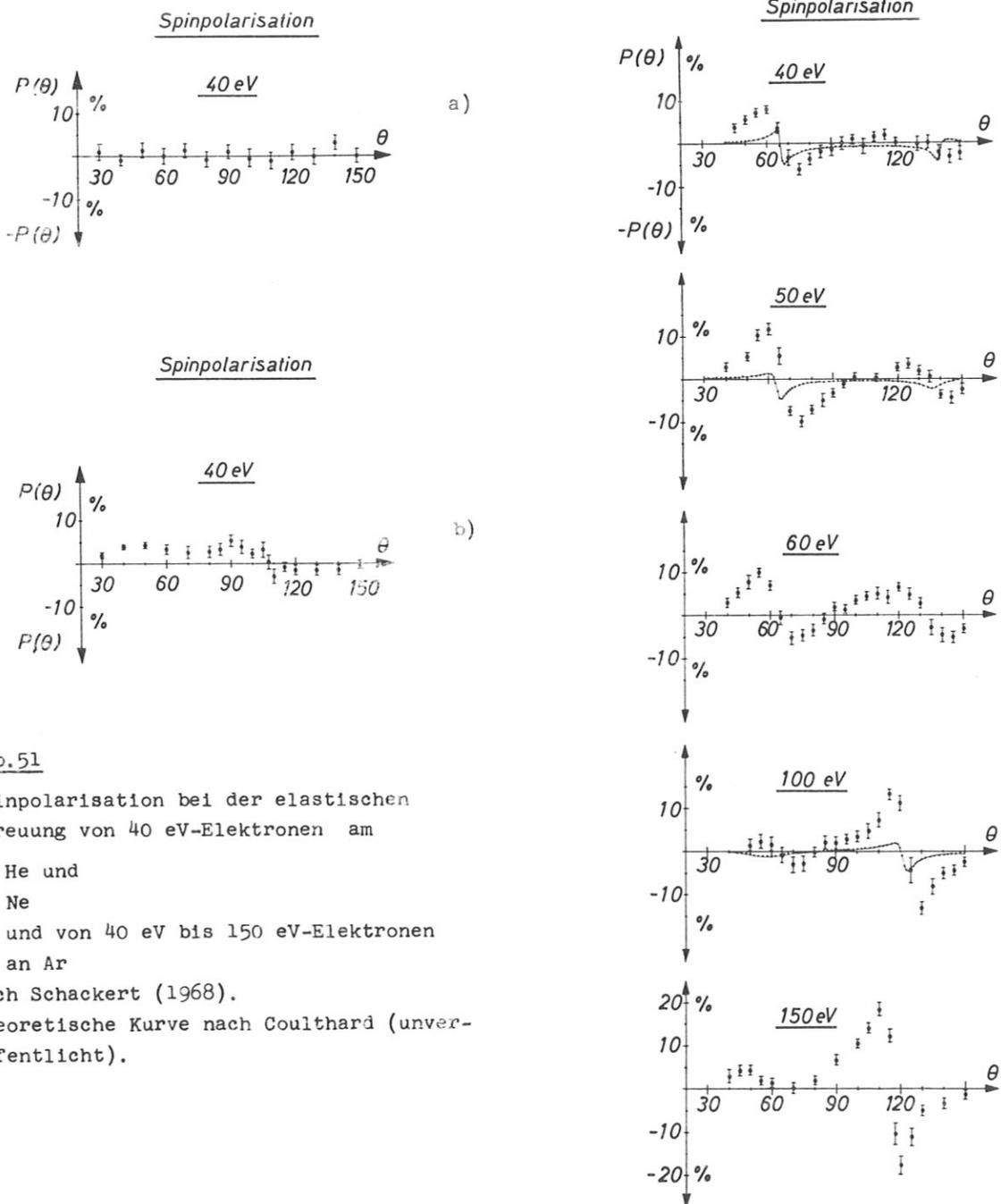


Abb. 51

Spinpolarisation bei der elastischen Streuung von 40 eV-Elektronen am

- a) He und
- b) Ne
- c) und von 40 eV bis 150 eV-Elektronen an Ar

nach Schackert (1968).

Theoretische Kurve nach Coulthard (unveröffentlicht).

c)

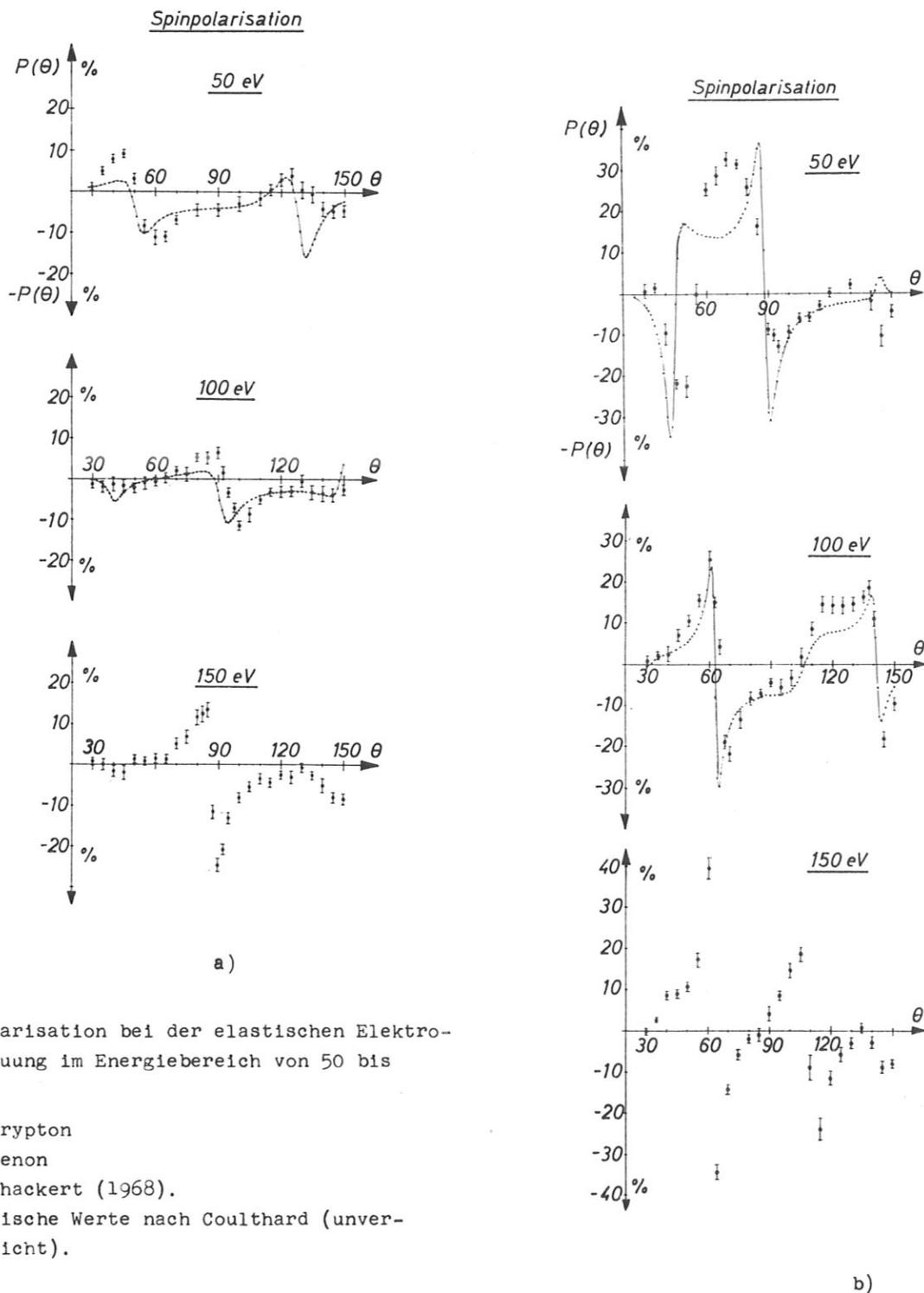


Abb.52

Spinpolarisation bei der elastischen Elektronenstreuung im Energiebereich von 50 bis 150 eV

a) an Krypton

b) an Xenon

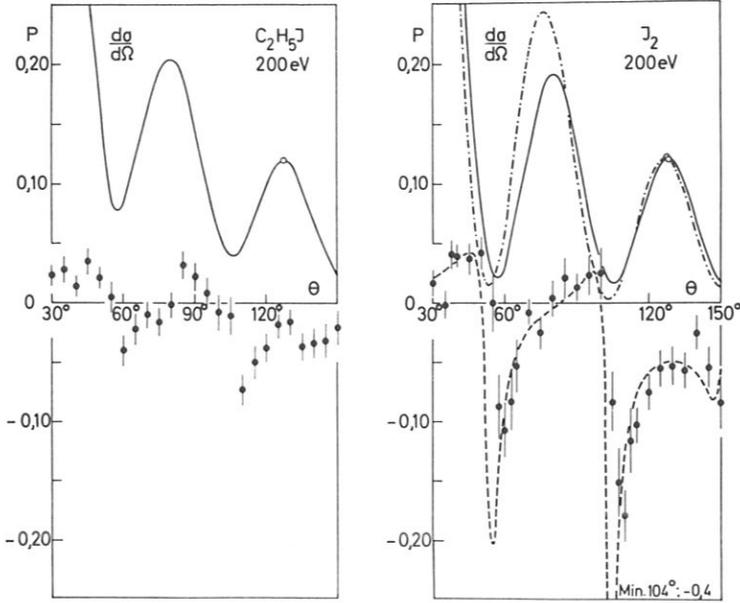
nach Schackert (1968).

Theoretische Werte nach Coulthard (unveröffentlicht).

#### 4.3.2.3. Moleküle

Polarisationsmessungen an anderen Gasen wurden für die Moleküle  $J_2$ ,  $C_2H_5J$ ,  $Bi$  ( $C_6H_5$ ) $_3$ ,  $C_6H_6$ ,  $H_2O$  und  $CCl_4$  ausgeführt.

Ergebnisse für  $J_2$  und  $C_2H_5J$  bei Elektronenenergien von 200 eV, 300 eV und 400 eV zeigt Abb.53. Die Winkelverteilung für  $J_2$  hat genau die gleiche Struktur, was die Lage der Maxima und Minima betrifft, wie für Xe bei den entsprechenden Energien. Das ist nicht verwunderlich, da die Kernladungszahlen für J ( $Z = 53$ ) und Xe ( $Z = 54$ ) nebeneinanderliegen. Daraus läßt sich schließen, daß die Winkelverteilungen für J und  $J_2$  praktisch gleich sind und sich höchstens in der Tiefe der Minima (oder Höhe der Maxima) unterscheiden, wie man es auch



theoretisch erwartet (3.4.6.). Maximale Polarisationsgrade von 26 % findet man bei 400 eV und 96°. Die Übereinstimmung mit der Theorie ist gut, wenn man berücksichtigt, daß bei dem der Rechnung zugrundegelegten Molekülmodell Bindungskräfte und dadurch bedingte Potentialveränderungen (gegenüber dem freien Atom) vernachlässigt wurden. Eine Diskrepanz tritt lediglich in den scharfen Polarisationsspitzen auf; hier sind die experimentellen Polarisationswerte etwas zu klein. Diese Depolarisation kann durch intramolekulare Streuung hervorgerufen werden oder auch in dem in die Rechnung eingesetzten Potential ihre Ursachen haben. Verschiedene Potentialansätze liefern in den Polarisationsspitzen abweichende Ergebnisse, siehe Abb. 54. Einflüsse von Bindungseffekten sind bei den bis jetzt erreichbaren Meßgenauigkeiten nicht feststellbar und erst für kleinere Streuwinkel (die hier nicht behandelt werden) bedeutender.

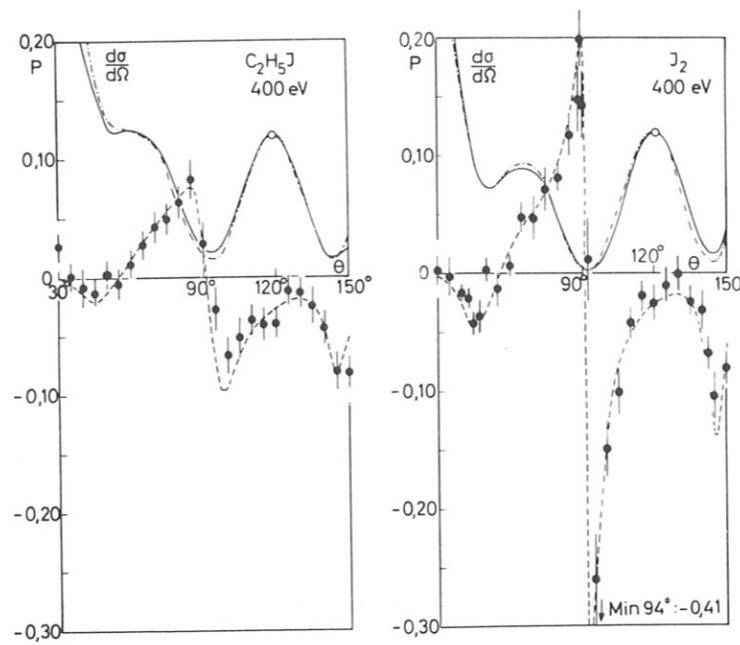
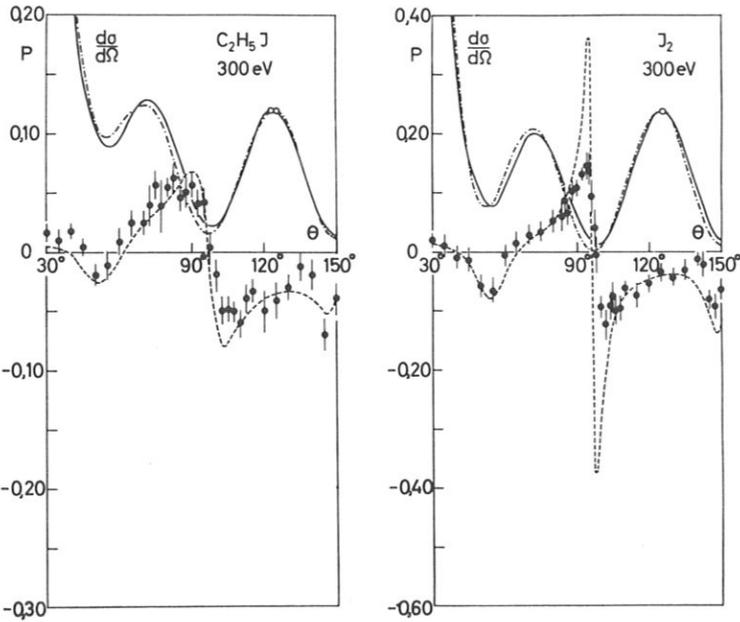


Abb. 53  
 Winkelabhängigkeit der Streuintensität (willk. Einheiten) und des Polarisationsgrades P für drei Elektronenenergien (200 eV, 300 eV, 400 eV) nach der Streuung an  $C_2H_5J$  (links) und  $J_2$  (rechts).  
 — Gemessene Streuintensität  
 -.-.- theoret. berechnete Streuintensität  
 | Experimentelle Spinpolarisation mit statist. Fehler  
 --- theor. berechnete Spinpolarisation  
 (nach Hilgner und Kessler, 1969)

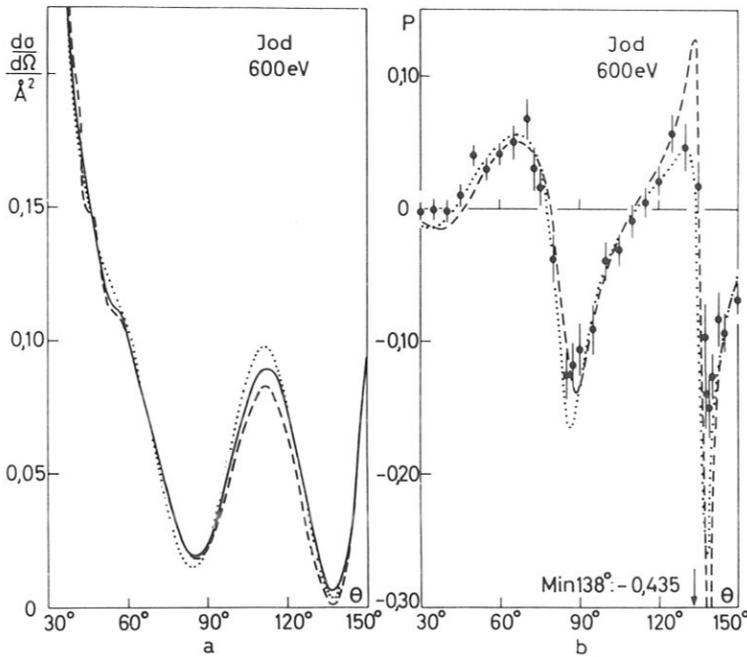


Abb.54 Winkelabhängigkeit der Streuintensität und des Polarisationsgrades P für eine Primärenergie von 600 eV nach der Streuung an Jod.

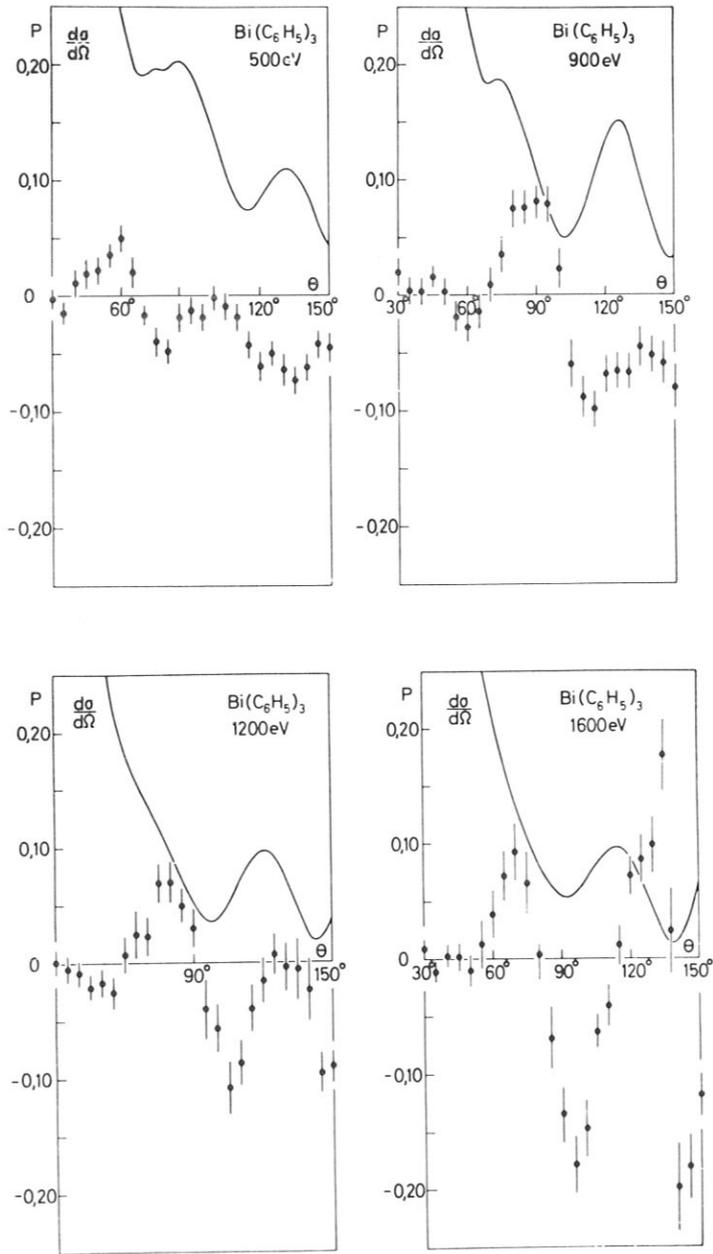
- Gemessene Streuintensität
- theoretisch berechnete Streuintensität (a) und Spinpolarisation (b) nach Yates
- ..... theoretisch berechnete Streuintensität (a) und Spinpolarisation (b) nach Bühring
- Meßpunkte der Spinpolarisation mit statistischem Fehler (nach Hilgner u.a., 1969)

Die Meßergebnisse für  $C_2H_5J$  (Abb.53) zeigen eine recht gute Übereinstimmung mit theoretischen Werten. Die Polarisationserniedrigung bei den Streuwinkeln, bei denen für J die Polarisationsspitzen auftreten, wird vor allem durch die beiden Kohlenstoffatome hervorgerufen, da der Beitrag der Wasserstoffatome vernachlässigbar ist.

Die experimentellen Ergebnisse bei der Streuung an Bi ( $C_6H_5$ )<sub>3</sub> (siehe Abb.55) machen deutlich, daß die Streuung am Bi-Atom mit zunehmender Elektronenenergie besser hervortritt (Polarisationsgrade werden höher). Das bedeutet, daß mit abnehmender Elektronenenergie die Streuung am Molekül immer mehr von den Radikalen  $C_6H_5$ , die mit dem Bi-Atom in einer Ebene liegen, bestimmt wird (Abschirmeffekt). Diesen Sachverhalt demonstriert die Abb.56 für die Streuung an Bi ( $C_6H_5$ )<sub>3</sub> und  $C_6H_6$  bei 100 eV. Die beiden Winkelverteilungen sind fast gleich, während die entsprechende Winkelverteilung für Bi vollkommen anders aussieht (Abb.29). Die Abb.57 veranschaulicht, daß man die Polarisationswerte für Bi ( $C_6H_5$ )<sub>3</sub> nach der Formel

$$P_{Bi(C_6H_5)_3} \approx \frac{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Bi}}{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Bi(C_6H_5)_3}} \cdot P_{Bi}$$

bestimmen kann, wenn die DWQ an Bi und Bi( $C_6H_5$ )<sub>3</sub> und die Shermanwerte für Bi (hier theoretisch) bekannt sind. Voraussetzung ist, daß die Elektronenenergien so hoch sind, daß kein Abschirmeffekt auftritt. Die Anwendbarkeit der Formel bestätigt, daß die Interferenzterme für größere Streuwinkel ( $>50^\circ$ ) nur eine untergeordnete Rolle spielen (siehe 3.4.6.).



**Abb.55** Winkelabhängigkeit der Streuintensität (willkürliche Einheiten) und des Polarisationsgrades  $P$  für vier Elektronenenergien (500, 900, 1200 und 1600 eV) nach der Streuung an Wismuttriphenyl.

— Gemessene Streuintensität  
● Meßpunkte der Spinpolarisation mit statistischem Fehler (nach Hilgner u.a., 1969)

Abb.56

Winkelabhängigkeit der Streuintensität (in willkürlichen Einheiten) und des Polarisationsgrades  $P$  für eine Primärenergie von 100 eV nach der Streuung an Wismuttriphenyl und Benzol.

— Gemessene Streuintensität  
 • Meßpunkte der Spinpolarisation mit statistischem Fehler (nach Hilgner u.a., 1969)

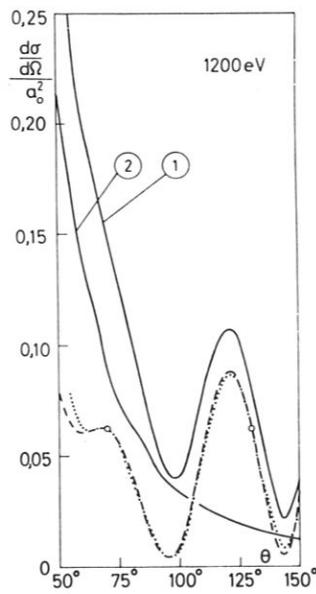
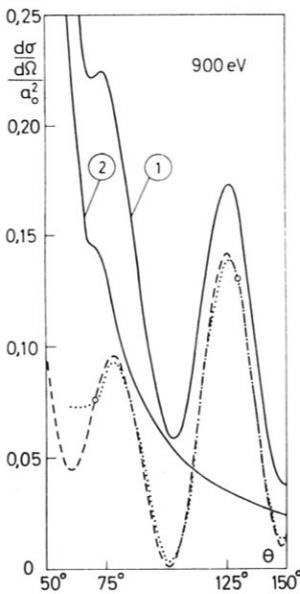
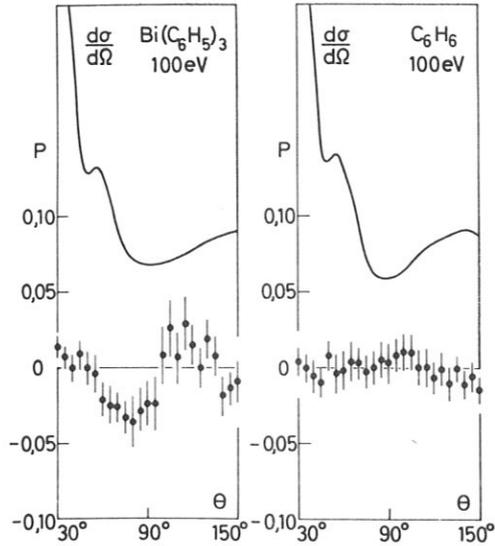


Abb.57

Oberes Teilbild:

----- theoretisch berechnete differentielle Streuquerschnitte für Bi für Primärenergien von 900 und 1200 eV.

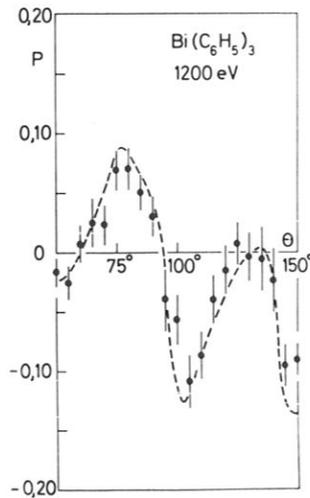
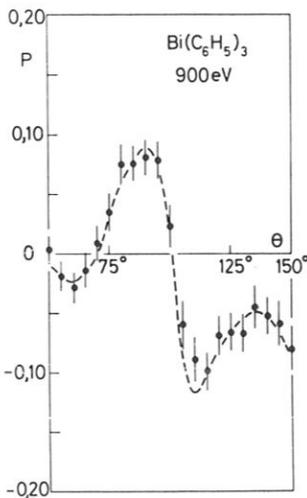
— Angepaßte Winkelverteilungen der Streuintensität nach der Streuung an Wismuttriphenyl (1) und an Benzol (2)

..... Differenzkurve (1) - (2) .

Unteres Teilbild:

Winkelabhängigkeit der Spinpolarisation  $P$  nach der Streuung an Wismuttriphenyl für Primärenergien von 900 und 1200 eV.

• Meßpunkte der Spinpolarisation mit statistischem Fehler,  
 ----- halbempirisch berechneter Verlauf der Polarisation (nach Hilgner u.a., 1969)



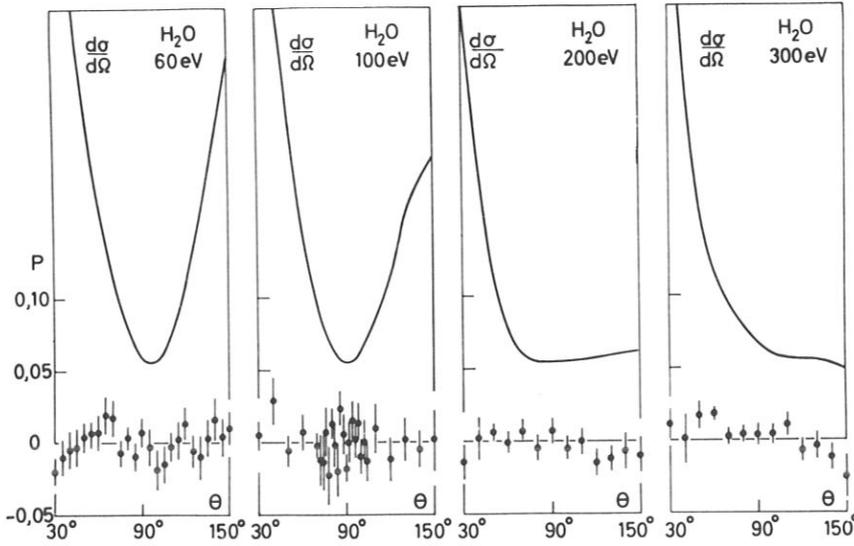


Abb.58 Winkelabhängigkeit der Streuintensität (in willkürlichen Einheiten) und des Polarisationsgrades P für Primärenergien von 60, 100, 200 und 300 eV nach der Streuung an Wasser.

— Gemessene Streuintensität  
 • Meßpunkte der Spinpolarisation mit statistischem Fehler  
 (nach Hilgner u.a., 1969).

Die Bedingung für diese Näherungsformel, nämlich daß  $P_{C_6H_5}$  klein ist, ist gut bestätigt, wie Abb.56 zeigt. Elemente mit kleiner Kernladungszahl liefern nur unbedeutende Polarisationseffekte, wie schon bei der Streuung an Edelgasen ausgeführt wurde. Dasselbe zeigen auch die experimentellen Ergebnisse der Streuung an  $H_2O$  in Abb.58.

Ein weiteres Beispiel ist die Streuung an  $CCl_4$  (Abb.59). Die Streuung an dem einen C-Atom (im Schwerpunkt eines Tetraeders) ist vernachlässigbar, trotzdem zeigen Winkelverteilung und Spinpolarisation eine

andere Winkelabhängigkeit, als man es von dem dem Cl ( $Z = 17$ ) benachbarten Ar ( $Z = 18$ ) erwarten würde. Insbesondere sind die gemessenen Polarisationswerte zu gering. Das ist möglicherweise auf die intramolekulare Mehrfachstreuung zurückzuführen.

#### 4.3.2.4. Einfluß der Mehrfachstreuung

Die experimentellen Meßergebnisse sind nur dann mit der Theorie vergleichbar, wenn man dafür sorgt, daß praktisch Einzelstreuung vorliegt. Das ist bei einem Dampfstrahl als Streuer dann gegeben, wenn die Dichte im Strahl nicht zu hoch wird, oder bei einem festen Target dann, wenn es hinreichend dünn ist. Es soll nun gezeigt werden, wie sich eine Erhöhung der Dampfdichte und damit die Mehrfachstreuung auf die Winkelverteilung und Polarisationskurven auswirkt. Diesbezügliche Messungen wurden an Hg-Dampfstrahlen durchgeführt (Eitel u.a., 1968).

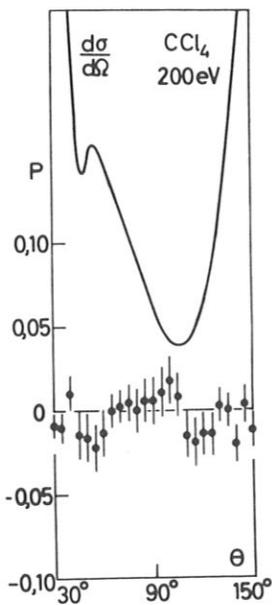


Abb.59 Winkelabhängigkeit der Streuintensität (in willkürlichen Einheiten) und des Polarisationsgrades P für eine Primärenergie von 200 eV nach der Streuung an Tetrachlorkohlenstoff.

— Gemessene Streuintensität  
 • Meßpunkte der Spinpolarisation mit statistischem Fehler (nach Hilgner u.a., 1969)

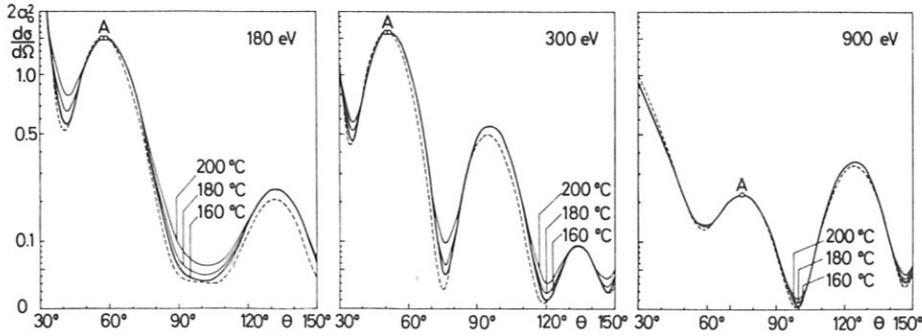


Abb.60 Einfluß der Ofentemperatur (Targetdichte) auf die Winkelverteilungen von elastisch an Hg gestreuten Elektronen bei Energien von 100 eV, 300 eV, 900 eV

— Experiment (Eitel u.a., 1968)  
 ---- Theorie (Einzelstreuung) (Holzwarth und Meister, 1964)  
 A Anpassungspunkte  
 Ordinate mit pseudologarithmischem Maßstab  
 (siehe auch Abb.35).

Abb.60 zeigt den Einfluß der Mehrfachstreuung für drei verschiedene Elektronenenergien: 180 eV, 300 eV und 900 eV. Als Parameter der Kurven ist die Temperatur des Ofens angegeben, die zugleich ein Maß für die Dichte des Dampfstrahles ist. Die Flächendichte ändert sich im Temperaturbereich von 160° C bis 200° C um den Faktor 6 bis 8. Man erkennt deutlich, daß bei einer Erhöhung der Dampfdichte die Minima aufgefüllt werden, und zwar die Minima um so stärker, die besonders schmal und tief sind. Der Gesamtverlauf der Winkelverteilungen wird sonst kaum verändert.

Für die gleichen Energien wie oben: 180 eV, 300 eV und 900 eV sind in Abb.61 die Polarisationskurven als Funktion der Ofentemperatur aufgetragen. Hier zeigt sich genau das erwartete Verhalten, daß insbesondere die Polarisationsspitzen mit zunehmender Ofentemperatur stark abgetragen werden, und zwar um so stärker, je schmaler die Polarisationsspitzen sind. Andererseits sinkt in Gebieten, wo die Polarisation über einen großen Winkelbereich daselbe Vorzeichen behält, die Spinpolarisation kaum ab, siehe z.B. 300 eV, 80° - 115°. Außerdem kann man erkennen, daß die Mehrfachstreuung mit höherer Energie einen geringeren Einfluß ausübt.

#### 4.4. Streuung an festen Targets.

##### 4.4.1. Energien über 10 keV.

Messungen der Winkelverteilungen bei der elastischen Streuung an dünnen Folien wurden im letzten Jahrzehnt hauptsächlich durchgeführt, um die theoretisch erwarteten Abschirmeffekte zu bestätigen. Während frühere Messungen, die in (Kessler, 1959; Spiegel u.a., 1959) zusammengefaßt sind, unterschiedliche Ergebnisse lieferten, zeigen die Messungen von Motz u.a. (1963) und Dougal (1965) an Au, Sn, Al-Folien eine Übereinstimmung mit Rechnungen, die eine Abschirmung durch Verwendung eines Hartree-Potentials berücksichtigten. Dieser theoretische Ansatz wurde inzwischen durch Messungen von Kessler und Weichert (1968) an gasförmigem Quecksilber auch quantitativ recht gut bestätigt (siehe 4.3.1.). Die Polarisationserscheinungen in diesem Energiebereich sind als Mott-Streuung bekannt und spielen als Polarisationsnachweis heute die größte Bedeutung, insbesondere auch für die Polarisation der Elektronen des  $\beta$ -Zerfalls.

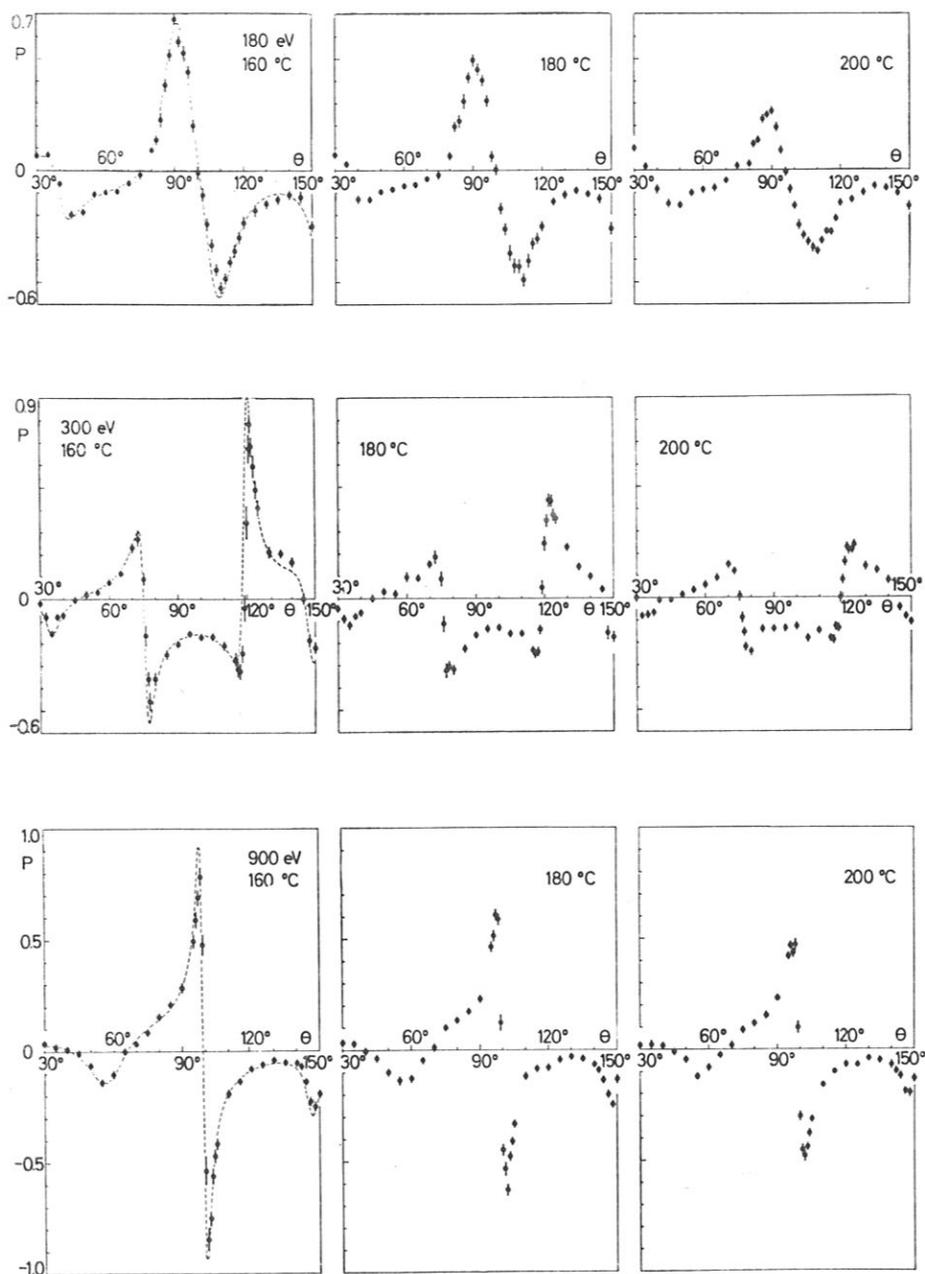


Abb. 61 Einfluß der Ofentemperatur auf den Polarisationsgrad von elastisch an Hg gestreuten Elektronen mit Energien von 180 eV, 300 eV und 900 eV.

◆ Meßpunkte mit statistischen Fehlern (Eitel u.a., 1968)  
 --- Theorie (Einzelstreuung) (Holzwarth und Meister, 1964)

Die von Mott 1929 vorhergesagten Polarisierungseffekte wurden erstmals von Shull u.a. (1943) experimentell bestätigt. Inzwischen liegen verschiedene Bestimmungen der Shermanfunktion vor, sowohl durch Doppelstreuung (Shull u.a., 1943; Shinohara und Ryu, 1950; Ryu, 1952, 1953; Ryu u.a., 1953; Pettus, 1958; Nelson und Pidd, 1959; Spivak u.a., 1961; Apalin u.a., 1962; Mikaelyan u.a., 1963; van Klinken, 1965, 1966) von Elektronen als auch mit  $\beta$ -Zerfalls-Elektronen (Bienlein u.a., 1959; Bienlein u.a., 1959; Ladage, 1961; Eckardt u.a., 1964). Die Messungen erstrecken sich über einen Energiebereich von 25 keV bis 261 keV und über einen Winkelbereich von  $30^\circ$  bis  $150^\circ$ . Man ist gezwungen, an sehr dünnen Folien (die hieraus resultierenden Fehlerquellen werden im letzten Abschnitt behandelt) zu streuen, um möglichst

Einzelstreuung vorzufinden. Die Messungen wurden vorwiegend an Goldfolien durchgeführt, da hier infolge der hohen Kernladungszahl ( $Z_{Au} = 79$ ) der Meßeffect am größten ist. Es existieren jedoch auch Messungen (Bienlein u.a., 1959) an Ce ( $Z = 58$ ), Ag ( $Z = 47$ ) und Cu ( $Z = 29$ ). Qualitativ stimmen die Meßergebnisse mit den theoretischen Kurven überein, jedoch liegt bis jetzt noch keine quantitative Zuordnung vor.

Abb.62 zeigt Messungen bei 120 keV, 155 keV und 209 keV und einen festen Streuwinkel von  $120^\circ$  für verschiedene Elemente. Man erkennt deutlich das Abnehmen des Polarisationsgrades mit kleiner werdender Kernladungszahl  $Z$ . Ein Vergleich mit der Theorie zeigt, daß die Meßwerte meistens etwas zu niedrig liegen, besonders bei kleinerer Energie.

Die Winkelabhängigkeit der Shermanfunktion für Gold und verschiedene Energien zwischen 64 keV und 245 keV zeigt Abb.63. Die ausgezogenen Kurven sind die theoretischen Werte für Au von Holzwarth und Meister (1964), die gestrichelten Kurven die von Lin (1964) (120 keV). Wie früher gezeigt wurde, unterscheiden sich die theoretischen Kurven von Lin und Holzwarth und Meister um maximal 5 % im gesamten betrachteten Energiebereich. Die Kurven von Holzwarth und Meister liegen oberhalb eines Streuwinkels von  $120^\circ$  unterhalb denen von Lin, im Winkelbereich von  $100^\circ$  bis  $120^\circ$  schneiden sich die Kurven und unterhalb  $100^\circ$  liegen die Kurven von Holzwarth und Meister oberhalb denen von Lin (Bühning, 1968), wenn man  $S$  betrachtet. Nach den experimentellen Ergebnissen von Kessler und Weichert (1968) sollten die Lin (Bühning)-schen Ergebnisse korrekt sein.

Darauf deuten sowohl die Ergebnisse von Bienlein u.a. (1959) für 155 keV hin, als auch die Messungen von Mikaelyan (1963) bei 204 keV. Leider existieren hier von Lin keine Rechnungen. Bei den anderen Energien liegen die Meßwerte zum Teil etwas zu tief. Im großen und ganzen ist jedoch eine, wenn auch nicht quantitative, so doch gute qualitative Übereinstimmung der zuverlässigsten Messungen von Bienlein u.a. (1959), Mikaelyan u.a. (1963) und van Klinken (1965, 1966) mit der Theorie vorhanden. Allerdings ist bei den Polarisationsmessungen die Entscheidung zugunsten der verschiedenen Rechnungen bis jetzt nicht so eindeutig zu fällen wie bei den Messungen der Wirkungsquerschnitte am Hg-Gas.

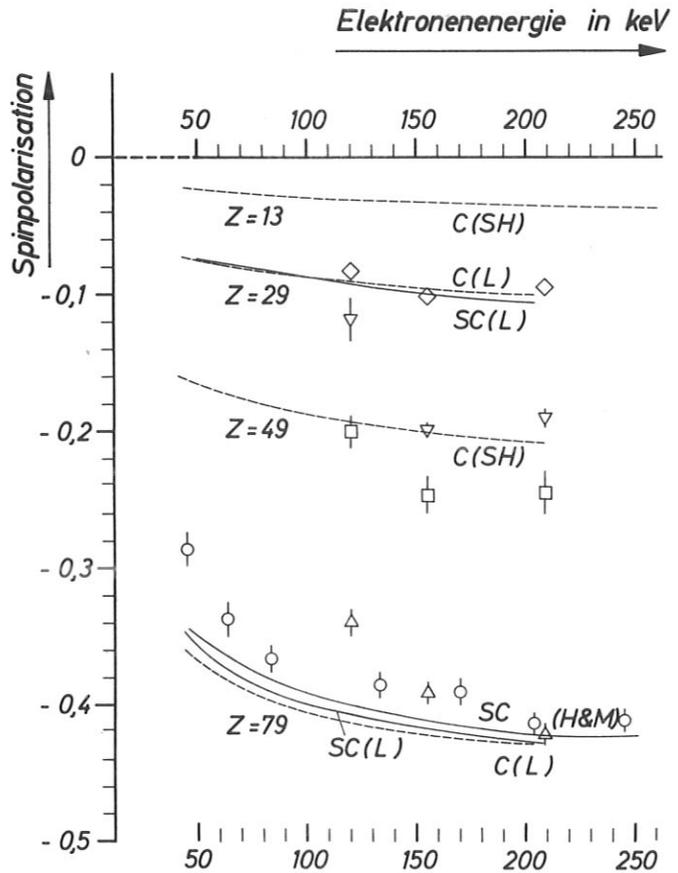


Abb.62 Spinpolarisation nach der Streuung an verschiedenen Elementen (Al, Cu, Cd und Au) als Funktion der Elektronenenergie bei einem Streuwinkel von  $120^\circ$ .

Theoretische Werte:

- Coulombpotential nach Sherman (1956) SC(SH)
- Hartreepotential nach Lin (1954) SC(L)
- relativistisches Hartreepotential nach Holzwarth und Meister (1964) SC(H&M)

Experimentelle Ergebnisse:

- ◊ Cu ( $Z = 29$ ) nach Bienlein u.a. (1959)
- ▽ Ag ( $Z = 47$ ) nach Bienlein u.a. (1959)
- ◊ Ce ( $Z = 58$ ) nach Bienlein u.a. (1959)
- △ Au ( $Z = 79$ ) nach Bienlein u.a. (1959)
- ◊ Au ( $Z = 79$ ) nach van Klinken (1965, 1966)

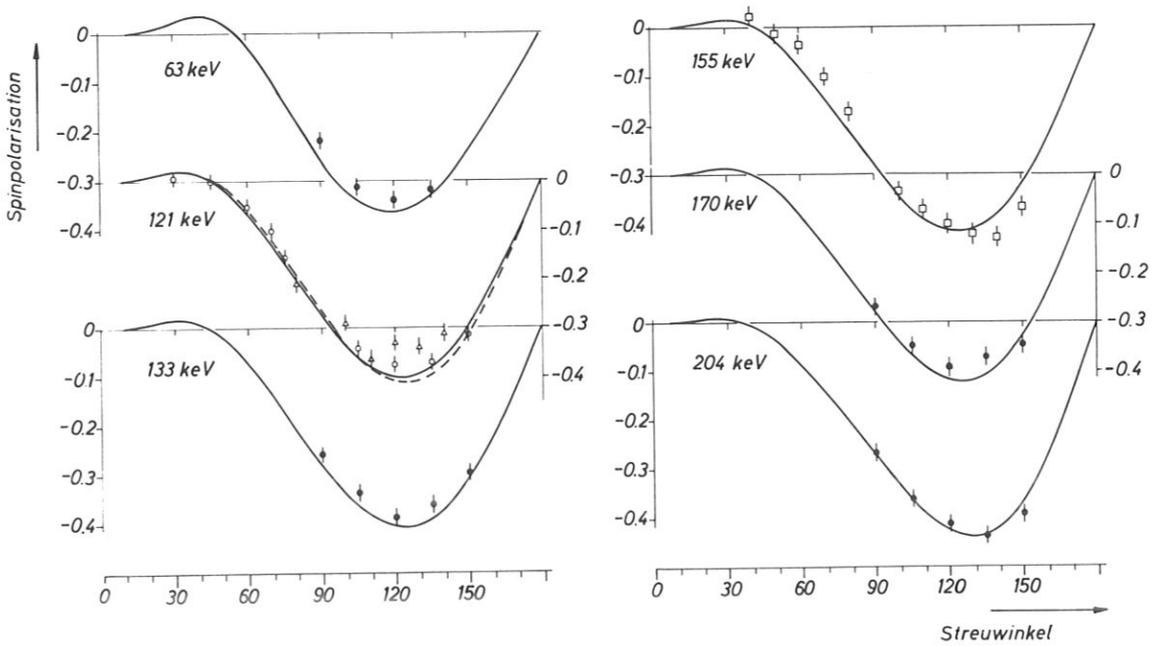


Abb.63 Spinpolarisation (Shermanfunktion) als Funktion des Streuwinkels bei Energien zwischen 63 und 204 keV für die elastische Elektronenstreuung an Gold

- theoretische Kurven nach Holzwarth und Meister (1964)
- - - theoretische Kurven nach Lin (1964)
- experimentelle Werte nach Mikaelyan u.a. (1963)
- ▲ experimentelle Werte nach Nelson und Pidd (1959)
- experimentelle Werte nach van Klinken (1965, 1966)
- experimentelle Werte nach Bienlein u.a. (1959)

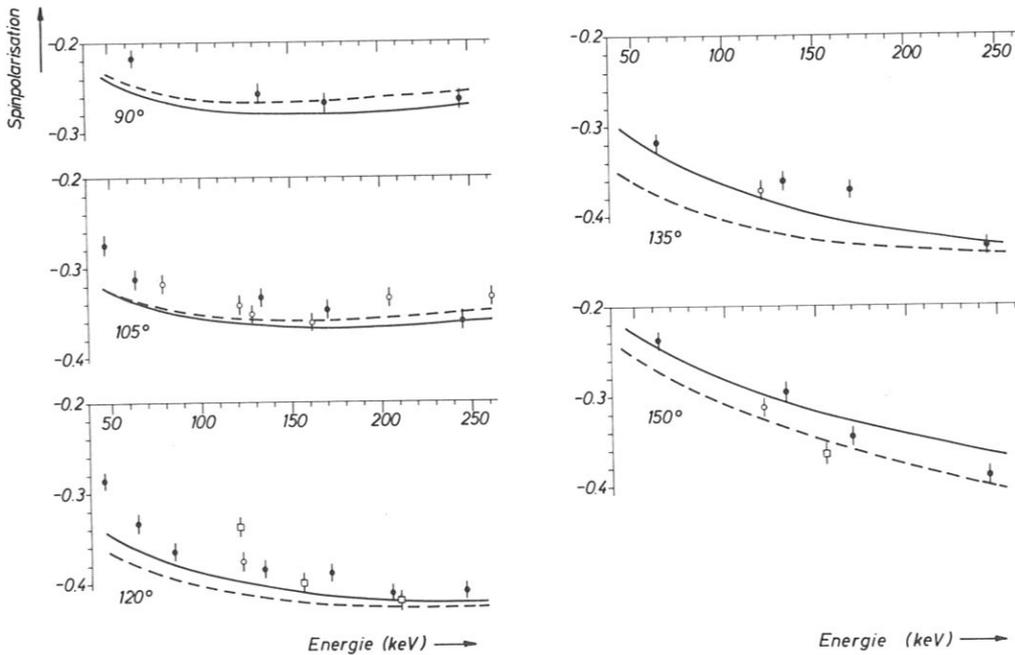


Abb.64 Spinpolarisation (Shermanfunktion) als Funktion der Energie für Streuwinkel zwischen 90° und 150° für die elastische Elektronenstreuung an Au

- theoretische Kurve nach Holzwarth und Meister (1964)
- - - theoretische Kurve nach Lin (1964)
- experimentelle Werte nach Mikaelyan u.a. (1963)
- experimentelle Werte nach van Klinken (1965, 1966)
- experimentelle Werte nach Bienlein u.a. (1959, 1960)

In Abb.64 ist die Energieabhängigkeit der Shermanfunktion gezeigt. Auch hier liegen die Messungen meist etwas zu tief.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die Meßergebnisse um so besser übereinstimmen, je höher die Energie ist; wahrscheinlich deshalb, weil bei kleineren Elektronenenergien die Fehlerquellen größer werden. Es wäre deshalb wünschenswert, Polarisationsmessungen am Hg-Dampfstrahl vorzunehmen, wo die Bedingung der Einzelstreuung besser einzuhalten ist; diese Messungen sind allerdings ein Intensitätsproblem.

Dreifachstreuexperimente gestatten die experimentelle Bestimmung der Funktionen  $f$  und  $g$  bis auf einen willkürlichen Phasenfaktor und einen gemeinsamen Faktor, wie in 3.1. gezeigt wurde. Das erste und bisher einzige Dreifachstreuexperiment wurde für 261 keV-Elektronen von van Duinen und Aalders (1968) durchgeführt. Die Ergebnisse für drei Streuwinkel sind in Abb.65 dargestellt. Sie zeigen ähnlich wie bei den zuvor (4.4.1.) erwähnten Messungen eine merkliche Abweichung von den theoretischen Daten. Die Übereinstimmung mit den Rechnungen von Holzwarth und Meister (1964) ist besser als mit denen von Sherman (1956), obwohl es nach Bühring (1968) und den Messungen von Kessler und Weichert (1968) umgekehrt sein sollte, siehe Abb.26.

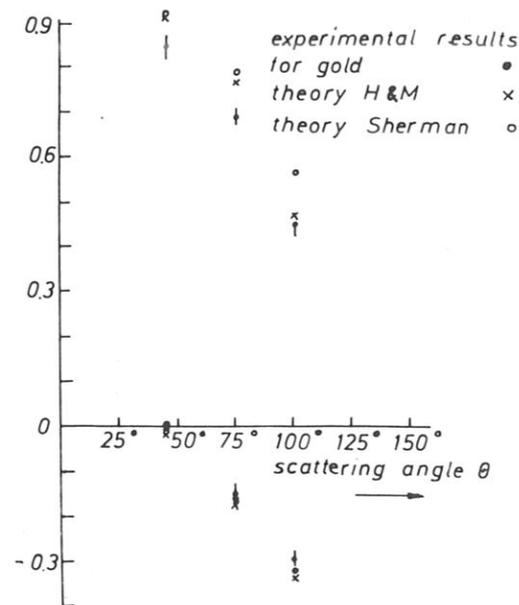


Abb.65

Experimentelle Ergebnisse für  $F = \frac{C}{I} \cos \theta + \frac{B}{I} \sin \theta$  und  $G = \frac{D}{I}$  bei Dreifachstreuexperimenten nach van Duinen und Aalders (1968); theoretische Voraussetzungen (Holzwarth und Meister, 1964 x, Sherman, 1956 o)

Abb.65

#### 4.4.2. Energien unter 10 keV:

Nach dem vorher Gesagten könnte man erwarten, daß bei der Streuung langsamer Elektronen an festen Targets keine Struktur mehr im DWQ auftritt und somit auch keine polarisierten reflektierten Elektronenstrahlen auftreten. Das ist jedoch nicht der Fall, wie die Messungen an einem mikrokristallinen Hg-Target zeigen (Loth und Eckstein, 1966; Eckstein, 1966). In Abb.66 sind die Winkelverteilungen für Elektronenenergien zwischen 165 eV und 1500 eV aufgetragen, in Abb.67 Polarisationsmessungen im Energiebereich zwischen 300 eV und 900 eV. Man erkennt also deutlich, daß auch hier eine Struktur im DWQ vorhanden ist, und daß die Polarisationsspitzen bei den Streuwinkeln liegen, bei denen die entsprechende Winkelverteilung ein Minimum hat. Daß die Verhältnisse ganz analog zu der Gasstreuung liegen, zeigt die Abb.68, in der die Theorie mit den Messungen am Hg-Dampfstrahl und am festen Hg-Target verglichen wird. Auffallend ist bei den Winkelverteilungen das starke Auffüllen der Minima bei der Streuung am festen Target und bei der Polarisation das Verschwinden der Polarisationsspitzen. Genau das gleiche Verhalten zeigte sich bei Erhöhung der Dampfdichte am Hg-Dampfstrahl. Die Hauptursachen für das Auffüllen der Minima und das Abtragen der Polarisationsspitzen sind die Mehrfachstreuung der Elektronen und das Vorhandensein von adsorbierten Fremdatomen an der Oberfläche. Daß solche adsorbierten Gasschichten eine große Rolle

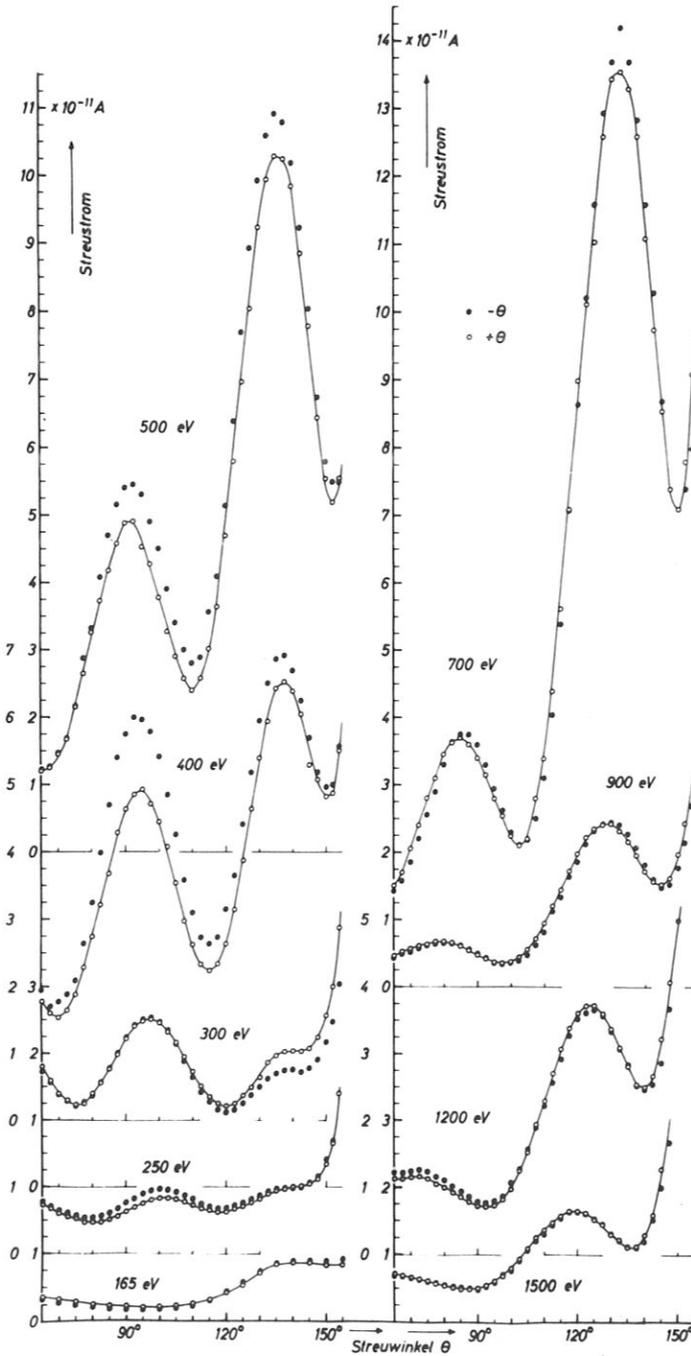
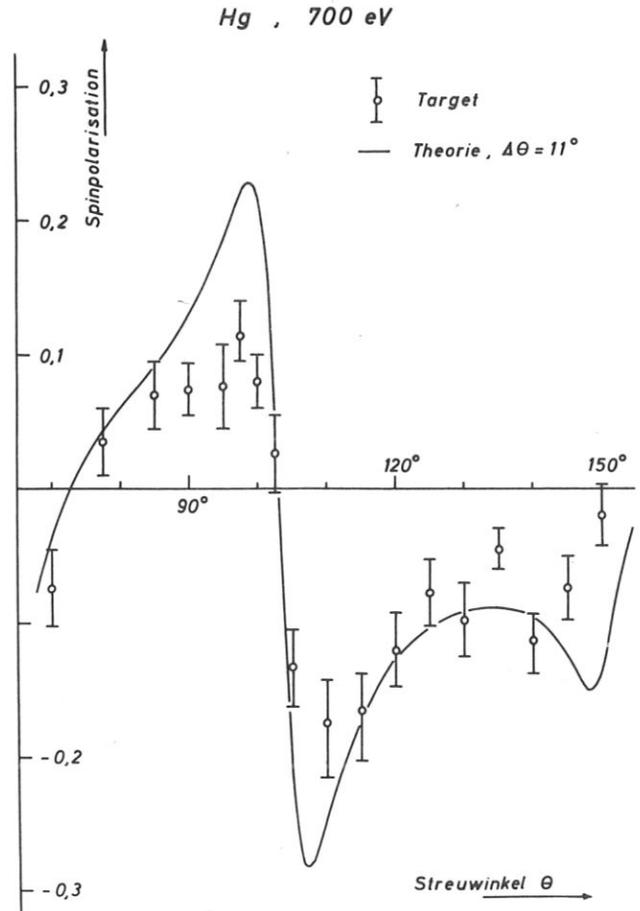
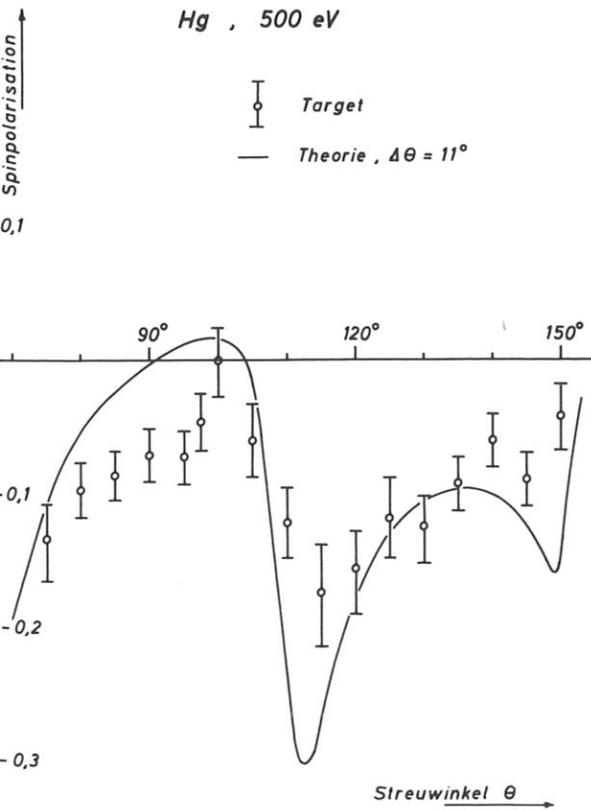
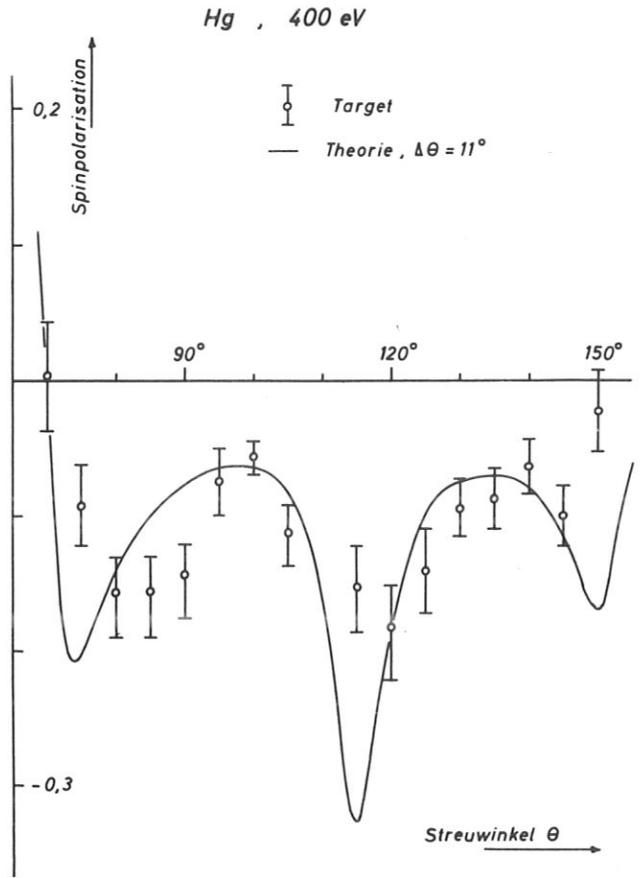
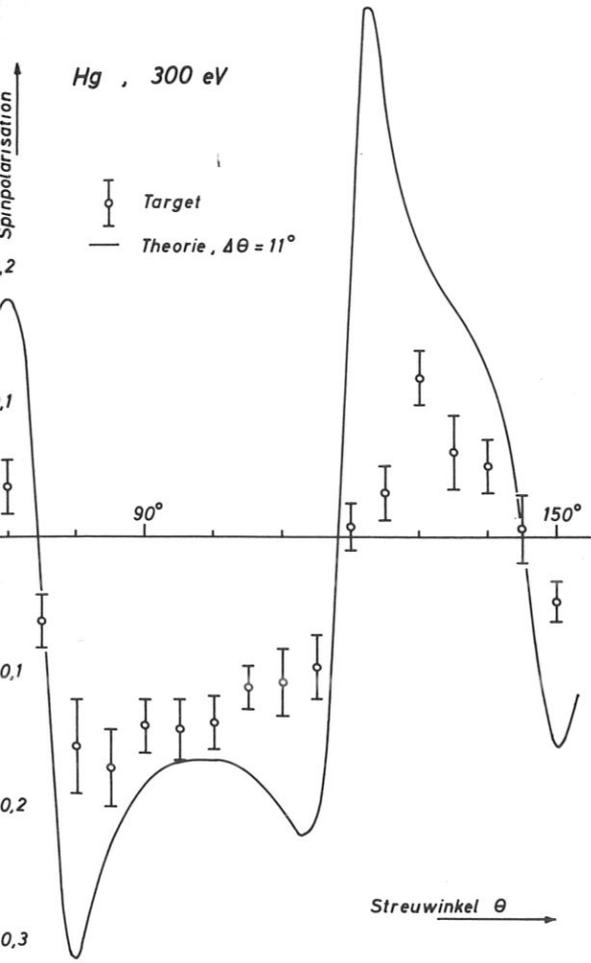


Abb.66

Relativer Verlauf der Winkelverteilungen bei elastischer Elektronenstreuung an einem festen Hg-Target in Abhängigkeit von der Elektronenenergie. Die Kurven sind bezüglich ihrer Ordinaten nicht miteinander vergleichbar.

Elektronenkanone ist auf +  $\theta$  eingestellt;  
Elektronenkanone ist auf -  $\theta$  eingestellt  
(Eckstein, 1967)

Abb.67 Spinpolarisation (mit statistischen Fehlern) nach elastischer Elektronenstreuung an einem festen Hg-Target für Elektronenenergien zwischen 300 eV und 700 eV (Eckstein, 1967). Ausgezogene Kurven nach theoretischen Daten von Holzwarth und Meister (1964), umgerechnet auf ein Winkelauflösungsvermögen von  $11^\circ$ .



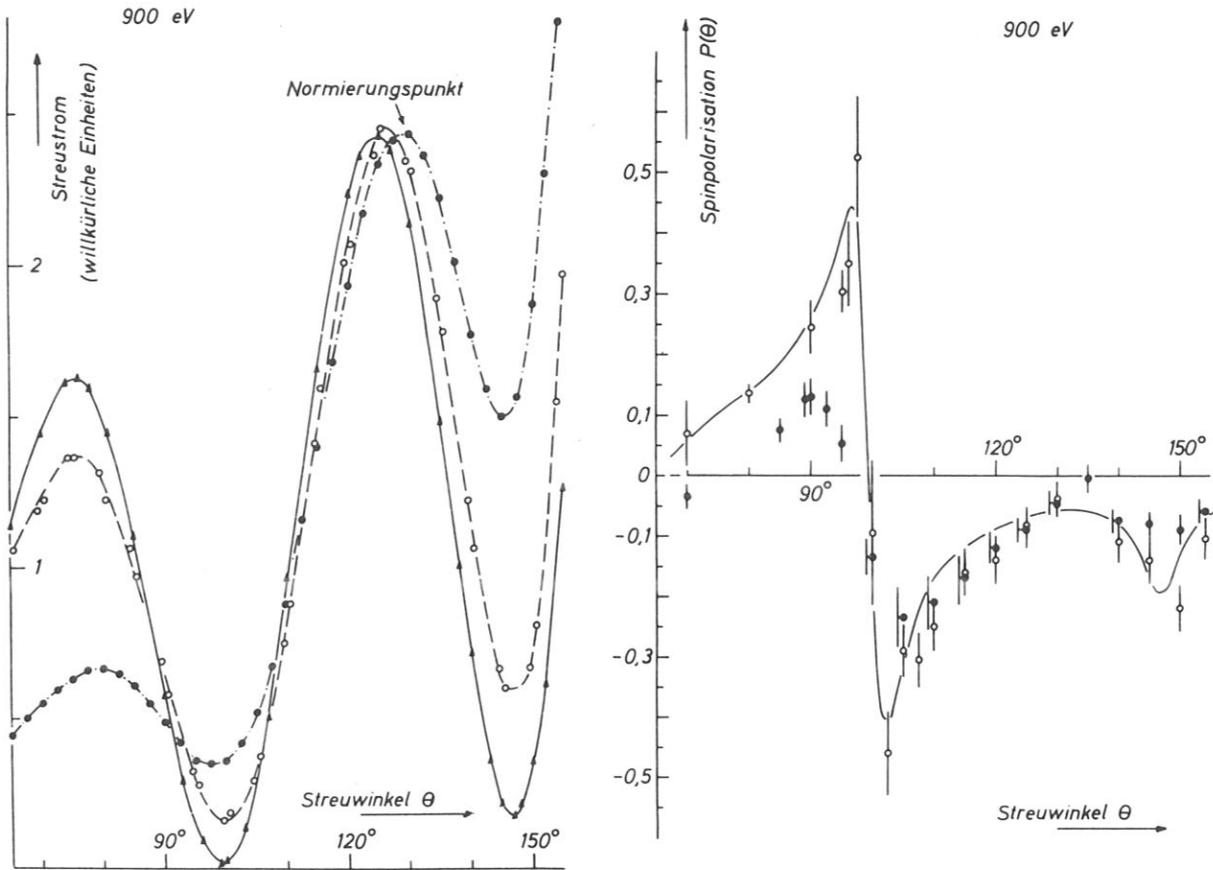


Abb.68 Elastische Elektronenstreuung an Hg (900 eV-Elektronen). Links Winkelverteilung:

Streuung am festen Hg-Target, Winkelauflösung  $\Delta\theta = 3^\circ$ ,  
 Streuung an freien Hg-Atomen, Winkelauflösung  $\Delta\theta = 1^\circ$ ,  
 Theoretische Kurve (Holzwarth und Meister, 1964).

Rechts Spinpolarisation:

- Streuung am festen Hg-Target,  $\Delta\theta = 8^\circ$ ,
- Streuung an freien Hg-Atomen,  $\Delta\theta = 6^\circ$ ,
- Theoretische Kurve (Holzwarth und Meister, 1964), umgerechnet auf  $\Delta\theta = 8^\circ$  nach Eckstein (1967).

spielen, erkennt man daran, daß elastisch gestreute Elektronen im betrachteten Energiebereich (einige hundert eV) nur wenige Atomlagen tief in den Festkörper eingedrungen sein können. Es mußte deshalb während der Messungen am festen Hg-Target dauernd Hg auf das Target aufgedampft werden. Diese Aufdampfrate war jedoch so gering, daß die Streuung der Elektronen an diesem Hg-Dampf gegenüber der Streuung am festen Target vernachlässigbar war. Die adsorbierten Fremdatome sind vorwiegend Atome mit kleiner Kernladungszahl, wie H ( $Z = 1$ ), C ( $Z = 6$ ), N ( $Z = 7$ ) und O ( $Z = 8$ ). Ihr DWQ für elastische Elektronenstreuung hat keine Struktur, wie es schon für Ne ( $Z = 10$ ) gezeigt wurde. Die elastische Streuung der Elektronen an solchen Adsorbaten bewirkt demnach vor allem ein Auffüllen der Minima der DWQ der Atome mit hoher Kernladungszahl. Ganz deutlich ist der Einfluß der adsorbierten Atome bei der Streuung an festen W, Pt und Au-Targets zu erkennen (Loth, 1967), die auf verschiedenen Temperaturen gehalten werden konnten. Abb.69 zeigt die Winkelverteilungen für ein festes W- und Pt-Target bei verschiedenen Temperaturen. Man sieht, daß bei den im Experiment herrschenden Bedingungen (keine UHV-Apparatur, Druck  $\approx 10^{-6}$  Torr) unterhalb  $500^\circ\text{C}$  die Elektronen praktisch nur an adsorbierten Atomen gestreut werden, während bei  $1000^\circ\text{C}$  und höheren Temperaturen die typische Struktur hervortritt. Außerdem scheint die Gasbelegung bei W stärker als bei Pt zu sein. Entsprechende Polarisationsmessungen bei verschiedenen Temperaturen zeigt Abb.70.

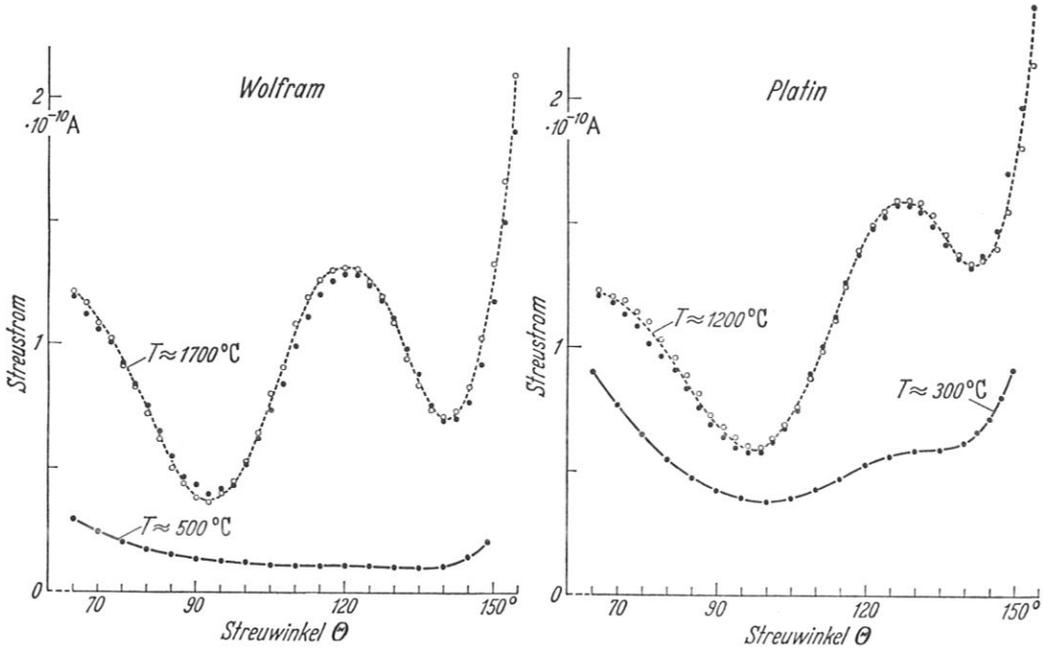


Abb.69 Elastische Streuung von 900 eV-Elektronen an einer W-Folie bzw. Pt-Folie. Abhängigkeit des Streustroms vom Streuwinkel bei verschiedenen Targettemperaturen.

Elektronenkanone auf +  $\theta$  eingestellt,  
Elektronenkanone auf -  $\theta$  eingestellt  
(nach Loth (1967))

Abb.70

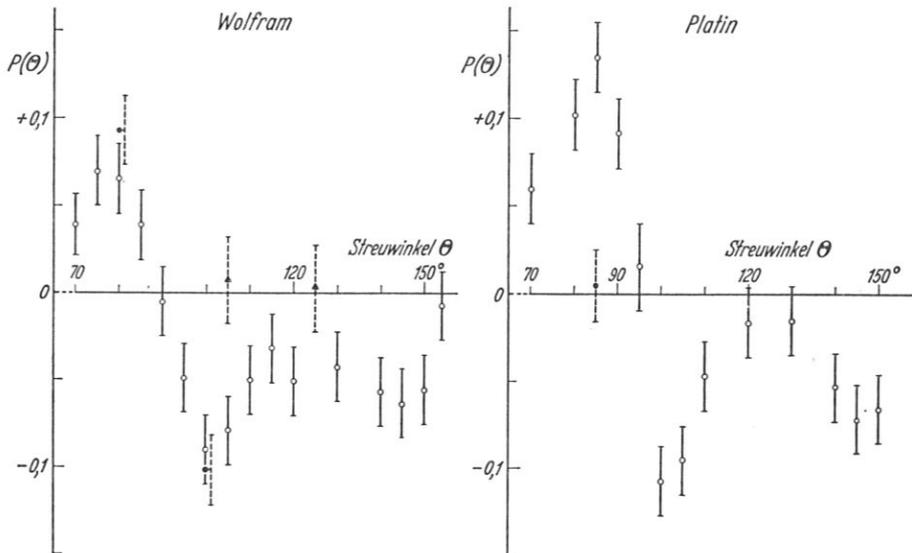
Polarisationsgrad  $P(\theta)$  bei elastischer Streuung von 900 eV-Elektronen an W- und Pt-Folien bei verschiedenen Folientemperaturen nach Loth (1967)

W-Folie:

- ↑  $T \approx 500^\circ\text{C}$
- $T \approx 1300^\circ\text{C}$
- ↓  $T \approx 1700^\circ\text{C}$

Pt-Folie:

- ♣  $T \approx 300^\circ\text{C}$
- $T \approx 1200^\circ\text{C}$



Bei Temperaturen unter  $500^{\circ}\text{C}$  mißt man einen Polarisationsgrad  $P = 0$ , wie man es aus der Kenntnis der entsprechenden Winkelverteilungen erwarten muß. Wie stark der Einfluß der adsorbierten Atome ist, erkennt man auch aus Abb.71. Hier wurde das Au-Target auf  $850^{\circ}\text{C}$  gehalten

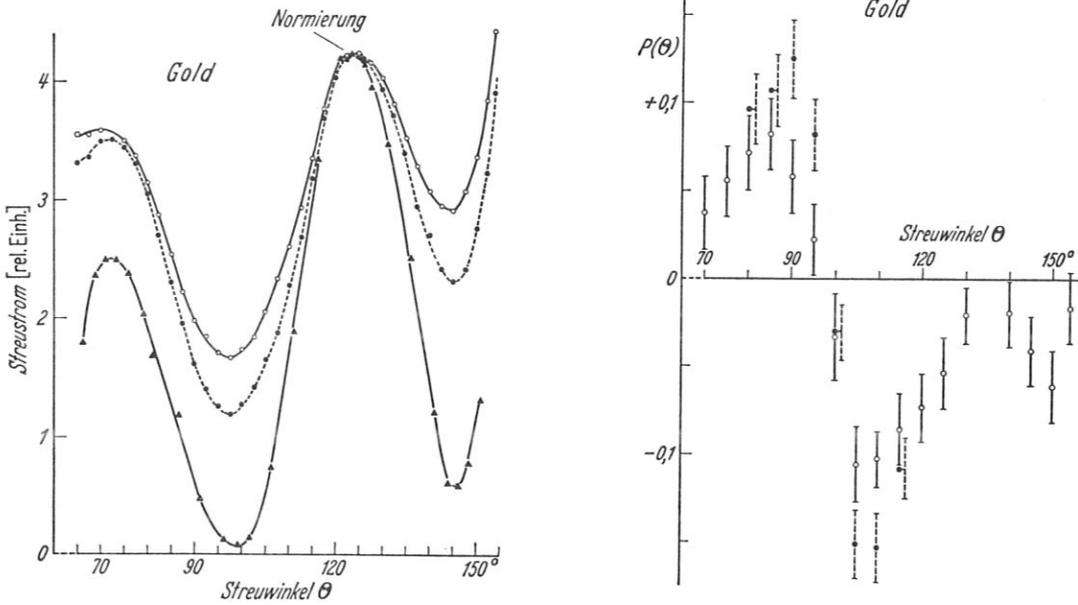


Abb.71 Elastische Streuung von 900 eV-Elektronen an einer glühenden Au-Folie ( $T \approx 850^{\circ}\text{C}$ ) nach Loth (1967)

Links Winkelverteilungen:

- Bei Endvakuum ( $10^{-6}$  Torr) gemessen,
- in Wasserstoffatmosphäre (Partialdruck  $5 \times 10^{-5}$  Torr) gemessen,
- ▲ Zum Vergleich Streuung an freien Au-Atomen. Die Kurven sind auf gleiche Maximumhöhe normiert.

Rechts der Polarisationsgrad  $P(\theta)$

- bei Endvakuum gemessen ( $10^{-6}$  Torr)
- ◊ in Wasserstoffatmosphäre gemessen

und in einer Wasserstoffatmosphäre gearbeitet. Die reduzierende Wirkung des Wasserstoffs hält die Oberfläche ziemlich frei von adsorbierten Atomen, und die Wasserstoffatome tragen praktisch nicht zur Elektronenstreuung bei. Die Folge davon ist eine Vertiefung der Minima in der Winkelverteilung und eine Erhöhung des Polarisationsgrades bei den diesbezüglichen Winkeln.

Die DWQ und Polarisationskurven zeigen auch die richtigen Winkelverschiebungen als Funktion der Kernladungszahl  $Z$ , daß nämlich die Minima mit wachsenden  $Z$  zu größeren Streuwinkeln wandern. Abb.72 gibt das klar zu erkennen für die Elemente W ( $Z = 74$ ) und Au ( $Z = 79$ ). Es wäre daher wünschenswert, die Messungen im UHV mit sauberen Targets zu wiederholen und den Einfluß der Mehrfachstreuung genauer zu untersuchen. Außerdem wurde von Maison (1966) der Vorschlag gemacht, durch Streuung an Einkristallen polarisierte Elektronenstrahlen zu erzeugen. Nach den obigen Messungen sollte diese Methode erfolgreich sein, entgegen älteren experimentellen (Davisson und Germer, 1929) und theoretischen (Weisskopf, 1935) Ergebnissen. Die Beugung von langsamen Elektronen (unter 500 eV) an Einkristallen ist unter dem Namen LEED eine gebräuchliche Untersuchungsmethode für Oberflächen. Die Elektronenstrahlen, die die Beugungsfiguren liefern, sollten also polarisiert sein. Eine experimentelle Bestätigung steht leider noch aus.

Es sollte noch darauf hingewiesen werden, daß auch die Streuung von langsamen Elektronen an flüssigem Hg die bekannte Beugungsstruktur im DWQ zeigt (Webb und Schilling, 1969).

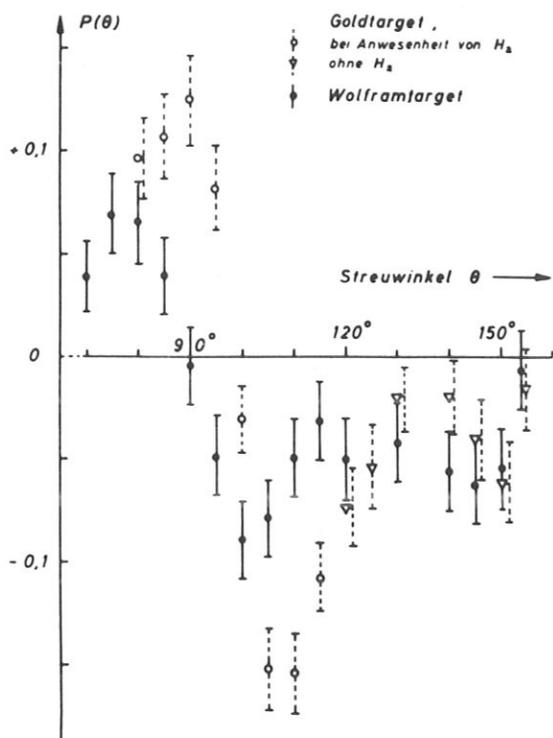
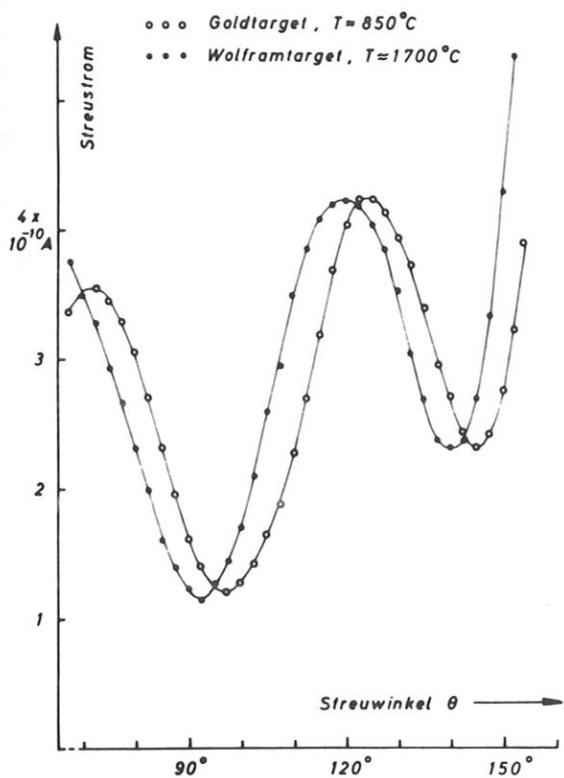


Abb.72 Verschiebung des Kurvenverlaufs von DWQ und Spinpolarisation infolge eines Kernladungsunterschiedes von  $\Delta Z = 5$  der Streuer.

5. Der Polarisationsnachweis.

5.1. Prinzip der Polarisationsbestimmung.

Ein polarisierter Elektronenstrahl ist bestimmt durch seine Stromdichte und seinen Polarisationsvektor  $\vec{P}$ . Insbesondere unterscheidet man polarisierte Elektronenstrahlen durch die Lage ihres Polarisationsvektors zum Impuls des Strahls: Steht der Polarisationsvektor senkrecht zum Impuls der Elektronen, so spricht man von transversaler Polarisation, liegt der Polarisationsvektor in Impulsrichtung, spricht man von longitudinaler Polarisation. Longitudinale Polarisation findet man z.B. bei den  $\beta$ -Zerfalls-Elektronen, transversale Polarisation bei der elastischen Elektronenstreuung an Atomen (siehe Einleitung). Es wird deshalb im folgenden immer von transversaler Polarisation die Rede sein. Einen polarisierten Elektronenstrahl kann man sich zusammengesetzt vorstellen aus Elektronen mit Spin in Richtung  $\vec{P}$  und Elektronen mit Spin in Richtung  $-\vec{P}$ . Daraus ergibt sich die Definition für den Polarisationsgrad  $P$

$$P = \pm |\vec{P}| = \frac{N^\uparrow - N^\downarrow}{N^\uparrow + N^\downarrow} \quad \text{mit} \quad |\vec{P}| \leq 1$$

Hierbei bedeuten  $N^\uparrow$  die Anzahl der Elektronen mit Spin in Richtung  $+\vec{P}$  und  $N^\downarrow$  die Anzahl der Elektronen mit Spin in Richtung  $-\vec{P}$ .

Es soll jetzt eine ideale Doppelstreuung betrachtet werden (Abb.73). In diesem Fall ist  $P$  gleich der Shermanfunktion  $S$

$$S = \frac{N^\uparrow - N^\downarrow}{N^\uparrow + N^\downarrow}, \quad \text{wobei} \quad I = N^\uparrow + N^\downarrow$$

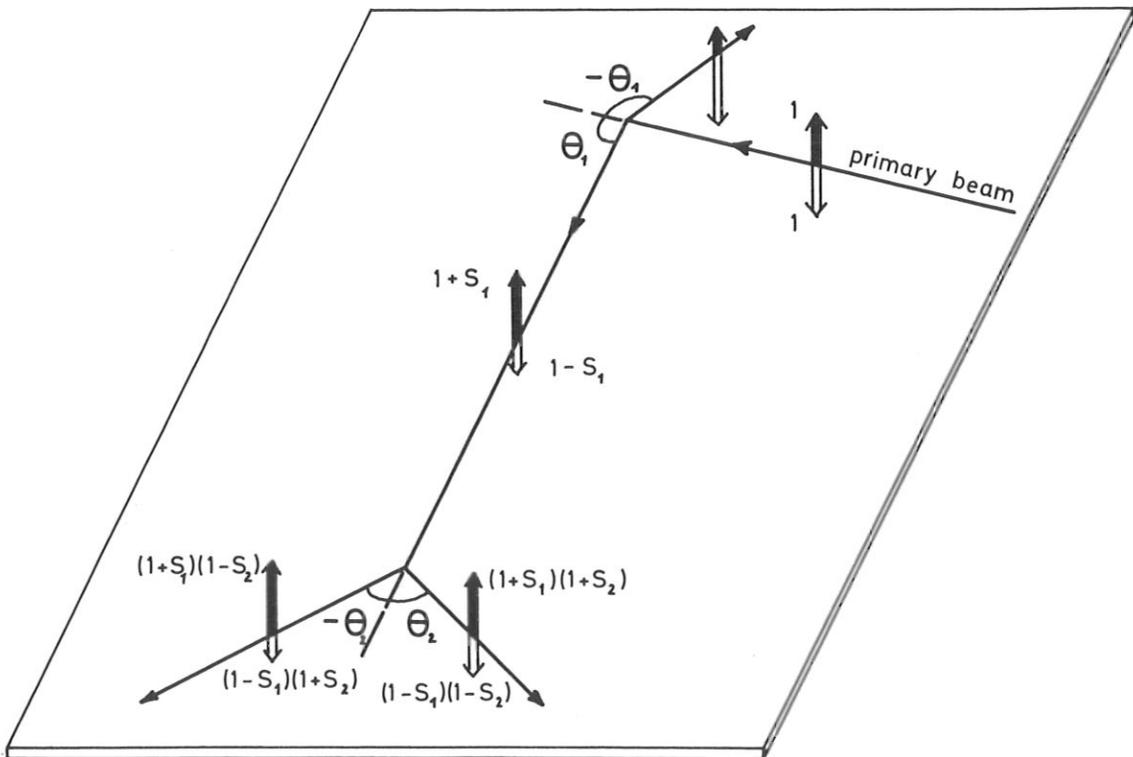


Abb.73 Prinzip einer Doppelstreuung mit Angabe der Streuintensitäten für die verschiedenen Spinrichtungen.

Der Primärstrahl sei unpolarisiert, also  $N \uparrow = N \downarrow$ ,  $S = 0$ . Nach der ersten Streuung ist

$$N \uparrow = \frac{I}{2} (1+S_1) \quad \text{und} \quad N \downarrow = \frac{I}{2} (1-S_1) \quad \text{wegen} \quad N \uparrow = \frac{1+S}{1-S} N \downarrow$$

Daraus folgt:

$$\frac{N \uparrow (+\theta_1)}{N \downarrow (+\theta_1)} = \frac{1+S_1(+\theta_1)}{1-S_1(+\theta_1)} \quad \text{und} \quad \frac{N \uparrow (-\theta_1)}{N \downarrow (-\theta_1)} = \frac{1+S_1(-\theta_1)}{1-S_1(-\theta_1)} = \frac{1-S_1(+\theta_1)}{1+S_1(+\theta_1)}$$

Nach der ersten Streuung tritt keine Intensitätsasymmetrie auf:

$$I_1(\theta_1) \sim \left[ (1+S_1) + (1-S_1) \right] = 2$$

Nach der zweiten Streuung erhält man:

$$\frac{N \uparrow (+\theta_2)}{N \downarrow (+\theta_2)} = \frac{(1+S_1) \cdot (1+S_2)}{(1-S_1) \cdot (1-S_2)} \quad \text{und} \quad \frac{N \uparrow (-\theta_2)}{N \downarrow (-\theta_2)} = \frac{(1+S_1) \cdot (1-S_2)}{(1-S_1) \cdot (1+S_2)}$$

Die Intensitäten nach der zweiten Streuung ergeben sich zu

$$I_R = I(-\theta_2) \sim \left[ (1+S_1)(1-S_2) + (1-S_1)(1+S_2) \right] = 2 (1-S_1 S_2)$$

$$I_L = I(+\theta_2) \sim \left[ (1+S_1)(1+S_2) + (1-S_1)(1-S_2) \right] = 2 (1+S_1 S_2)$$

$$\frac{I_L}{I_R} = \frac{I(+\theta_2)}{I(-\theta_2)} = \frac{1+S_1 S_2}{1-S_1 S_2}$$

Man erhält also eine Rechts-Links-Asymmetrie  $\delta$ , die es gestattet, den Polarisationsgrad experimentell zu bestimmen

$$\delta = \frac{I_L - I_R}{I_L + I_R} = S_1 S_2 \quad (62)$$

Die Asymmetrie  $\delta$  ist durch Messung der Intensitäten zweier Zähler, die unter einem Streuwinkel  $+\theta$  bzw.  $-\theta$  angebracht sind, bestimmbar. Ist  $S_2$  bekannt, kann der durch die erste Streuung erzeugte Polarisationsgrad  $S_1$  berechnet werden:

$$S_1 = \frac{\delta}{S_2} \quad , \quad (63)$$

$S_2$  kann dadurch bestimmt werden, daß man eine Doppelstreuung bei gleichem Streuwinkel ausführt, denn dann ist

$$S_2^2 = \delta'$$

Dieses eben geschilderte Meßprinzip ist in der Praxis komplizierter, da man auch mit unpolarisierten Elektronenstrahlen von Null verschiedene Asymmetrien mißt. Diese Asymmetrien können ihre Ursachen in folgenden Gründen haben: Justierung des Strahls, Geometrie der Anordnung, Ungleiche Zähler und Elektronik, Mehrfachstreuung im Target, Rückstreuung von Wänden und Blenden, Untergrund von  $\gamma$ -Strahlung, elektromagnetische Streufelder (Erdfeld).

Es ist experimentell unmöglich, die apparative Asymmetrie exakt zu Null zu machen. Die Schwierigkeiten liegen darin, diese Fehlereinflüsse klein zu halten bzw. richtig zu berücksichtigen. Es sollen deshalb zunächst allgemeine Richtlinien für einen praktikablen Polarisationsdetektor besprochen werden und dann anschließend die speziellen Probleme eines Detektors bei niedrigerer und bei hoher Elektronenenergie.

## 5.2. Der reale Polarisationsdetektor.

Hierfür ist es zweckmäßig, neue Bezeichnungen einzuführen, um darauf hinzuweisen, daß man nicht mit den theoretischen Werten, sondern mit entsprechend korrigierten Werten zu rechnen hat. Unter dem Vektor  $\vec{D}$  soll ein Detektorvektor verstanden werden. Er steht senkrecht auf der Streuebene des Detektors und sein Betrag  $D = |\vec{D}|$  ist die korrigierte Shermanfunktion  $S$ .

D hängt also wie S von der Energie und dem Streuwinkel der Elektronen und dem Target selbst ab; hinzu kommen noch die experimentellen Korrekturen. - Der zu untersuchende Elektronenstrahl habe einen Polarisationsvektor  $\vec{P}$ . Dann ist der DWQ

$$\frac{d\sigma^{\uparrow}(\vec{\xi}, \theta, E, Z)}{d\Omega} = \frac{d\sigma(\theta, E, Z)}{d\Omega} (1 + \vec{P} \cdot \vec{D}) = \frac{d\sigma}{d\Omega} [1 + PD \cos(\vec{P}\vec{D})]$$

mit  $P = |\vec{P}|$ ,  $\xi = \angle(\vec{P}\vec{D})$ ,  $E = \text{Elektronenenergie}$   
 $Z = \text{Kernladungszahl des Streuers.}$

Das bedeutet, daß man immer nur die auf der Streuebene des Detektors senkrechte Komponente des Polarisationsvektors

$$P_t = P \cos(\vec{P}\vec{D}) = P \cos \xi$$

messen kann. Die Abweichung im DWQ  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  wird maximal, wenn  $\vec{P}$  parallel oder antiparallel zu  $\vec{D}$  ist. Man wird also dafür sorgen, daß der Polarisationsgrad des zu untersuchenden Elektronenstrahls auf der Streuebene des Detektors senkrecht steht, damit man den vollen Betrag P von  $\vec{P}$  bestimmt. Diese Forderung ist nicht sehr scharf, da der cos sich um  $0^\circ$  bzw.  $180^\circ$  nur sehr langsam ändert ( $\cos 10^\circ = 0,985$ ). Eine Rotation der Detektorebene um die Strahlachse erlaubt es, die Bedingung der Parallelität von  $\vec{P}$  und  $\vec{D}$  genau zu erfüllen. Auf diese Weise läßt sich auch die  $\xi$ -Abhängigkeit von  $P_t$  nachweisen. Im folgenden sei immer  $\vec{P} // \vec{D}$  angenommen.

Die beiden Detektorzähler definieren mit dem einfallenden Strahl die Detektorstreuebene. Die von den beiden Zählern registrierten Intensitäten sind

$$I_1 = I_0 W (1 + PD),$$

$$I_2 = I_0 W (1 - PD)$$

wobei  $I_0$  die Intensität des ankommenden Strahls und W die Ansprechwahrscheinlichkeit der Zählordnung ist. D und W sind durch den Meßeffect und den Aufbau des gesamten Detektors bestimmt.

Bildet man die Intensitätsasymmetrie

$$A = \frac{I_1 - I_2}{I_1 + I_2} = PD, \quad (66)$$

so fallen  $I_0$  und W heraus. Ist D bekannt, so läßt sich P bestimmen.

Bezeichnet man das Intensitätsverhältnis mit Q, so gilt:

$$Q = \frac{I_1}{I_2} = \frac{1+A}{1-A} = M; \quad A = \frac{M-1}{M+1} \quad (67)$$

Es wird nun diskutiert, wie man die verschiedenen apparativen Asymmetrien durch zusätzliche Messungen eliminieren kann.

### 5.2.1. Apparative Asymmetrien und ihre Beseitigung.

Unterschiedliche Ansprechwahrscheinlichkeiten (Raith, 1962)

In diesem Fall ist:

$$\begin{aligned} I_1 &= I_0 W_1 (1+PD) \\ I_2 &= I_0 W_2 (1-PD) \end{aligned} \quad Q = \frac{I_1}{I_2} = \frac{W_1}{W_2} \frac{1+A}{1-A} = A_D M \quad (68)$$

Um die "Detektor-Asymmetrie"  $A_D$  zu beseitigen, kann man eine zweite Messung machen, bei der man den Polarisationsvektor des Elektronenstrahls um  $180^\circ$  gedreht hat (oder den Detektorvektor). Das heißt, man führt P in -P (bzw. D in -D) über. Die beiden Messungen ergeben

$$Q(+P) = A_D M$$

$$Q(-P) = A_D \frac{1-A}{1+A} = A_D M^{-1}.$$

Der Quotient  $\frac{Q(+P)}{Q(-P)} = M^2$  ist unabhängig von  $A_D$ , und man erhält

$$A = \frac{M-1}{M+1} = \frac{\frac{Q(+P)}{Q(-P)} - 1}{\frac{Q(+P)}{Q(-P)} + 1}$$

Die zweite Messung kann natürlich auch mit einem Elektronenstrahl, der den Polarisationsgrad Null hat, erfolgen. Es gibt dann

$$Q(+P) = A_D^I M$$

$$Q(o) = \frac{I_0 W_1}{I_0 W_2} = A_D^I$$

Damit ergibt sich

$$\frac{Q(+P)}{Q(o)} = M \quad A = \frac{M-1}{M+1} = \frac{\frac{Q(+P)}{Q(o)} - 1}{\frac{Q(+P)}{Q(o)} + 1} \quad (70)$$

In der Praxis ist die erste Methode besser geeignet, da eine Messung mit  $P = 0$  nicht so günstig ausgeführt werden kann wie eine Messung mit Polarisationsumkehr.

Wird durch die Polarisationsumkehr in (69) die Strahlgeometrie verändert, so muß man eine zusätzliche "Umpol-Asymmetrie"  $A_u$  berücksichtigen. Man kann das z.B. dadurch tun, daß bei einem unpolarisierten Strahl in den Stellungen (+o) und (-o) die gleiche "Umpol-Asymmetrie" auftritt. Die Größe A erhält man dann aus vier verschiedenen Q-Messungen

$$Q(+P) = A_D A_u M$$

$$Q(-P) = A_D A_u^{-1} M^{-1}$$

$$Q(+o) = A_D A_u$$

$$Q(-o) = A_D A_u^{-1}$$

Der Quotient

$$\frac{Q(+P)}{Q(-P)} \cdot \frac{Q(-o)}{Q(+o)} = M^2$$

ergibt folgende A

$$A = \frac{M-1}{M+1} = \frac{\sqrt{\frac{Q(+P)}{Q(-P)} \cdot \frac{Q(-o)}{Q(+o)}} - 1}{\sqrt{\frac{Q(+P)}{Q(-P)} \cdot \frac{Q(-o)}{Q(+o)}} + 1}$$

unabhängig von  $A_D$  und  $A_u$ .

Eine weitere Methode (Eckardt u.a., 1964; van Klinken, 1965, 1966; Brosi u.a., 1962), apparative Asymmetrien zu bestimmen und zu eliminieren, besteht darin, mit zwei weiteren Zählern eine Nullmessung zu machen (Abb.74). Stellt man die Zähler 3 und 4 unter einen kleinen Streuwinkel  $\theta'$  bzw.  $-\theta'$ , für den

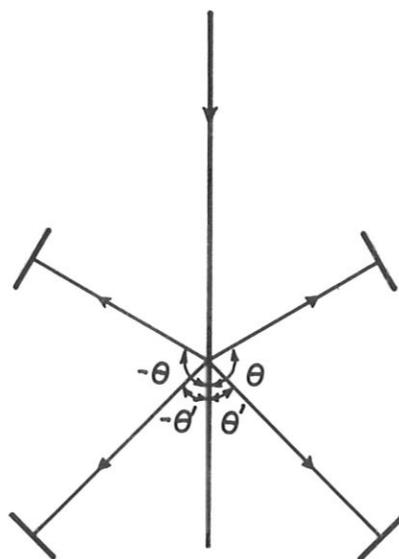
$$D(\theta') = D(-\theta') \approx 0$$

ist, so wird

$$A = 0.$$

Die apparativen Asymmetrien sind dann eliminiert, wenn  $I_3 = I_4$  ist, vorausgesetzt, daß  $W_3 = W_4$  ist. Diese Anordnung hat folgende Vorteile:

- 1) Hohe Zählraten bei kleinen Streuwinkeln; daraus resultiert ein statistischer Fehler bei der Bestimmung der apparativen Asymmetrie.
- 2) Gleichzeitige Nullmessung und damit ~~eine~~ Verkürzung der Meßzeit.
- 3) Hohe Empfindlichkeit auf Änderungen der Strahlachse.



4 Zähler - Anordnung

Abb.74

### 5.2.2. Einfluß eines Streu-Untergrundes (Müller, 1966).

Die von den Wänden rückgestreuten Elektronen und in die Zähler fallenden Elektronen sind durch ein  $u$  folgendermaßen berücksichtigt

$$I_1 = I_0 W_1 (1+(-1)^{i+1} PD) + I_0 W_1 u_1, \text{ für } i = 1, 2. \quad (72)$$

Es sei angenommen, daß diese zusätzlichen Zählraten der rückgestreuten Elektronen klein sind, also z.B.  $u < \frac{1}{10}$ .

Bei einer Asymmetriemessung nach (69) erhält man

$$\begin{aligned} A &\approx PD \frac{1}{1 + \frac{u_1 + u_2}{2}} \\ &\approx PD \frac{1}{1+u}, \text{ für } u_1 \approx u_2 = u. \end{aligned} \quad (73)$$

Bei einer Asymmetriemessung nach (70) ergibt sich

$$\begin{aligned} A &= \frac{PD(1 + \frac{u_1 + u_2}{2}) + \frac{u_1 - u_2}{2}}{(1+u_1)(1+u_2) - PD \frac{u_1 - u_2}{2}} \\ &= PD \frac{1}{1+u}, \text{ für } u_1 \approx u_2 = u. \end{aligned}$$

Man erkennt daraus, daß durch den Rückstreu-Untergrund die Detektorempfindlichkeit verkleinert wird:

$$D' = D \frac{1}{1+u}. \quad (74)$$

Für  $u_1 = \frac{1}{10}$  erhält man eine Verkleinerung von  $D$  um ca. 10 %.

### 5.2.3. Fehlerbetrachtung und ihre Folgerungen für einen günstigen Polarisationsdetektor.

Die Untersuchung des Fehlers des Polarisationsgrades ist insofern aufschlußreich, als sie gleichzeitig ein Kriterium für die Güte eines Polarisationsanalysators liefert.

Mit  $A = PD$  erhält man

$$\Delta P = \sqrt{\left(\frac{\Delta A}{D}\right)^2 + \left(\frac{A}{D^2}\right)^2 (\Delta D)^2}.$$

Der Fehler läßt sich aufspalten in einen systematischen Fehler

$$P_{\text{system.}} = \frac{A}{D^2} (\Delta D) \quad (75)$$

und einen statistischen Fehler

$$P_{\text{stat.}} = \frac{\Delta A}{D}. \quad (76)$$

Schätzt man den Fehler  $A$  ab (Müller, 1966), wobei angenommen wurde, daß  $PD \ll 1$  und  $I_1 \approx I_2 = I_0 W$ , so erhält man mit den Formeln (66) und

$$I_1 = I_0 W (1+(-1)^{i+1} PD) \text{ für } i = 1, 2$$

für 
$$\Delta A \approx \frac{1}{\sqrt{2I_0 t W}}, \text{ mit } t = \text{Meßzeit}$$

Daraus ergibt sich

$$(\Delta P)_{\text{stat.}} = \frac{1}{D \sqrt{W}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2I_0 t}} = K \cdot \frac{1}{\sqrt{2I_0 t}}. \quad (77)$$

Die Größe  $K$  hängt nur vom Polarisationsanalysator ab und ist somit ein Maß für die Güte des Analysators, und zwar ist der Analysator um so besser, das heißt, er läßt um so genauere Messungen zu, je kleiner die Analysator-Kenngröße  $K$  ist. Außer von geometrischen Daten hängt  $K$  im wesentlichen von  $D$  und dem DWQ ab

$$K = \frac{1}{D} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}} \quad (78)$$

Man hat also das Bestreben, das Produkt  $D \cdot \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  möglichst groß zu machen oder die Kenngröße  $K$  möglichst klein. Über die Größenordnung von  $K$  soll nachher bei der Besprechung der verschiedenen Analysatoren eingegangen werden.

Für einen Polarisationsdetektor sollten also folgende Größen einen möglichst hohen Wert annehmen

- 1)  $D \cdot \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  , um den statistischen Fehler klein zu machen
- 2)  $D$  , um den systematischen Fehler klein zu machen.

Zuletzt soll noch angegeben werden, wie sich die Streuintensität abschätzen läßt

$$I_1 \approx I_0 W_1 = \rho \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot \alpha_S^2 \cdot w I_0 \quad (79)$$

Hierbei ist

$\rho$  = Anzahl der Atome /cm<sup>2</sup>

$\frac{d\sigma}{d\Omega}$  = DWQ

$\alpha_S$  = halber Öffnungswinkel des vom Zähler erfaßten Streukegels

$w$  = Ansprechwahrscheinlichkeit der Zähler

$I_0$  = Primärintensität.

Die Wahl der verschiedenen Größen soll jetzt eingehender besprochen werden.

### 5.3. Der Polarisationsdetektor bei hohen Energien (Mottdetektor) (> 10 keV).

#### 5.3.1. Allgemeine Betrachtungen.

Welcher Energie- und Winkelbereich vom theoretischen Standpunkt für einen Polarisationsdetektor wünschenswert ist, läßt sich aus den Abb. 75 und 76 ablesen. Betrachtet man zuerst die Winkelabhängigkeit, so sieht

man, daß  $|S|$  bei Winkeln zwischen 110° und 140° maximal wird und daß der DWQ zu kleineren Winkeln monoton ansteigt. Das Produkt  $|S| \cdot \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  zeigt ein ausgeprägtes breites Maximum, das gegenüber dem Maximum von  $|S|$  etwas (ca. 15°) zu kleineren Winkeln verschoben ist. Bei 120 keV ist  $S \cdot \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  für  $\theta = 110^\circ$  optimal.

Für höhere Energien hat  $S \cdot \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$

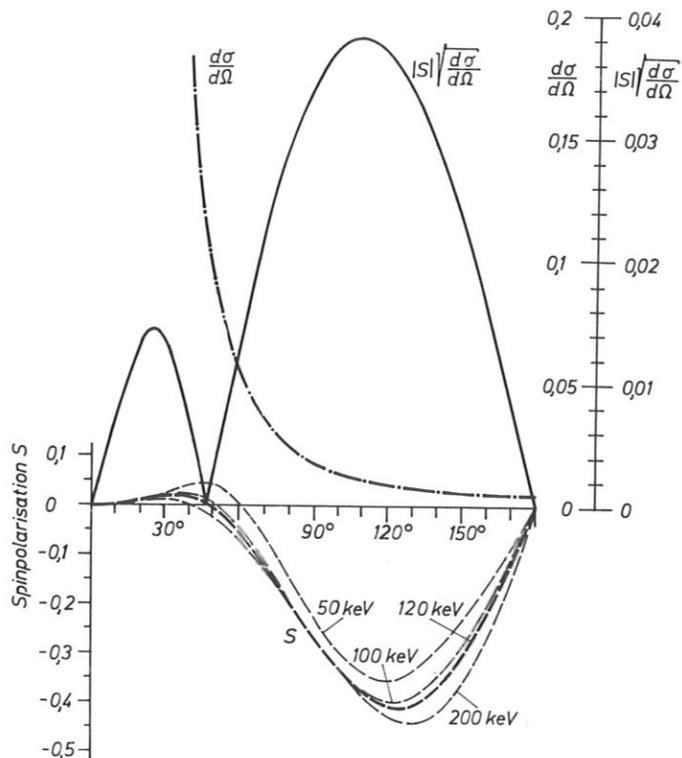


Abb. 75

Shermanfunktion  $S$ , DWQ und die Funktion  $|S| \cdot \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  als Funktion des Streuwinkels  $\theta$  für 120 keV. Die Shermanfunktion  $S$  ist außerdem für drei weitere Energien zwischen 50 und 200 keV angegeben. (nach Werten von Lin, 1964).

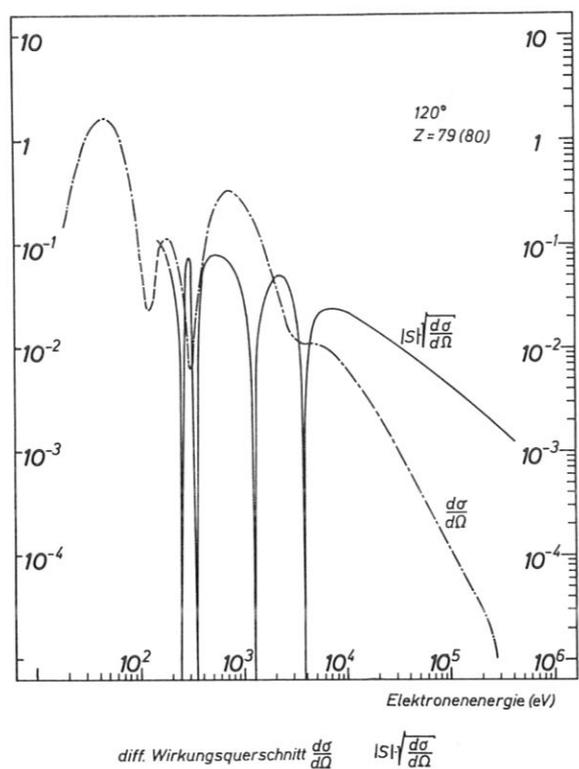


Abb.76 DWQ und die Funktion  $|S| \cdot \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  als Funktion der Elektronenenergie zwischen  $10^2$  und  $4 \cdot 10^5$  eV bei einem Streuwinkel von  $120^\circ$  (nach Werten von Holzwarth und Meister, 1964)

Forderung, Folien benützen zu müssen, verlangt eine genaue Diskussion der Mehr- und Vielfachstreuung in der Streufolie.

### 5.3.2. Der Einfluß der Folien.

#### 5.3.2.1. Die Kleinwinkelvielfachstreuung.

Die Kleinwinkelvielfachstreuung bewirkt eine Winkelverteilung um die Einfallrichtung des Elektronenstrahls, die näherungsweise einer Gaußverteilung entspricht. Ein Auftreten einer Großwinkelstreuung ( $\sim 100^\circ$ ) infolge von vielen Kleinwinkelstreuungen sind bei den geringen Foliendicken sehr unwahrscheinlich (Raith, 1962). Nach Williams (1939) muß man bei einer Elektronenenergie von 60 keV und einem Weg von  $1000 \text{ \AA}$  in Gold mit einem Gaußschen Ablenkwinkel von  $13^\circ$  rechnen. Dieser Winkel nimmt jedoch mit steigender Elektronenenergie bei fester Foliendicke ab. Diese Aufspreizung des Elektronenstrahls hat zur Folge, daß der effektive Streuwinkel  $\bar{\theta}$ , unter dem die Asymmetrie gemessen wird, etwas kleiner ist als der Sollwinkel (z.B.  $120^\circ$ ). Die Detektorempfindlichkeit  $D$  wird verkleinert oder vergrößert, je nachdem, ob der mittlere Streuwinkel  $\theta$  links oder rechts vom Minimum der  $S$ -Funktion liegt, siehe Abb.75. In den meisten Fällen wird es sich um eine Verkleinerung von  $D$  handeln, da man sich wegen des optimalen Werts von  $|S| \cdot \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  links vom Minimum von  $S$  befinden wird. Die Kleinwinkelvielfachstreuung stört besonders  $\sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  bei Streuwinkeln  $\theta \leq \frac{\pi}{2}$ .

#### 5.3.2.2. Die Mehrfachstreuung um große Winkel.

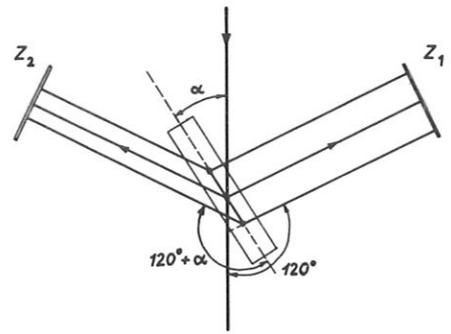
Einen größeren Einfluß als die Kleinwinkelstreuung hat bei Streuwinkeln  $\theta > \frac{\pi}{2}$  zumeist die Zweifachstreuung um große Winkel. Hier ist vor allem der Prozeß wesentlich, bei dem die erste Streuung tangential zur Foliensoberfläche verläuft, weil dann die Wahrscheinlichkeit für

bei größerem Streuwinkel das Maximum, für kleinere Energien bei kleineren Streuwinkeln. Aus der Energieabhängigkeit bei einem Streuwinkel von  $120^\circ$  erkennt man, daß  $|S| \cdot \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  stärker zunimmt als  $|S|$  abnimmt, das  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  heißt,  $|S| \cdot \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  nimmt bis 10 keV stetig zu.

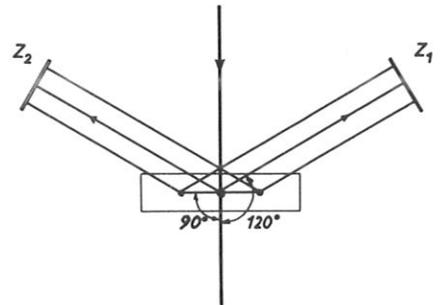
Der statistische Fehler sinkt mit abnehmender Elektronenenergie. Die Schlußfolgerung, den Detektor bei einer möglichst niedrigen (10 keV) Elektronenenergie zu betreiben, ist jedoch nicht richtig, da vor allem die Unterdrückung der im Target auftretenden Mehrfachstreuung hohe Energien erfordert, wie weiter unten besprochen wird. Die Forderung nicht zu kleiner Zählraten  $I_1$  bringt es mit sich, als Streuer dünne Folien (grosses  $\rho$ ) von Elementen mit hoher Ordnungszahl zu wählen. In der Regel werden Goldfolien verwendet, die wegen der Unterdrückung der Mehrfachstreuung in der Folie hinreichend dünn sein müssen.

Prinzipiell ist es möglich, als Target einen Dampfstrahl (z.B. Hg) zu verwenden. Hier kann man die Dichte des Dampfstrahls so einstellen, daß eine Mehrfachstreuung nicht berücksichtigt zu werden braucht. Die Größe  $\rho$  ist jedoch so klein, daß die Zählraten  $I_1$  gering sind und dadurch der statistische Fehler zu groß wird. Die

eine zweite Streuung in Richtung der Zähler sehr groß ist (siehe Abb.77). Betrachtet man einen Streuwinkel von  $120^\circ$ , so erkennt man, daß bei der Reflexionsstellung die erste Streuung  $90^\circ$  und die zweite Streuung  $30^\circ$  beträgt, und das ist für beide Zähler dasselbe. Bei der Transmissionsstellung hat man in Richtung  $Z_1$  Streuwinkel von  $30^\circ$  und  $90^\circ$  bzw.  $150^\circ$  und  $90^\circ$ , und in Richtung  $Z_2$  Streuwinkel von  $30^\circ$  und  $150^\circ$  bzw.  $150^\circ$  und  $30^\circ$ . Bei der Transmissionsstellung ist die Zweifachstreuung unsymmetrisch; dafür ist die Wahrscheinlichkeit für eine Zweifachstreuung geringer als bei der Reflexionsstellung. Die Gleichheit der geometrischen Bedingungen für die Rechts- und Linksstreuung bei der Reflexionsstellung läßt diese vorziehen.



a) Transmissionsstellung



b) Reflexionsstellung

Abb.77 Mott-Detektor bei  
a) Transmissionsstellung und  
b) Reflexionsstellung der Streufolie.

### 5.3.2.3. Die Schichtdickenabhängigkeit.

Alle diese Störeinflüsse durch Kleinwinkelvielfachstreuung und Mehrfachstreuung nehmen mit wachsender Foliendicke  $d$  zu und erniedrigen die Detektorempfindlichkeit  $D$ . Um diese Abhängigkeit der Detektorempfindlichkeit  $D$  von der Schichtdicke  $d$  zu finden, kann man folgende einfache qualitative Betrachtung anstellen.

Für die Impulsrate  $I_1$  und  $I_2$  als Funktion von  $d$  wird eine Potenzreihe angesetzt, die nach dem quadratischen Glied abbricht. Die Zahl der Einzelstreuungsprozesse ist proportional zu  $d$  mit einer Detektorempfindlichkeit  $S$ , während der zu  $d^2$  proportionale Impulsratenanteil die Detektorempfindlichkeit  $S = 0$  haben soll. Man erhält dann für  $A_u = A_D = 1$

$$Q(+P) = \frac{c_1(1+PS)d+c_2d^2}{c_1(1-PS)d+c_2d^2} = \frac{1+P D(d)}{1-P D(d)}$$

mit

$$D(d) = \frac{S}{1 + \alpha d} \tag{80}$$

$\frac{1}{\alpha} = d_{1/2}$  ist die von Raith (1962) eingeführte Halbwertsdicke,

bzw.

$$\alpha = \frac{1}{S} \cdot \frac{dD}{d} \cdot \frac{1}{d} \text{ die von Mikaelyan (1963) gebrauchte "spezifische Depolarisation" } \tag{81}.$$

$\alpha$  ist abhängig von  $\theta, E, Z$  und der Folienstellung. Die Formel (80) ergibt sich auch aus einer theoretischen Abschätzung von Greenberg u.a. (1960). Experimentell ist diese Schichtdickenabhängigkeit bis  $d = 0,25$  von allen Autoren bestätigt, während sich oberhalb  $d = 0,25$  starke Abweichungen bemerkbar machen (siehe Abb.78). Die Messungen von Brosi u.a. (1962) sowie von van Klinken (1965, 1966) zeigen bei  $\alpha d = 0,2$  einen Knick in der Schichtdickenabhängigkeit, während das bei den anderen erwähnten Autoren nicht der Fall ist.

Experimentell ist es wichtig, eine lineare Schichtdickenabhängigkeit zu erhalten, um einfach auf Schichtdicke Null extrapolieren zu können. Da die Asymmetrie  $A \sim D$  ist, liefert die Auftragung von  $A^{-1}$  als Funktion von  $d$  die gewünschte Gerade (Raith, 1962; Greenberg, 1960; Cavanagh, 1957). Hiergegen fanden Brosi u.a. sowie van Klinken (1965, 1966) für  $A = A(d)$  für kleine Schichtdicken (bis  $1 \text{ mg/m}^2$ ) eine Gerade, siehe Abb.79, während bei Brosi u.a. (1962) für die vielen genauen Meßpunkte  $A^{-1/2} = A^{-1/2}(d)$  die beste lineare Abhängigkeit ergab (bis  $d = 12 \text{ mg/\mu m}^2$ ).

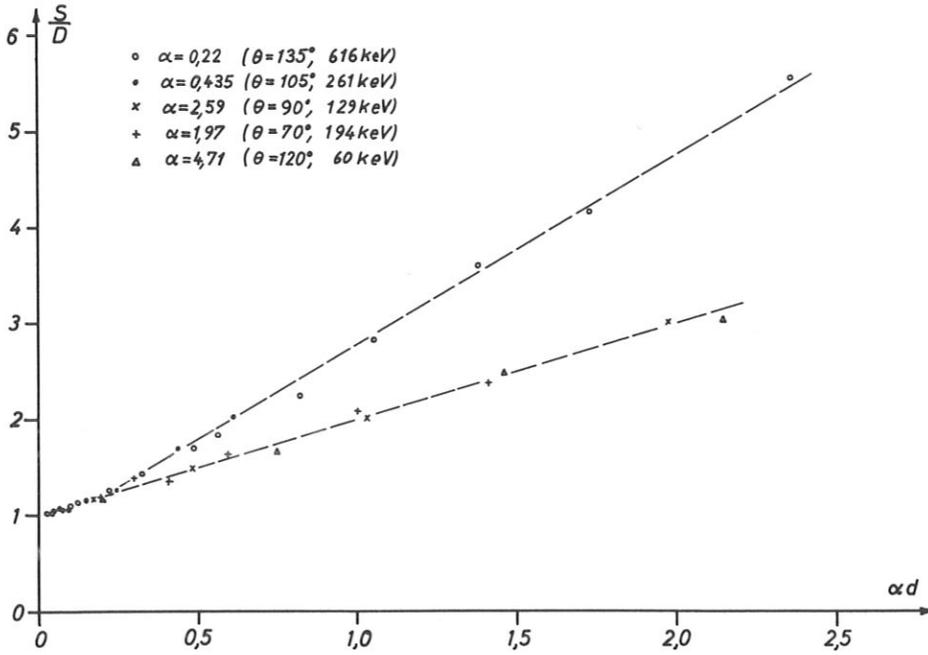


Abb.78 Messungen der Schichtdickenabhängigkeit von D.

- ooo Meßwerte von Brosi u.a. (1962)
- ... Meßwerte von van Klinken (1965, 1966)
- xxx Meßwerte von Cavanagh u.a. (1957)
- +++ Meßwerte von Greenberg u.a. (1960)
- Δ Δ Meßwerte von Raith (1962)

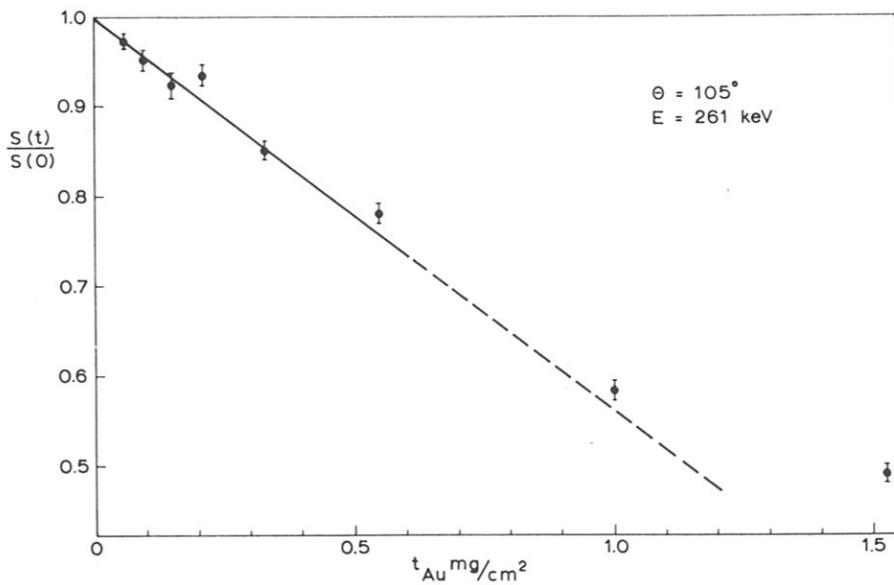


Abb.79 Abnahme der Detektorempfindlichkeit mit der Foliendicke nach van Klinken (1965, 1966).

Die Depolarisation  $\frac{D}{S} = 1 - \frac{D}{S}$  hängt mit  $\alpha$  folgendermaßen zusammen

$$\frac{\Delta D}{S} = \frac{\alpha d}{1 + \alpha d} \approx \alpha d \text{ für } \alpha d \ll 1.$$

Diese Abhängigkeit ergibt sich auch aus einer theoretischen Arbeit von Wegener (1958). Dort sind Formeln und Tabellen angegeben, um  $\alpha$  (für  $\alpha d \ll 1$ ) sowohl für Energien zwischen 46 und 340 keV und für Streuwinkel zwischen  $60^\circ - 80^\circ$ , als auch zwischen  $105^\circ$  und  $120^\circ$  zu berechnen. Die Theorie gibt die Energie und Winkelabhängigkeit von  $\alpha$  nur qualitativ an; bei  $\vartheta = 90^\circ$  werden die  $\alpha$ -Werte unendlich. Die theoretischen Werte sollten also bei Streuwinkeln, die nahe bei  $90^\circ$  liegen, zu hoch sein. Das Wegenersche  $\alpha_w$  ist meist kleiner Null. Es gilt also  $|\alpha_w| = \alpha$ . Abb.80 gibt die Winkelabhängigkeit von  $\alpha$  nach Wegener (1958) an. Man sieht, daß  $|\alpha_w|$  mit steigender Energie und mit steigendem Streuwinkel  $\vartheta$  (für Streuwinkel  $> \frac{\pi}{2}$ ) fällt. Für Streuwinkel  $> \frac{\pi}{2}$  ist  $\alpha$  praktisch (innerhalb 10 %) unabhängig von der Schichtdicke im Bereich von  $10 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  bis  $1 \text{ mg}/\text{cm}^2$  (in Abb.80) schraffierter Bereich für  $\beta = 0,6$ ). Bei Streuwinkeln  $< \frac{\pi}{2}$  (für  $\beta = 0,6$ ) ist  $\alpha$  stark abhängig von der Schichtdicke;  $\alpha$  kann das Vorzeichen wechseln und Null werden. Das bedeutet, daß  $\alpha$  für Streuwinkel  $< \frac{\pi}{2}$  keine geeignete Größe in Formel (80) ist. Das starke Ansteigen von  $|\alpha_w|$  mit fallender Energie zeigt Abb.81. In einer weiteren Abb.82 ist  $d$  als Funktion der Energie und des Streuwinkels bei festen  $\alpha d = 0,1$  angegeben.

Ein Vergleich mit experimentellen Werten ist in Abb.83 und 84 dargestellt. Bei  $120^\circ$  findet Mikaelyan (1963) Übereinstimmung mit der Theorie für Elektronenenergien  $\geq 170 \text{ keV}$ ; für kleinere Energien liegen die theoretischen Werte zu tief. Van Klinken (1965, 1966) zeigt dagegen, daß die theoretischen Werte für einen Streuwinkel von  $105^\circ$

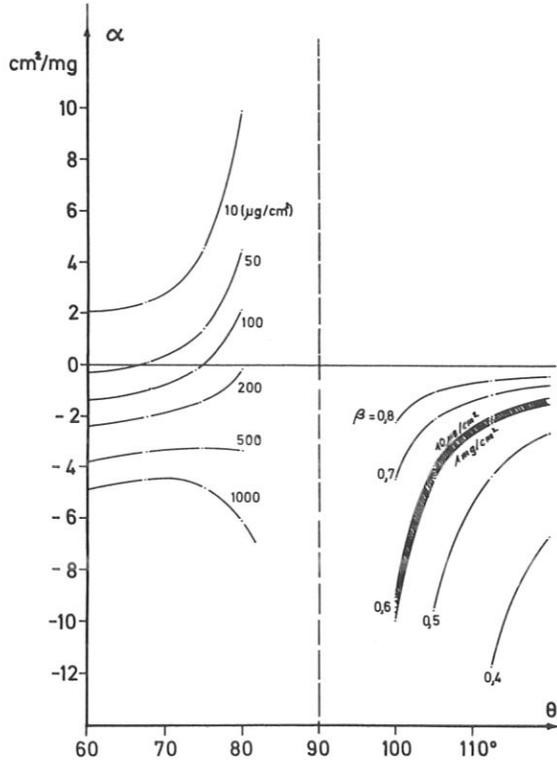


Abb.80 Abhängigkeit der spezifischen Depolarisation  $\alpha$  als Funktion des Streuwinkels  $\vartheta$  bei verschiedenen Energien und für verschiedene Schichtdicken nach Wegener (1958).

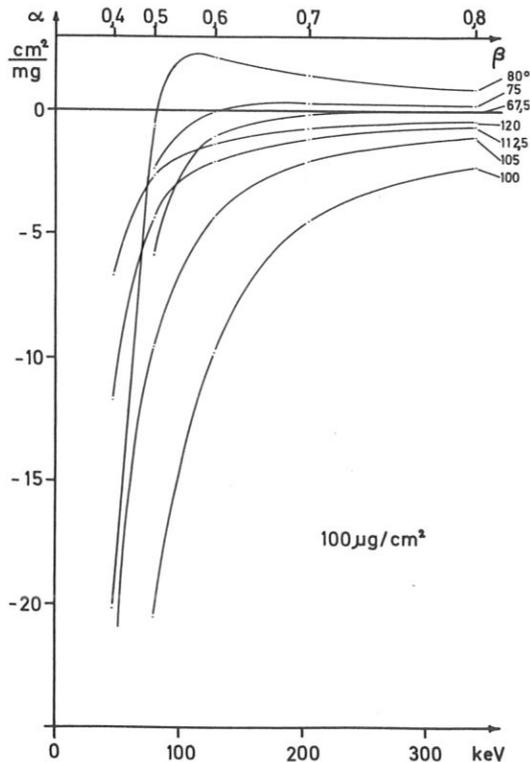
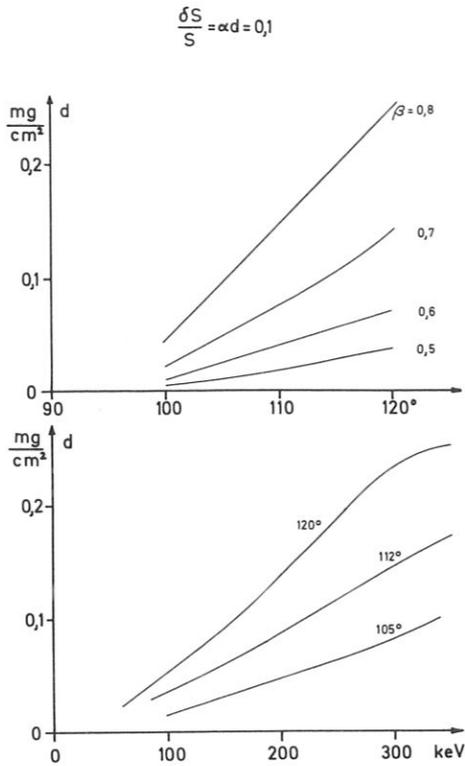
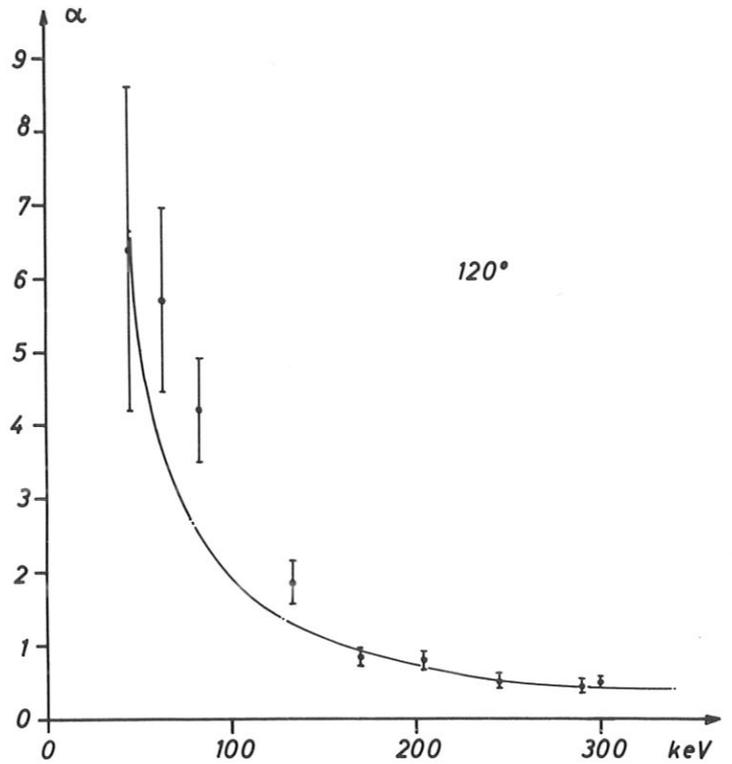


Abb.81

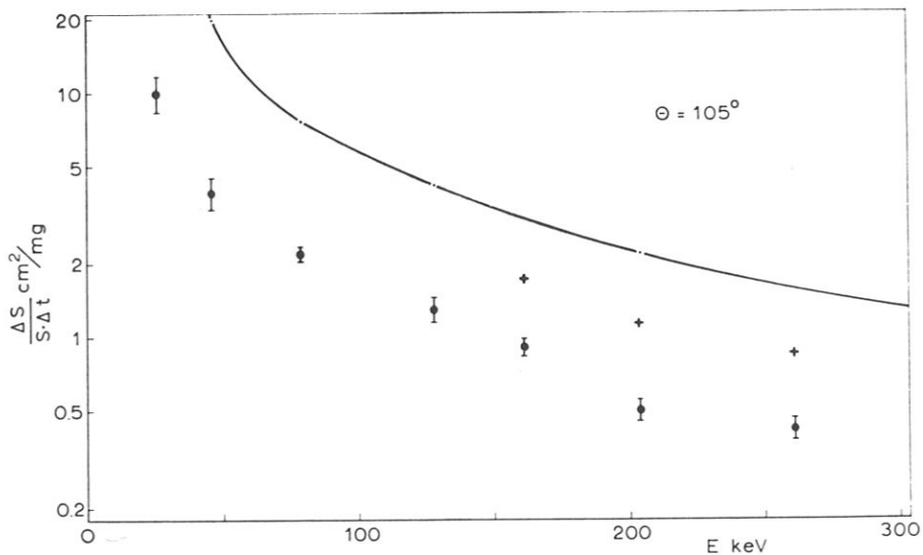
Abhängigkeit der spezifischen Depolarisation  $\alpha$  als Funktion der Energie für verschiedene Streuwinkel  $\vartheta$  nach Wegener (1958)



**Abb.82** Abhängigkeit der Schichtdicke bei fester Depolarisation.  $\frac{\delta S}{S} = 0,1$  als Funktion des Streuwinkels  $\vartheta$  für verschiedene Energien nach Wegener (1958).



**Abb.83** Vergleich von theoretischen (Wegener, 1958) und experimentellen (Mikaelyan, 1963)  $\alpha$ -Werten als Funktion der Elektronenenergie bei einem Streuwinkel von  $120^\circ$ .



**Abb.84** Vergleich von theoretischen (Wegener, 1958) und experimentellen (van Klinken, 1965, 1966)  $\alpha$ -Werten als Funktion der Elektronenenergie bei einem Streuwinkel von  $105^\circ$  (• Transmissionsstellung, + Reflexionsstellung).

für den gesamten Energiebereich zu hoch liegen. Überhöhte theoretische Werte ergaben sich auch bei Brosi u.a. (1962) für  $\theta = 135^\circ$  und  $E = 616$  keV. Diese Diskrepanzen werden jedoch durch eine neuere Arbeit von Wegener (1960) beseitigt; durch die Anwendung der Bothe-Fermischen Streutheorie wird die Singularität bei  $\theta = 90^\circ$  aufgehoben.

Für den Aufbau eines günstigen Polarisationsdetektors ist es wichtig, wie sich die Analysator-Kenngröße  $K$  mit  $\alpha$  und damit mit dem Streuwinkel  $\theta$  und der Elektronenenergie ändert. Nimmt man an (Müller, 1966) daß sich die Streuwahrscheinlichkeit  $W$  proportional mit der Schichtdicke  $d$  ändert ( $W \sim d$ ), so erhält man mit Formel (80)

$$K \sim \frac{1+\alpha d}{\sqrt{d}} \sim \frac{1+\alpha d}{\sqrt{\alpha d}} \quad (82)$$

für feste Werte von  $\theta$  und  $E$  ( $\alpha = \text{konstant}$ ).

Die Funktion  $K(d)/K(\frac{1}{\alpha})$  ist in Abb.85 aufgetragen und zeigt eine befriedigende Übereinstimmung mit Messungen von van Klinken (1965, 1966) für zwei verschiedene Energien. Man erkennt, daß die Funktion  $K(d)$  nur schwach von  $d$  abhängt, sofern  $d$  nicht zu klein

gewählt wird. Optimal ist der Bereich  $0,5 \leq d \leq 2$ . Man wird sich vorzugsweise jedoch für  $\alpha d \leq 1$  entscheiden, da für größere  $\alpha d$  die Detektorempfindlichkeit stärker absinkt und dadurch der systematische Fehler größer wird.

Um die Abhängigkeit (Müller, 1966) der Größe  $K$  vom Streuwinkel  $\theta$  und der Energie  $E$  zu bestimmen, wählt man  $\alpha d = a$  (fest). Es ergibt sich dann

$$K \sim \frac{1+\alpha d}{S} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot d}} \sim \frac{\sqrt{\alpha}}{S} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}} \quad (83)$$

Die Auftragung von  $K/K_{120^\circ}$  bei fester Energie (133 keV) zeigt (Abb.86), daß große Streuwinkel begünstigt sind. Der Gewinn für Streuwinkel größer als  $120^\circ$  ist unbedeutend. Der Winkelbereich von  $120^\circ$  bis  $135^\circ$  ist auch aus anderen Gründen vorteilhaft: Man befindet sich für einen großen Energiebereich (60 keV bis 300 keV) nahezu im Maximum der Shermanfunktion  $S(\theta)$ , und der DWQ ändert sich langsamer mit  $\theta$  als bei kleineren Streuwinkeln. Das bedeutet, daß die geometrische Justierung bei großen Streuwinkeln nicht so kritisch ist

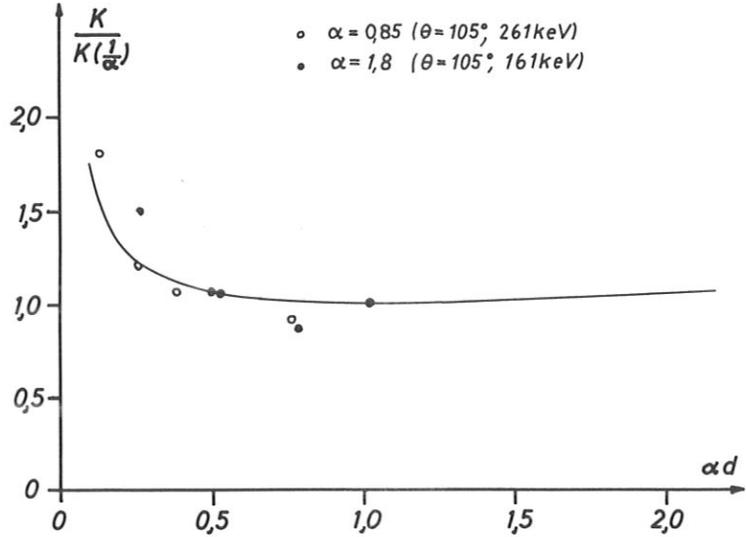


Abb.85 Vergleich der Kenngröße  $K$  nach (82) (Müller, 1966) mit experimentellen Werten (van Klinken, 1965, 1966).

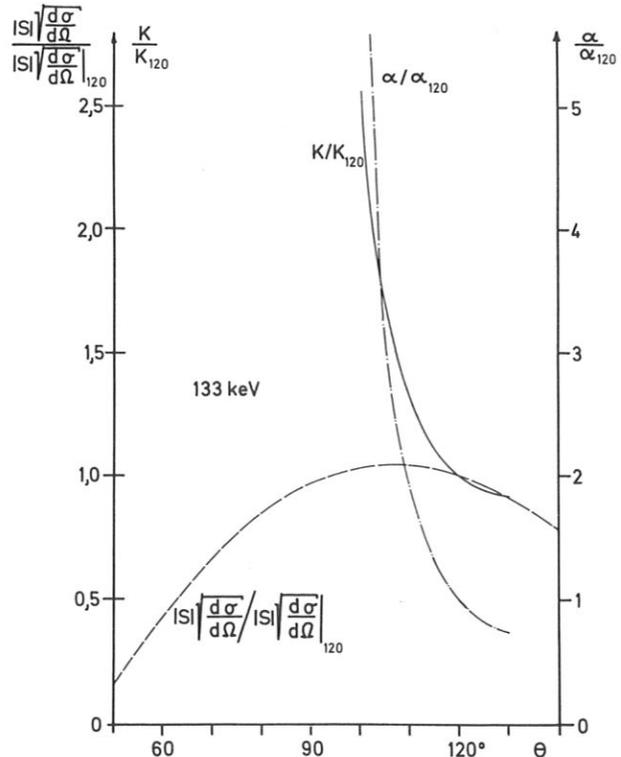


Abb.86 Kenngröße  $K$ , spezifische Depolarisation  $\alpha$  und die Funktion  $|S| \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  als Funktion des Streuwinkels bei einer  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  Elektronenenergie von 133 keV, normiert auf die entsprechenden Größen bei  $120^\circ$ .



$$I_{L,R} \sim \frac{1}{r_{L,R}^2} \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{1}{2} \theta_{L,R}^*} = \frac{1}{r_{L,R}^2} \frac{1}{(1 - \cos \theta_{L,R}^*)^2} \quad (84)$$

Aus der Abb. 88 entnimmt man außerdem

$$\theta_{L,R}^* = \theta \mp \epsilon \mp \varphi_{L,R} \quad \text{und}$$

$$r_{L,R}^2 = h^2 + y^2 \mp 2 hy \sin \theta \approx h^2 (1 \mp 2 \frac{y}{h} \sin \theta),$$

weil wir alle Größen der Ordnung  $\frac{y^2}{h^2}$  vernachlässigen.

Weiterhin errechnet man, daß  $\varphi_L \approx \varphi_R = \frac{y}{h} \cos \theta$ .

Einsetzen aller dieser Größen in (84) ergibt

$$\begin{aligned} I_{L,R}^{-1} &\sim (1 \mp \frac{y}{h} \sin \theta)^2 (1 - \cos(\theta \mp \epsilon) \mp \frac{y}{h} \cos \theta)^2 \\ &\sim (1 - \cos \theta - (\epsilon \pm \frac{y}{h}) \sin \theta)^2 = (1 - \cos \theta)^2 (1 - (\epsilon \pm \frac{y}{h}) \frac{\sin \theta}{1 - \cos \theta})^2. \end{aligned}$$

Für das Zählratenverhältnis ergibt sich also in erster Näherung

$$\frac{I_L}{I_R} = Q = 1 + 4 (\epsilon \pm \frac{y}{h}) \frac{\sin \theta}{1 - \cos \theta} \quad (85)$$

Aus diesem Resultat läßt sich zweierlei folgern:

- 1) ist  $l$  die Entfernung der Strahlblende von der Folie, so daß  $\epsilon \approx \sin \epsilon = \frac{y}{l}$  ist, so erreicht man für negatives  $\epsilon$  und  $l = h$ , daß  $\frac{I_L}{I_R} = 1$  wird. Das heißt, daß man durch die Blende von dem ankommenden Elektronenstrahl nur einen kleinen Anteil zur Messung verwerten kann, daß dann aber keine Rechts-links-Asymmetrie bei einem unpolarisierten Strahl auftritt, wenn der Abstand  $l$  (Blende-Folie) gleich dem Abstand  $h$  (Zähler-Folie) gemacht wird (Müller, 1966).
- 2) Wird bei einer 4-Zähler-Anordnung  $\epsilon$  so justiert, daß  $Q(45^\circ) = 1$  wird, so erhält man  $\epsilon = -\frac{y}{h(45^\circ)}$  und damit  $Q = 1 + 4 y \left( \frac{1}{h(\theta)} - \frac{1}{h(45^\circ)} \right) \frac{\sin \theta}{1 - \cos \theta}$ .

Das bedeutet, daß ein zusätzlicher Satz von Zählern unter einem beliebigen Streuwinkel  $\theta$  auch  $Q = 1$  liefert, wenn  $h(\theta) = h(45^\circ)$  gewählt wird (van Klinken, 1965, 1966).

Der Winkel, unter dem die Zähler III und IV stehen, wurde deshalb zu  $45^\circ$  gewählt, weil für diesen Winkel und für Elektronenenergien zwischen 110 und 160 keV  $|S| < 0,01$  (für Au) ist.  $|S|$  ist zwar auch für den gesamten Energiebereich  $> 10$  keV kleiner als 1 % für Streuwinkel  $\leq 20^\circ$ , jedoch ist die obige Abschätzung für diesen Winkelbereich nicht mehr gültig (Rutherfordstreuung). Außerdem sehen für die Streuwinkel unter  $20^\circ$  die Zähler die Strahlbegrenzungsblende, und die Vielfachstreuung um kleine Winkel kommt möglicherweise ins Spiel.

Außer acht gelassen wurde bei der vorangehenden Betrachtung, daß für die Mehrfachstreuung (insbesondere die Zweifachstreuung) um große Winkel der entsprechende Quotient  $Q_M$  nicht gleichzeitig mit dem  $Q$  für die Einzelstreuung gleich 1 wird. Dadurch ist das unter 2) geschilderte Verfahren nicht so optimal, wie es im ersten Moment aussieht. Eine analoge Abschätzung für die Zweifachstreuung zeigt jedoch, daß

$$Q_{M_2}(\theta_1) = Q_{M_2}(\theta_2), \text{ wenn } \theta_2 = 100^\circ - \theta_1 \text{ ist}$$

und somit die Quotienten  $Q_{M_2}$  bei  $45^\circ$  und  $135^\circ$ , wenn auch nicht eins, so doch wenigstens gleich sind. Auch aus diesem Grund ist für die Position der Zähler III und IV der Streuwinkel von  $45^\circ$  vorzuziehen.

#### 5.3.4. Einfluß der Rückstreuung im Streugefäß:

Wie schon in 5.2.2. gezeigt wurde, verursacht der Rückstreu-Untergrund eine Verkleinerung der Detektorempfindlichkeit  $D$ . Eine Unsymmetrie des Rückstreu-Untergrundes kann durch die unter 5.2.1. beschriebenen Methoden praktisch eliminiert werden. Das gleiche gilt für die Störanteile durch Streuung an Folienträgern (z.B. Formvar bei aufgedampften Goldfolien). Es sollte jedoch die Rückstreuintensität  $J_R$  unter 1 % der gewünschten Streuintensität  $J$  gehalten werden, insbesondere bei Absolutmessungen.

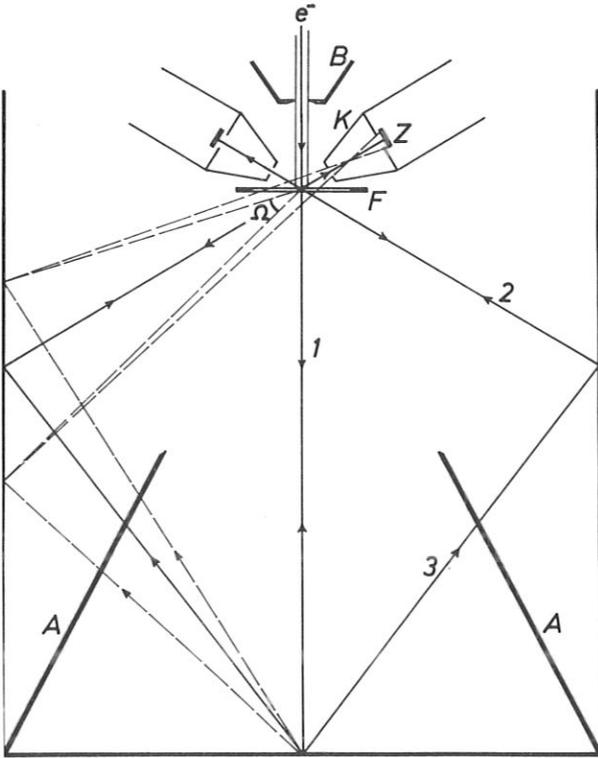


Abb.89

Prinzipskizze zur Rückstreuung von den Streutopfwänden. B Blende, Z Zähler, K Kollimatoraufsätze, F Folie, A Abschirmkegel

Die Störeelektronen gelangen vorwiegend durch die folgenden Streuprozesse in die Zähler (siehe Abb.89):

- 1) Durchgang durch die Folie, Rückstreuung um  $180^\circ \pm \epsilon$  an der Topfwand, Streuung in der Folie um  $180^\circ - \theta$ , wobei  $\theta$  der Soll-Streuwinkel ist.
- 2) Streuung in der Folie um  $180^\circ - \theta$ , Rückstreuung an der Topfwand um  $180^\circ \pm \epsilon$  und Durchlaufen der Folie.
- 3) Direkter Durchgang durch die Folie ( $0^\circ \pm \epsilon^\circ$ ), zweifache Rückstreuung an der Topfwand und wieder Durchgang durch die Folie ( $0^\circ \pm \epsilon^\circ$ ).

Bei 1) und 2) sind die "relativen Störanteile"  $I_R^1, 2/I$  nahezu unabhängig von der Foliendicke bei den meist verwendeten Foliendicken ( $\leq 1 \text{ mg/cm}^2$ ). Demgegenüber ist bei 3) der "absolute" Störanteil  $I_R^3$  unabhängig von der Foliendicke, da die Folie hier ohne Ablenkung ( $\pm \epsilon^\circ$ ) durchlaufen wird. Dieser Anteil kann experimentell durch Ein- und Ausschwenken der Folie direkt durch Messung bestimmt werden. Die Anteile  $I_R^1, 2$  sind experimentell nur sehr schwer zugänglich. Die Störanteile  $I_R/I$  lassen sich auch an Hand gemessener Streudaten (Bienlein und Schlosser, 1963) abschätzen, wenn die Streugeometrie bekannt ist. Abb.90 zeigt den Reflexionskoeffizienten als

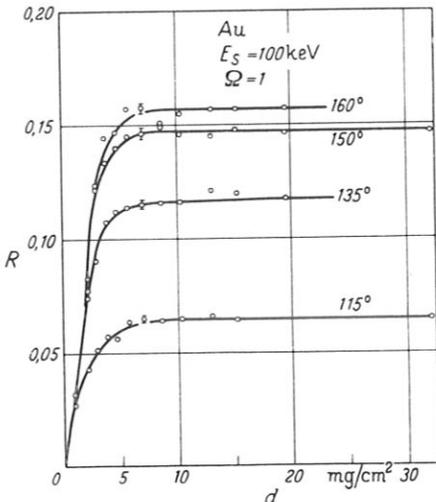
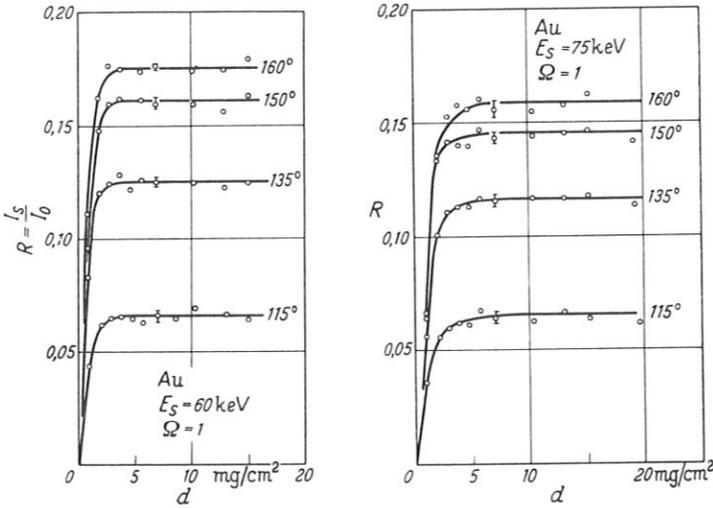


Abb.90

Schichtdickenabhängigkeit des Rückstreckoeffizienten bei Au für verschiedene Energien und Streuwinkel (nach Bienlein und Schlosser, 1963).

Funktion der Foliendicke für verschiedene Streuwinkel und Elektronenenergien für Gold. Man erkennt daraus, daß der Rückstreu- koeffizient für große Foliendicken mit steigender Energie langsam fällt und mit wachsendem Streuwinkel steigt. Für Al ist der Rückstreu- koeffizient bei den entsprechenden Winkeln und Energien um einen knappen Faktor 4 kleiner (Bienlein und Schlosser, 1963). Das ist noch besser ersichtlich aus Abb.91. Die Rückstreuung zeigt nahezu eine Cosinusverteilung, ist also bei  $180^\circ$  am größten. Diese Messungen gelten jedoch nur für senkrechten Einfall.

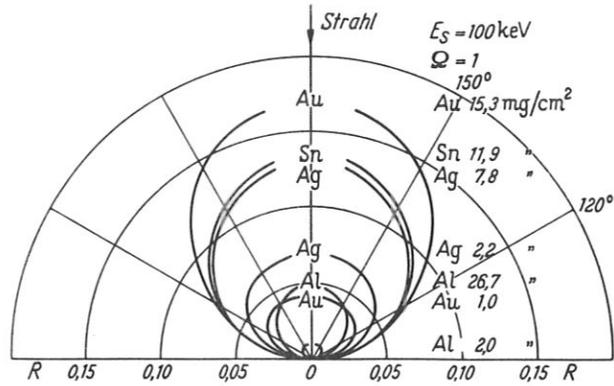


Abb.91 Winkelabhängigkeit des Rückstreu- koeffizienten im Polardiagramm für verschiedene Materialien und Schichtdicken. In dieser Darstellung kann man auf dem Experiment nicht zugängliche Winkel um  $90^\circ$  und  $180^\circ$  extrapolieren (Bienlein und Schlosser, 1963).

Die Rückstreuanteile lassen sich durch folgende Maßnahmen reduzieren:

- 1) Wandmaterial kleiner Kernladungs- zahl  $Z$ : Die DWQ fallen mit abneh- mender Kernladungszahl  $Z$  (siehe Abb.5 und 6) und die Energiever- luste der Elektronen bei der Rück- streuung werden größer, wodurch man den Untergrund mit dem Zähler besser diskriminieren kann. Als Wandmaterial eignet sich Glas ( $\bar{Z} \approx 11$ ), Al ( $Z = 13$ ), Graphit ( $Z = 6$ ) und Be ( $Z = 4$ ).
- 2) Kollimatoraufsätze auf den Zählern: Die von den Zählern eingesehenen Folien- und Wandflächen werden eingeschränkt und dadurch die Bereiche, die zur Rückstreuung beitragen, verkleinert. Ersatzweise kann auch eine Unterteilung des Streutopfes durch eine Trennwand in der Folien- ebene (van Klinken, 1965, 1966) oder eine axiale Sektorstruktur im Streutopf (Raith, 1962) verwendet werden.
- 3) Große Dimensionen des Streutopfes: Dadurch wird der Raumwinkel  $\Omega$  der von der Folie in die von den Zählern eingesehenen Wandbereiche gestreuten Elektronen verkleinert (bei sonst gleichbleibender Geometrie).
- 4) Abschirmzylinder A: Die Wandrückstreuung 3) kann dadurch unterbrochen werden.
- 5) Ein gutes relatives Energie-Auflösungsvermögen der Zähler: Das Verhältnis von Abschnei- deenergie  $E_a$  der Zähler zur Sollenergie  $E_s$  der Elektronen kann groß gemacht werden und da- durch die Ansprechwahrscheinlichkeit für rückgestreute Elektronen (die meistens Energie verloren haben) verringert werden.

Als Anhaltspunkt sei eine übliche Dimensionierung eines Streutopfes (Müller, 1966) angegeben für eine Streugeometrie von  $\theta = 120^\circ$ , bei der der Störanteil in der Streuintensität  $< 1\%$  ist.

- Abstand Folie - Zähler :  $h = 40$  mm
- Zählerfläche :  $F = 5$  mm  $\varnothing$
- Abschneide-Energie der Zähler:  $E_a \approx \frac{1}{2} E_s$
- Kollimatoraufsätze an den Zählern
- Streutopf :  $\varnothing = 300$  mm
- Folie-Rückwand 300 mm
- Wandmaterial: Glas

### 5.3.5. Die Wahl der Detektoren.

Wie man aus dem Bisherigen sieht, gehen auch die Zählereigenschaften entscheidend ein. Es soll deshalb kurz auf die Verwendbarkeit der verschiedenen Zähler eingegangen werden:

An die Zähler müssen die folgenden Bedingungen gestellt werden:

- 1) Verwendbarkeit im Vakuum
- 2) Geringe Auflöszeit, um auch größere Zählraten messen zu können
- 3) Möglichkeit einer Energiediskriminierung.

Daraus ergibt sich, daß derzeit nur Halbleiter- oder Szintillationszähler in Frage kommen. Beide Zähler lassen sich gut verwenden, es gibt jedoch einige Gründe, die Halbleiterzähler vorzuziehen. Die Vorteile gegenüber den Szintillationszählern sind bei einem Mott-Detektor folgende:

- 1) Die geringe Größe
- 2) Eine kleine  $\nu$ -Empfindlichkeit
- 3) Ein besseres Auflösungsvermögen bei geeigneter Elektronik
- 4) Die Unempfindlichkeit gegen magnetische Störfelder und mechanische Erschütterungen
- 5) Die gute Verwendbarkeit im Vakuum.

Den Vorteilen stehen folgende Nachteile gegenüber:

- 1) Die Temperaturempfindlichkeit: ab ca.  $20^{\circ}\text{C}$  steigt das Rauschen stark an
- 2) Die Zunahme des Rauschens mit wachsender Zählerfläche
- 3) Über 165 keV beschränkte Lebensdauer (ca.  $10^9$  Teilchen) durch Strahlschäden (Czullius, 1962).

### 5.3.6. Die Elektronik.

Sie setzt sich zusammen aus Vorverstärker, linearem Hauptverstärker, Impulshöhenanalysator und Zählgerät. Die benötigte Elektronik unterscheidet sich für die beiden Zählertypen lediglich im Vorverstärker. Natürlich benötigt man bei der üblichen 2-Zähler-Anordnung 2 Zählkanäle, bei der 4-Zähler-Anordnung die doppelte Elektronik. Ein Blockschaltbild ist in Abb.92 zu sehen. Ein Testpulsgenerator

und ein Ratemeter sind oft sehr nützlich. Ist das Zählgerät I ein Tuner-Scaler, der das 2. Zählgerät einschaltet und bei einer bestimmten Zählrate des Zählgeräts I abschaltet, so erhält man im Zählgerät II sofort das Zählratenverhältnis  $\frac{N_2}{N_1}$ , wenn  $N_1$  eine Zehnerpotenz  $N_1$  ist. Sind die Zählraten  $N_1$  und  $N_2$  nicht zu klein, so kann über die beiden Ratemeter eine Asymmetrie-Registrierung

$$\frac{N_1 - N_2}{N_1 + N_2}$$

vorgenommen werden, die mit

einem Kompensationsschreiber geschrieben werden kann (Müller, 1966).

Liegt der Mott-Detektor auf Hochspannung, so ist es zwar nicht notwendig, jedoch recht angenehm, die Elektronik auf Erdpotential zu haben. Dazu dient der in Abb.92 angedeutete Impulstransformator (Müller, unveröffentlicht). Er koppelt die Vorverstärker-Impulse induktiv aus durch zwei Spulen, die hinreichend gut voneinander isoliert sind.

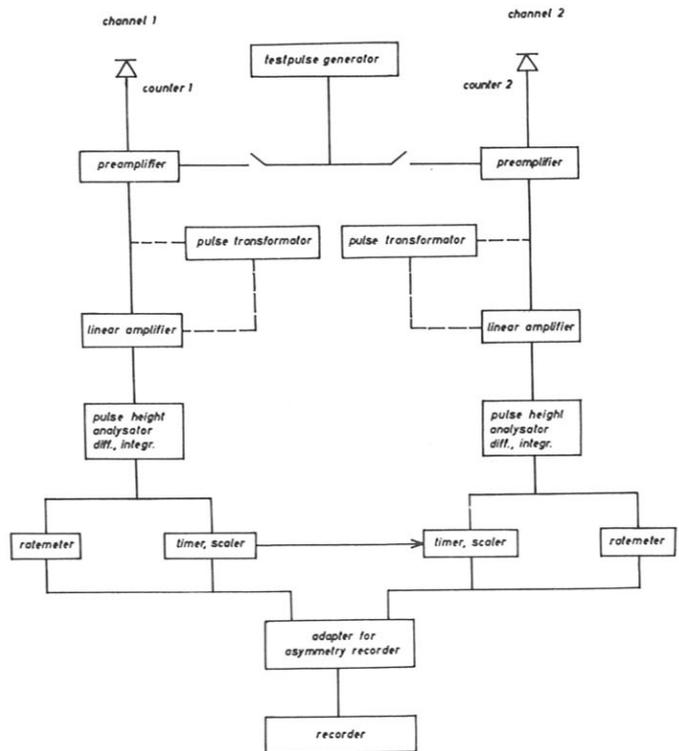


Abb.92 Blockschaltbild für die Elektronik eines Mott-Detektors.

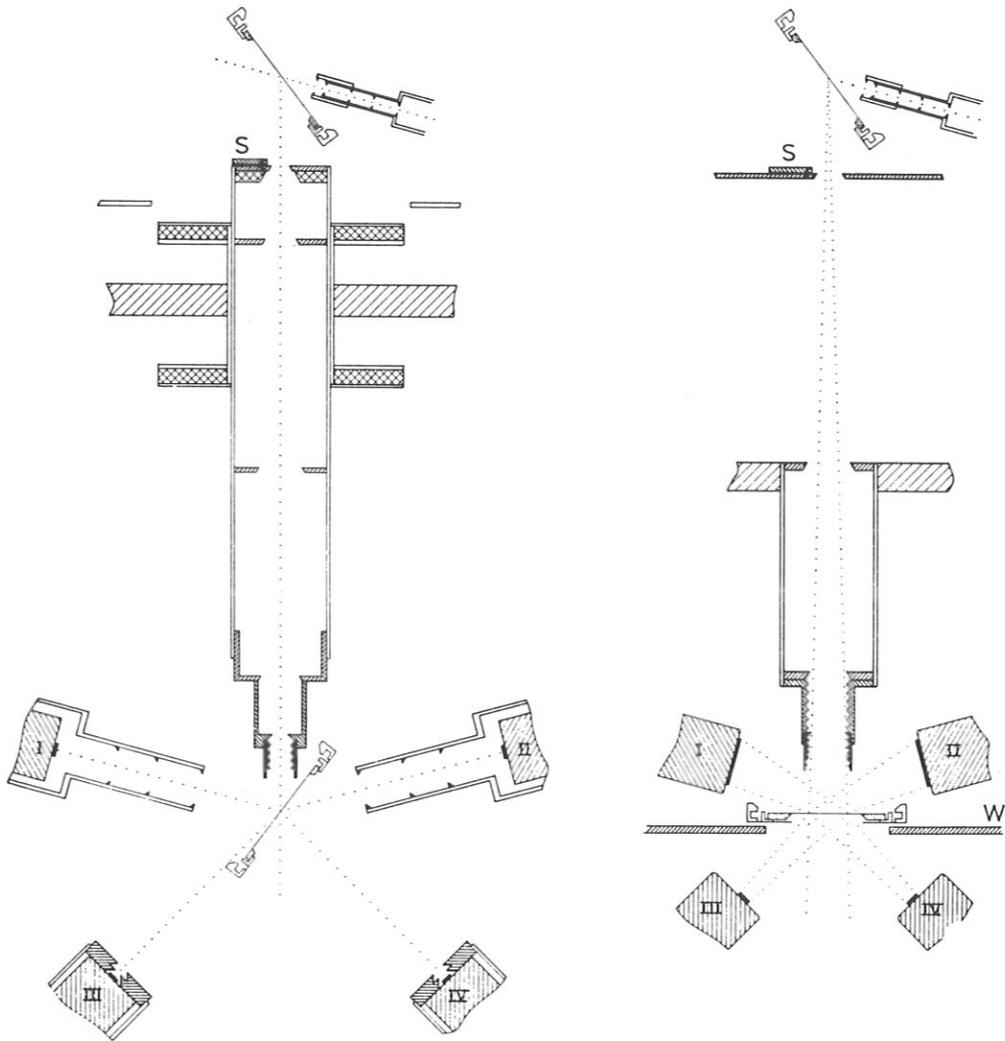
An die Schnelligkeit der Elektronik werden nur bei hohen Zählraten und bei gepulsten Elektronenstrahlen hohe Anforderungen gestellt (Polarisierte Elektronen durch Spinaustausch (Farago und Siegmann, 1966/1968) und Feldemission bei gepulsten Magnetfeldern (Hofmann u.a., 1967; Chrobok u.a., 1968). Für die meisten Probleme dürfte jedoch eine MHz-Elektronik ausreichen.

### 5.3.7. Relativ- und Absolutmessungen.

Die günstigste Anordnung eines Mott-Detektors hängt davon ab, was man messen möchte. Bei Absolutmessungen muß der einfallende Strahl gut prallel sein, die Zähler dürfen nur einen kleinen Raumwinkel erfassen (die Sherman-Funktion ist winkelabhängig), der Rückstreu-Untergrund muß wenigstens unter 1 % herabgedrückt werden, und es muß eine Schichtdickenabhängigkeit gemessen werden, um auf Schichtdicke Null interpolieren zu können. Bei einer für solche Absolutmessungen geeigneten Apparatur hat man Ansprechwahrscheinlichkeiten  $W \approx 10^{-5}$ . Bei Relativmessungen sind die Einschränkungen geringer, insbesondere können die Zähler einen größeren Raumwinkel erfassen. Man kann dann Ansprechwahrscheinlichkeiten  $W \approx 10^{-3}$  erreichen. Das bedeutet natürlich, daß man mit kürzeren Meßzeiten auskommt. Für alle Arten von Mott-Detektoren ist jedoch die Vierzähleranordnung am vorteilhaftesten, da eine Nullmessung gleichzeitig ausgeführt wird. Dadurch können zeitlich veränderliche Effekte am besten eliminiert werden, die sonst erhebliche Schwierigkeiten verursachen können; außerdem spart man Meßzeit.

### 5.3.8. Beispiele von Mottstreuern.

Die ausführlichsten Untersuchungen von Mott-Detektoren stammen von Raith (1962), van Klinken (1965, 1966) und Müller (1966). Weitere Mott-Detektoren wurden zur Messung der Sherman-Funktion (Shull u.a., 1943; Shinohara, 1950; Ryu, 1952/53; Ryu u.a., 1953; Pettus, 1958; Bienlein u.a., 1959; Nelson und Field, 1959; Ladage, 1961; Spivak u.a., 1961; Apalin u.a., 1962; Mikaelyan u.a., 1963; Eckardt u.a., 1964; van Klinken, 1965/66; Jost und Kessler, 1965), zur Bestimmung der Polarisation der  $\beta$ -Zerfalls-Elektronen (Spivak u.a., 1961; Eckardt u.a., 1964; van Klinken, 1965/66; Brosi u.a., 1962; Greenberg u.a., 1960; Cavanagh u.a., 1957; Frauenfelder u.a., 1957; de Waard und Poppeman, 1957; Heintze, 1957; de Shalit u.a., 1957; Langevin-Joliot u.a., 1957; Bühring und Heintze, 1958; Heintze und Bühring, 1958; Alikhanov u.a., 1958; Bienlein u.a., 1957; Bienlein u.a., 1959; Bühring, 1959; Spivak und Mikaelyan, 1960/61; Schatz u.a., 1964), zur Bestimmung des g-Faktors des freien Elektrons (Lonisell u.a., 1954) und bei der Erzeugung polarisierter Elektronenstrahlen mit anderen Methoden (Farago und Siegmann, 1966/68; Hofmann u.a., 1967; Chrobok u.a., 1968; Fowler und Marton, 1959; Raith und Schliepe, 1962; von Issendorff und Fleischmann, 1962; Boersch u.a., 1964; Long u.a., 1965/65; Donnally u.a., 1968; Busch u.a., 1969/69; McCusker u.a., 1969) verwendet. Als eine der günstigsten Anordnungen sei die von van Klinken in Abb.93 angegebene. Andere 4-Zähler-Anordnungen wurden von Eckardt u.a., Brosi u.a. und von Raith benutzt. Die Zähler III und IV waren jedoch gegenüber der Arbeit von van Klinken bei einem Streuwinkel von  $15^\circ$  angebracht. Die meisten in der Literatur angegebenen Mott-Detektoren arbeiten bei Streuwinkeln von  $120^\circ$ , es gibt jedoch auch Anordnungen bei Streuwinkeln von  $60^\circ$ ,  $70^\circ$ ,  $75^\circ$ ,  $78^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $105^\circ$ ,  $118^\circ$ ,  $120^\circ$ ,  $130^\circ$  und  $135^\circ$ , sowie Detektoren mit variablen Streuwinkeln. Die am häufigsten angewandten Elektronenenergien liegen zwischen 100 und 200 keV, es wurde jedoch auch bei kleineren Energien ab 30 keV - 100 keV, sowie bei höheren Energien bis 620 keV gemessen. Bei den früheren Mott-Detektoren wurden in der Regel Geiger-Müller-Zählrohre, später dann auch Szintillationszähler, und erst in neuester Zeit auch Halbleiterzähler benutzt.



**Abb.93** Elastische Doppelstreuung an Au-Folien mit 4-Zähler-Anordnung nach van Klinken (1965/66)

- a) Anordnung mit kleiner Apertur (Transmissionsstellung)
- b) Anordnung mit großer Apertur (Reflexionsstellung)

#### 5.4. Polarisationsdetektor bei kleinen Energien.

##### 5.4.1. Allgemeine Betrachtungen.

Auf Grund der Beugungsstruktur gibt es in diesem Bereich sehr viele Energien, bei denen man einen Detektor bauen könnte. In Frage kommt hauptsächlich der Bereich zwischen 100 eV und 1000 eV. Besonders günstig ist ein Streuwinkel  $\theta$ , unter dem die beiden Detektor stehen, bei dem man für verschiedene Energien hohe Werte für  $S \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  erhält. Man kann den zu untersuchenden Elektronenstrahl auf die verschiedenen Energien beschleunigen (verzögern) und die Polarisationsgrade des Elektronenstrahls für die verschiedenen Detektorvektoren  $\vec{D}$ , deren Betrag  $D$  gleich der Shermanfunktion  $S$  ist, bestimmen. Ein solcher geeigneter Streuwinkel ist  $\theta = 90^\circ$  (siehe Abb.94) für Hg als Streuer. Für die drei Energien 300 eV, 700 eV und 900 eV gibt es keinen Streuwinkel, der für alle drei Energien gleich günstige Werte für  $S \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  liefert. Diese Anordnung ist vorteilhaft, weil sie eine Kontrollmessung gestattet, bei der die Detektorempfindlichkeit  $D$  ein anderes Vorzeichen (abgesehen vom absoluten Betrag) hat:  $S > 0$  bei 700 eV und 900 eV und  $S < 0$  bei 300 eV. Sicher lassen sich auch andere günstige Streuwinkel für andere Energien finden. Im Prinzip ist es natürlich möglich, die Detektoren schwenkbar zu bauen, so daß man bei jeder

Energie die Detektoren auf den optimalen Streuwinkel stellen kann.

Will man den systematischen Fehler klein machen, so muß man die Energie und den Winkel wählen, bei denen eine hohe Detektorempfindlichkeit  $D$  vorliegt. Das bedeutet aber, bei den scharfen Maxima der Shermanfunktion, daß man sich auf sehr kleine Raumwinkel, die von den Zählern erfaßt werden, beschränken muß. Dies bewirkt eine nicht vertretbare Verlängerung der Zählzeiten.

5.4.2. Wahl des Streuers und Energiediskriminierung.

Als Detektor empfiehlt sich ein Element, das sich leicht verdampfen läßt oder das schon gasförmig ist, und das hinreichend hohe Polarisationswerte zuläßt. Es kommt daher vor allem Hg in Frage, das auch am besten untersucht ist. Eine Alternative dazu wäre Xe, das jedoch ziemlich teuer ist. Xe hätte den Vorteil, daß eine Heizung wie bei Hg fortfällt und vakuumtechnisch ein sauberes Arbeiten möglich ist. Das im periodischen System neben Xe stehende J hat den Nachteil, daß es molekulare Dämpfe bildet, die eine Herabsetzung der Detektorempfindlichkeit bewirken. Eine Verwendung von festen Targets bringt eine Verschlechterung, da die Streuintensität kaum größer, dafür aber die Detektorempfindlichkeit geringer wird. Außerdem wächst der Untergrund an mehrfach und inelastisch gestreuten Elektronen.

Die Mehrfachstreuung im Dampfstrahl kann vernachlässigt werden, wenn die Dichte im Dampfstrahl nicht zu hoch gewählt wird. Die maximale Dichte, die zulässig ist, um die Detektorempfindlichkeit  $D$  nicht zu verkleinern, kann experimentell durch Erhöhung der Temperatur im Verdampfungsgefäß bestimmt werden. Während also die Mehrfachstreuung vernachlässigt werden kann, muß die inelastische Streuung berücksichtigt werden. Die Ionisierungs- und Anregungsquerschnitte sind in diesem Energiebereich groß. Diese inelastisch gestreuten Elektronen müssen von den elastisch gestreuten Elektronen abgetrennt werden. Dazu dient eine Filterlinse (Keck und Deichsel, 1960; Simpson und Marton, 1961; Kessler und Lindner, 1964) vor dem Zähler, die Elektronen mit Energieverlusten größer oder gleich der niedrigsten Anregungsstufen des Detektorelements nicht hindurchläßt. Bei Hg z.B. müssen Elektronen mit Energieverlusten  $\geq 4$  eV abgetrennt werden.

5.4.3. Rückstreuung, Strahljustierung und Nachweis.

Die Rückstreuung von den Wänden spielt eine erhebliche Rolle, da der DWQ für Rückstreuung mit fallender Elektronenenergie zunimmt. Es ist deshalb notwendig, trotz der kleinen Raumwinkel, die die Zähler erfassen, alle Teile der Apparatur, die von Elektronen getroffen werden können, zu graphitieren. Große Gefäßdimensionen erhöhen die Wirksamkeit, falsche Elektronen

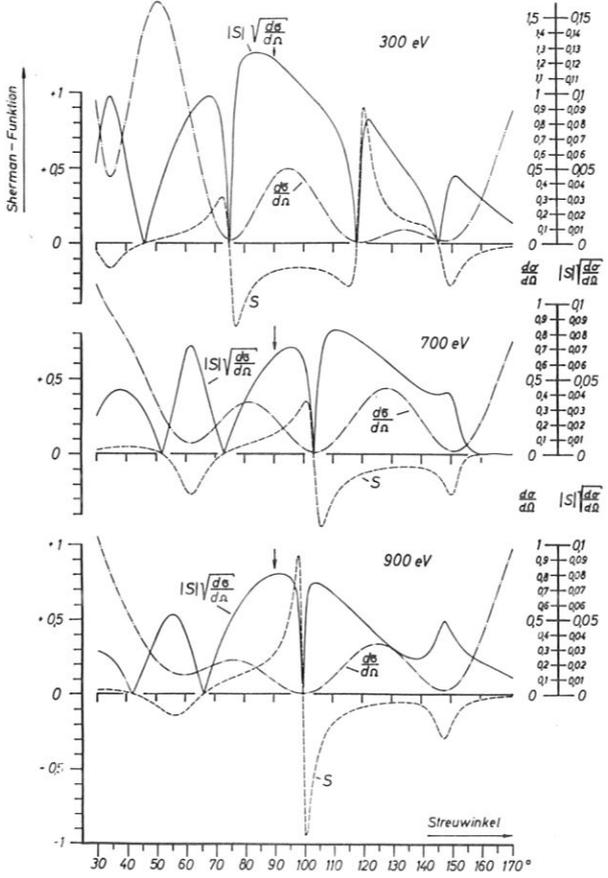


Abb.94 Shermanfunktion  $S$  (----) DWQ (-.-.-) und die Funktion  $|S| \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  (—)

als Funktion des Streuwinkels bei Elektronenenergien von 300 eV, 700 eV und 900 eV (nach Werten von Holzwarth und Meister, 1964).

zu unterdrücken. Auch aus diesen Gründen ist ein  $90^\circ$ -Detektor günstig, da beide Zähler gegenüber stehen.

Durch die geringe Elektronenenergie und die relativ langen Wege (10 - 100 cm) ist es notwendig, das magnetische Erdfeld zu kompensieren bis auf Werte  $\leq 10$  mG. Die Kompensation erreicht man am einfachsten mit Helmholzspulen.

Als Nachweis für die gestreuten Elektronen kommen nur offene Multiplier in Frage. Die Elektronik ist im Prinzip die gleiche wie in 5.3.6. Hier entfallen die Impulstransformatoren und die Impulshöhenanalysatoren.

Polarisationsdetektoren bei kleineren Energien werden bis jetzt nur von der Mainzer Gruppe verwendet. Die Abb.95 und 96 zeigen jeweils eine Auf- und eine Seitenansicht.

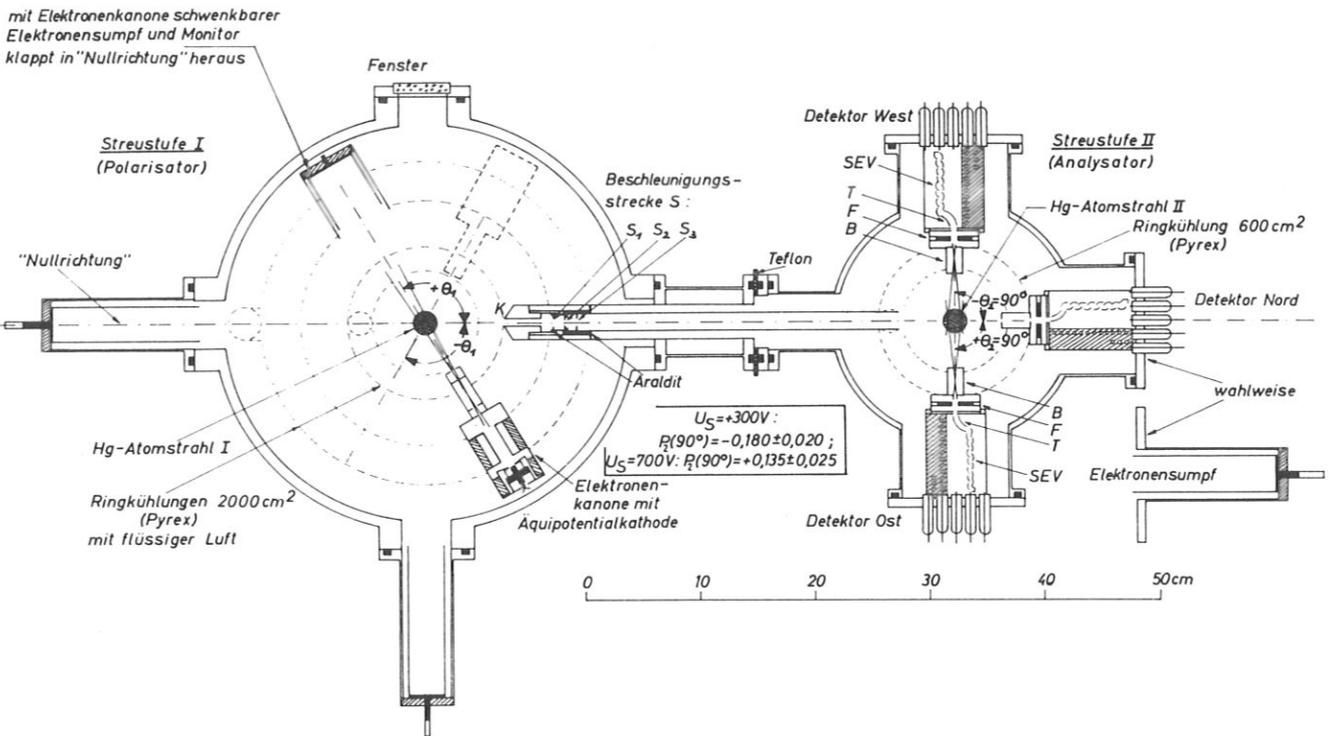


Abb.95 Elastische Doppelstreuung an freien Hg-Atomen. Horizontalschnitt der Versuchsanordnung, schematisch aber maßstabgerecht nach Deichsel u.a. (1966)

- T Zylinderkompensator zur Abtrennung von Ionen
- F Filterlinse zur Abtrennung unelastisch gestreuter Elektronen
- B Blenden

Nicht eingezeichnet ist die mit Helmholzspulen ausgeführte Erdfeldkompensation.

### 5.5. Vergleich der Polarisations-Detektoren.

Nach der Kurve  $S \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  in Abb.76 sieht es so aus, als sollte ein Detektor bei kleinen Energien günstiger sein (für andere Streuwinkel sehen die entsprechenden Kurven ähnlich aus). Nun kommt es allerdings nicht nur auf die Größe  $D \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  an, sondern auf  $D \cdot \sqrt{W}$  mit  $W = \rho \frac{d\sigma}{d\Omega} \pi \alpha_s^2 w$ . Bei kleinen Energien kann man erreichen, daß  $D$  ungefähr genauso groß ist wie bei hohen Energien, eventuell sogar größer. Der Winkel  $\alpha_s$  (halber Öffnungswinkel des Raumwinkels, den die Zähler erfassen) wird bei kleiner Energie im allgemeinen klein, kann aber bei günstigen Streuwinkeln (wo  $S$  über einen großen Winkelbereich nahezu konstant ist) ungefähr gleich groß wie bei hohen Energien gewählt werden, allerdings unter Einbuße an Detektorempfindlichkeit  $D$ . Die Anzahl der Streuzentren ist bei hohen Energien um ca. 3 Zehnerpotenzen größer (grobe Abschätzung), so daß bei angenommenen gleich großen  $w$

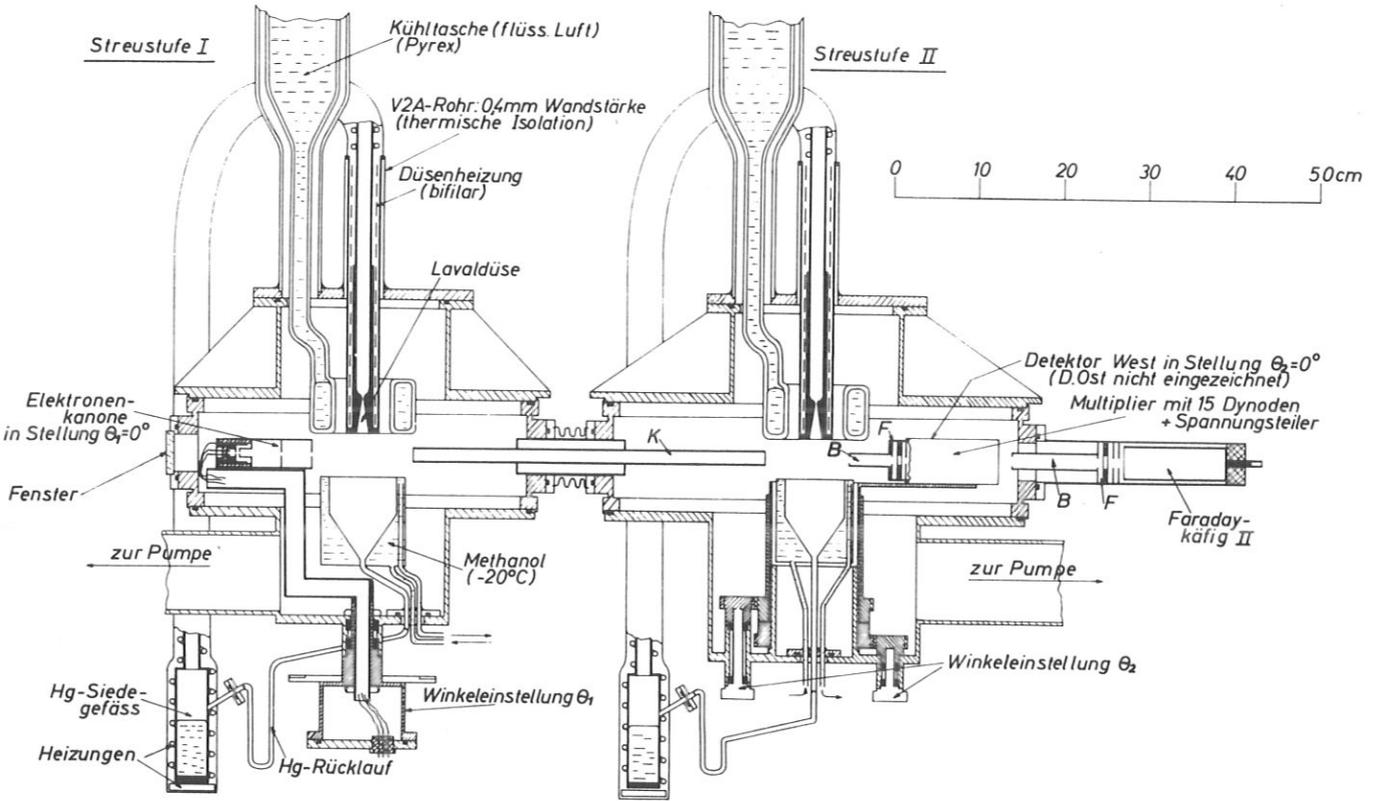


Abb.96 Elastische Doppelstreuung an freien Hg-Atomen. Vertikalschnitt der beiden Streustufen nach Deichsel und Reichert (1965).  
Nicht eingezeichnete Elemente siehe Unterschrift zur Figur 83.

der Ausdruck  $D \sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$  für beide Polarisationsdetektoren die gleiche Größe besitzt, also beide Detektoren gleichwertig sein sollten.

Praktisch ist jedoch das Verhältnis  $\frac{N_{sck}}{N_{pr}}$  bei kleinen Energien niedriger als bei hohen Energien, und zwar im Mittel um 2 bis 3 Zehnerpotenzen. Das liegt zum einen in der Energie-Auflösung, die bei kleinen Energien ca. 1 % beträgt im Gegensatz zu 10 % bis 20 % bei hohen Energien, und zum anderen in der besseren Winkelauflösung bei kleiner Energie, wodurch die Streu-Intensität um ungefähr 1 Zehnerpotenz erniedrigt wird. Dadurch ist bei gleicher Zähl-dauer die Statistik bei kleiner Energie schlechter.

Nachteile eines Polarisations-Detektors bei kleiner Elektronen-Energie gegenüber hoher Elektronenenergien sind außerdem folgende: Er ist nur geeignet als Analysator für niederenergetische Elektronenstrahlen; ein eventuell nötiger UHV-Aufbau für Polarisationsmessungen bei LEED ist infolge des Hg-Strahls schwierig.

Vorteilhaft kann ein P-Detektor bei kleinen Energien sein, weil man keine Hochspannung benötigt und somit ein kompakter Aufbau möglich ist.

Alles in allem betrachtet erscheint der Polarisations-Detektor bei hohen Energien vorteilhafter, erstens aus prinzipiellen Erwägungen (Statistik) und zweitens, weil er vielseitiger verwendbar ist.

6. Mathematischer Anhang.

6.1. Bei der elastischen Streuung benötigt man exakt nur zwei Komponenten der Diracschen Wellenfunktion. Das läßt sich folgendermaßen beweisen:

Die Diracgleichung hat die Gestalt

$$[ c (\vec{\alpha} \vec{p}) + m c^2 \beta + W' ] \Psi = 0 \quad (86)$$

$$\text{mit } \Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$$

$\vec{\alpha}$  und  $\beta$  sind die vierreihigen Matrizen

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \text{ mit } k = 1, 2, 3 \text{ und } \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (87)$$

wobei die  $\sigma_k$  die Paulischen Spinmatrizen sind

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (88)$$

und  $I$  die Einheitsmatrix

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$\varphi$  ist der Spinor der sogenannten kleinen Komponenten,  $\chi$  der Spinor der großen Komponenten von  $\Psi$ . Einführen von  $\varphi$  und  $\chi$  in die Diracgleichung ergibt

$$\begin{aligned} (m c^2 + W') \varphi + c (\vec{\sigma} \vec{p}) \chi &= 0 \\ c (\vec{\sigma} \vec{p}) \varphi + (-m c^2 + W') \chi &= 0 \end{aligned} \quad (89)$$

Aus der ersten Gleichung von (89) erhält man

$$\varphi = \frac{-c (\vec{\sigma} \vec{p})}{W' + m c^2} \chi$$

Die physikalisch wichtige Größe ist der Betrag der Wellenfunktion

$$\begin{aligned} |\Psi|^2 &= \Psi^\dagger \Psi = \varphi^\dagger \varphi + \chi^\dagger \chi \\ &= \chi^\dagger \frac{c (\vec{\sigma} \vec{p})^\dagger}{W' + m c^2} \cdot \frac{c (\vec{\sigma} \vec{p})}{W' + m c^2} \chi + \chi^\dagger \chi \\ &= \chi^\dagger \frac{c^2 (\vec{\sigma} \vec{p}^*) (\vec{\sigma} \vec{p})}{(W' + m c^2)^2} \chi + \chi^\dagger \chi, \quad \text{da } \sigma^\dagger = \sigma \\ &= \left[ \frac{c^2 |\rho|^2}{(W' + m c^2)^2} + 1 \right] \chi^\dagger \chi \end{aligned}$$

wegen  $(\vec{\sigma} \vec{p}^*) (\vec{\sigma} \vec{p}) = \vec{p}^* \vec{p} + i \sigma (\vec{p}^* \times \vec{p}) = |\rho|^2 = \text{const. nach Vor.}$

6.2. Lösung der Diracgleichung in einem elektrischen Zentralfeld.

Die Diracgleichung werde geschrieben in der Form

$$[(W + eV(r) + mc^2\beta) + c(\vec{\alpha}\vec{p})] \psi = 0 \quad (90)$$

mit der Gesamtenergie  $W$ . Mit (87) und (88) erhält man in kartesischen Koordinaten das lineare Gleichungssystem

$$\left. \begin{aligned} \frac{i}{\hbar c} (W + eV + mc^2) \psi_1 + \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) \psi_4 + \frac{\partial}{\partial z} \psi_3 &= 0 \\ \frac{i}{\hbar c} (W + eV + mc^2) \psi_2 + \left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) \psi_3 - \frac{\partial}{\partial z} \psi_4 &= 0 \\ \frac{i}{\hbar c} (W + eV - mc^2) \psi_3 + \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) \psi_2 + \frac{\partial}{\partial z} \psi_1 &= 0 \\ \frac{i}{\hbar c} (W + eV - mc^2) \psi_4 + \left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) \psi_1 - \frac{\partial}{\partial z} \psi_2 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (91)$$

Da man es hier mit einem kugelsymmetrischen Problem zu tun hat, kann man annehmen, daß die Winkelabhängigkeit (in  $\vartheta$  und  $\varphi$ ) von  $\psi$  durch die Kugelfunktionen gegeben wird. Nach Darwin (1928) benutzt man nicht die normierten Kugelfunktionen  $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ , sondern

$$\Pi_n^m = e^{im\varphi} \Theta_n^m(\vartheta, \varphi) = (n-m)! \sin^m \vartheta \left(\frac{\partial}{d\cos\vartheta}\right)^{n+m} \frac{(\cos^2\vartheta - 1)^n}{2^n \cdot n!} \cdot e^{im\varphi} \quad (92)$$

Um das Gleichungssystem auf Kugelkoordinaten umzuschreiben, verwendet man die folgenden Transformationsformeln

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \cos\varphi \sin\vartheta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos\varphi \cos\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{1}{r} \frac{\sin\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin\varphi \sin\vartheta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \sin\varphi \cos\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \frac{\cos\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos\vartheta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \end{aligned} \right\} \quad (93)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \pm i\frac{\partial}{\partial y} = e^{\pm i\varphi} \left( \sin\vartheta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \pm \frac{i}{r \sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (94)$$

Für die Darwinschen Kugelfunktionen gelten nachstehenden Beziehungen

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{d\vartheta} \Theta_n^m &= m \cot\vartheta \Theta_n^m - (n-m) \Theta_n^{m+1} \\ \frac{d}{d\vartheta} \Theta_n^m &= -m \cot\vartheta \Theta_n^m + (n+m) \Theta_n^{m-1} \end{aligned} \right\} \quad (95)$$

$$\left. \begin{aligned} (2n+1) \sin\vartheta \Theta_n^m &= \Theta_{n+1}^{m+1} - (n-m)(n-m-1) \Theta_{n-1}^{m+1} \\ (2n+1) \sin\vartheta \Theta_n^m &= -\Theta_{n+1}^{m-1} + (n+m)(n+m-1) \Theta_{n-1}^{m-1} \\ (2n+1) \cos\vartheta \Theta_n^m &= \Theta_{n+1}^m + (n-m)(n+m) \Theta_{n-1}^m \end{aligned} \right\} \quad (96)$$

Mit den Formeln (93) bis (96) erhält man folgende Differentialausdrücke, wenn  $f = f(r)$  ist

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) f \Pi_n^m &= \frac{1}{2n+1} \left\{ \left(\frac{df}{dr} - \frac{m}{r} f\right) \Pi_{n+1}^{m+1} - (n-m)(n-m-1) \left(\frac{df}{dr} + \frac{n+1}{r} f\right) \Pi_{n-1}^{m+1} \right\} \\ \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) f \Pi_n^m &= \frac{1}{2n+1} \left\{ -\left(\frac{df}{dr} - \frac{m}{r} f\right) \Pi_{n+1}^{m-1} + (n+m)(n+m-1) \left(\frac{df}{dr} + \frac{n+1}{r} f\right) \Pi_{n-1}^{m-1} \right\} \\ \frac{\partial}{\partial z} (f \Pi_n^m) &= \frac{1}{2n+1} \left\{ \left(\frac{df}{dr} - \frac{m}{r} f\right) \Pi_{n+1}^m + (n+m)(n-m) \left(\frac{df}{dr} + \frac{n+1}{r} f\right) \Pi_{n-1}^m \right\} \end{aligned} \right\} \quad (97)$$

Wählt man nun  $\psi_3$  proportional zu  $\bar{\pi}_n^m$ , so folgt aus (91) und (97), daß die Lösung folgende Gestalt haben muß

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= -i a_1 F(r) \bar{\pi}_{n+1}^m \\ \psi_2 &= -i a_2 F(r) \bar{\pi}_{n+1}^{m+1} \\ \psi_3 &= a_3 G(r) \bar{\pi}_n^m \\ \psi_4 &= a_4 G(r) \bar{\pi}_n^{m+1} \end{aligned} \right\} \quad (98)$$

In den ersten beiden Gleichungen von (98) wurde der Faktor (-i) eingeführt, damit die Funktion F(r) reell wird. Einsetzen dieser Lösung in (91) liefert mit Hilfe von (97) die vier Gleichungen (99a) bis (99d)

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\hbar c} (W + eV + mc^2) (-i a_1) F \bar{\pi}_{n+1}^m \quad (99a) \\ & + \frac{a_4}{2n+1} \left\{ - \left( \frac{dG}{dr} - \frac{n}{r} G \right) \bar{\pi}_{n+1}^m + (n+m+1)(n+m) \left( \frac{dG}{dr} + \frac{n+1}{r} G \right) \bar{\pi}_{n-1}^m \right\} \\ & + \frac{a_3}{2n+1} \left\{ \left( \frac{dG}{dr} - \frac{n}{r} G \right) \bar{\pi}_{n+1}^m + (n+m)(n-m) \left( \frac{dG}{dr} + \frac{n+1}{r} G \right) \bar{\pi}_{n-1}^m \right\} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\hbar c} (W + eV + mc^2) (-i a_2) F \bar{\pi}_{n+1}^{m+1} \quad (99b) \\ & + \frac{a_3}{2n+1} \left\{ \left( \frac{dG}{dr} - \frac{n}{r} G \right) \bar{\pi}_{n+1}^{m+1} - (n-m)(n-m-1) \left( \frac{dG}{dr} + \frac{n+1}{r} G \right) \bar{\pi}_{n-1}^{m+1} \right\} \\ & - \frac{a_4}{2n+1} \left\{ \left( \frac{dG}{dr} - \frac{n}{r} G \right) \bar{\pi}_{n+1}^{m+1} + (n+m+1)(n-m-1) \left( \frac{dG}{dr} + \frac{n+1}{r} G \right) \bar{\pi}_{n-1}^{m+1} \right\} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\hbar c} (W + eV - mc^2) a_3 G \bar{\pi}_n^m \quad (99c) \\ & - \frac{i a_2}{2n+3} \left\{ - \left( \frac{dF}{dr} - \frac{n+1}{r} F \right) \bar{\pi}_{n+2}^m + (n+m+2)(n+m+1) \left( \frac{dF}{dr} + \frac{n+2}{r} F \right) \bar{\pi}_n^m \right\} \\ & - \frac{i a_1}{2n+3} \left\{ \left( \frac{dF}{dr} - \frac{n+1}{r} F \right) \bar{\pi}_{n+2}^m + (n+m+1)(n+1-m) \left( \frac{dF}{dr} + \frac{n+2}{r} F \right) \bar{\pi}_n^m \right\} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\hbar c} (W + eV - mc^2) a_4 G \bar{\pi}_n^{m+1} \quad (99d) \\ & - \frac{i a_1}{2n+3} \left\{ \left( \frac{dF}{dr} - \frac{n+1}{r} F \right) \bar{\pi}_{n+2}^{m+1} - (n-m+1)(n-m) \left( \frac{dF}{dr} + \frac{n+2}{r} F \right) \bar{\pi}_n^{m+1} \right\} \\ & + \frac{i a_2}{2n+3} \left\{ \left( \frac{dF}{dr} - \frac{n+1}{r} F \right) \bar{\pi}_{n+2}^{m+1} + (n+m+2)(n-m) \left( \frac{dF}{dr} + \frac{n+2}{r} F \right) \bar{\pi}_n^{m+1} \right\} = 0 \end{aligned}$$

Die  $a_i$  können so gewählt werden, daß alle vier Gleichungen (99) erfüllt werden. Gilt nämlich

$$a_1 = a_2 = 1 \quad ; \quad a_3 = n+m+1 \quad ; \quad a_4 = -(n-m)$$

so bleiben nur Terme mit gleichen Kugelfunktionen übrig. Das ergibt je eine Differentialgleichung aus (99a,b) und aus (99c,d)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\hbar c} (W + eV + mc^2) F + \frac{dG}{dr} - \frac{n}{r} G = 0 \quad (100) \\ & \frac{1}{\hbar c} (W + eV - mc^2) G + \frac{dF}{dr} + \frac{n+2}{r} F = 0 \end{aligned}$$

Die Lösung hat jetzt folgende Gestalt

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= -i F_n(r) \overline{\pi}_{n+1}^m \\ \psi_2 &= -i F_n(r) \overline{\pi}_{n+1}^{m+1} \\ \psi_3 &= (n+m+1) G_n \overline{\pi}_n^m \\ \psi_4 &= -(n-m) G_n \overline{\pi}_n^{m+1} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\text{für } j = n + \frac{1}{2} > 0 \\ &l = m + \frac{1}{2} \\ &n \geq 0, \text{ ganzzahlig} \end{aligned} \quad (101)$$

Zu gleichem  $\psi_3$  aus (98) gibt es noch einen zweiten Lösungssatz

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= -i (n+m) F_{n-1} \overline{\pi}_{n-1}^m \\ \psi_2 &= +i (n-m-1) F_{n-1} \overline{\pi}_{n-1}^{m+1} \\ \psi_3 &= G_{n-1} \overline{\pi}_n^m \\ \psi_4 &= G_{n-1} \overline{\pi}_n^{m+1} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &j = n - \frac{1}{2} \\ &l = m + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (102)$$

wie man mittels der Gleichungen (99a,b) und zweier (99c,d) entsprechenden Gleichungen zeigen kann. Man erhält wieder zwei zu (100) analoge Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar c} (W + eV + mc^2) F_{n-1} + \frac{dG_{n-1}}{dr} + \frac{n+1}{r} G_{n-1} &= 0 \\ \frac{1}{\hbar c} (W + eV - mc^2) G_{n-1} + \frac{dF_{n-1}}{dr} - \frac{n-1}{r} F_{n-1} &= 0 \end{aligned} \quad (103)$$

Die Differentialgleichungen (103) gehen aus denen in (100) durch das Ersetzen von  $n$  in  $-(n+1)$  hervor.

Da beim Elektron nur zwei Spinstellungen möglich sind, genügt es, für das Streuproblem nur die Lösungen mit  $m = 0$  und  $m = -1$  zur weiteren Rechnung heranzuziehen. Um die Formeln (8a) und (9a) zu erhalten, benötigt man noch die Beziehungen zwischen den Darwinschen Kugelfunktionen und den zugeordneten Legendre-Polynomen. Es gilt

$$\begin{aligned} \overline{\pi}_n^m &= (n-m)! P_n^m e^{im\varphi} \\ \overline{\pi}_n^0 &= n! P_n \\ \overline{\pi}_n^{-1} &= (n-1)! P_n^{-1} e^{-i\varphi} \\ \overline{\pi}_n^{-1} &= (n+1)! P_n^{-1} e^{-i\varphi} = \frac{(n+1)!}{n(n+1)} P_n^{-1} e^{-i\varphi} = (n-1)! P_n^{-1} e^{-i\varphi} \end{aligned} \quad (104)$$

Nach (101) und (102) erhält die Lösung die folgende Gestalt

$$m = 0 \quad \left. \begin{aligned} \psi_3 &= (n+1) G_n \overline{\pi}_n^0 = (n+1) n! G_n P_n \\ \psi_4 &= -n G_n \overline{\pi}_n^{-1} = -n(n-1)! G_n P_n^{-1} e^{-i\varphi} \end{aligned} \right\} \quad (105a)$$

$$\left. \begin{aligned} \psi_3 &= G_{n-1} \overline{\pi}_n^0 = n! G_{n-1} P_n \\ \psi_4 &= G_{n-1} \overline{\pi}_n^{-1} = (n+1)! G_{n-1} P_n^{-1} e^{-i\varphi} \end{aligned} \right\} \quad (105b)$$

$$m = -1 \quad \left. \begin{aligned} \psi_3 &= n G_n \overline{\pi}_n^{-1} = n(n-1)! P_n^{-1} e^{-i\varphi} G_n \\ \psi_4 &= -(n+1) G_n \overline{\pi}_n^0 = -(n+1)n! P_n G_n \end{aligned} \right\} \quad (106a)$$

$$\left. \begin{aligned} \psi_3 &= G_{n-1} \overline{\pi}_n^{-1} = (n-1)! P_n^{-1} e^{-i\varphi} G_{n-1} \\ \psi_4 &= G_{n-1} \overline{\pi}_n^0 = n! P_n G_{n-1} \end{aligned} \right\} \quad (106b)$$

Durch Kürzen mit  $n!$  in (105a) und (106a), mit  $(n-1)!$  in (105b) und (106b) erhält man

$$\left. \begin{aligned} \psi_3 &= (n+1) G_n P_n & \psi_4 &= -G_n P_n' e^{i\varphi} \\ \psi_3 &= n G_{n-1} P_n & \psi_4 &= G_{n-1} P_n' e^{i\varphi} \end{aligned} \right\} \text{für } m=0 \quad (107a)$$

$$\left. \begin{aligned} \psi_3 &= G_n P_n' e^{-i\varphi} & \psi_4 &= -(n+1) P_n G_n \\ \psi_3 &= G_{n-1} P_n' e^{-i\varphi} & \psi_4 &= n G_{n-1} P_n \end{aligned} \right\} \text{für } m=-1 \quad (107b)$$

Dadurch, daß das Verhältnis der gleich indizierten  $\psi$ 's bis auf einen gleichen Faktor konstant sein muß

$$\psi_3 : (n+m+1) \frac{G_n}{G_{n-1}} ; \quad \psi_4 : -(n-m) \frac{G_n}{G_{n-1}}$$

ist auch die Vorzeichenwahl in (9a) möglich.

### 6.3. Bestimmung der Funktionen $f$ und $g$ mit der Partialwellenanalyse.

Die Lösungen  $\psi_3$  und  $\psi_4$  lassen sich nach (8a) in der Form darstellen

$$\begin{aligned} \psi_3 &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ (\ell+1) G_{\ell} + \ell G_{\ell-1} \right\} i^{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \\ \psi_4 &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ -G_{\ell} + G_{\ell-1} \right\} i^{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) e^{i\phi} \end{aligned} \quad (108)$$

In asymptotischer Form, das heißt für große  $r$ , hat  $G_{\ell}$  die Gestalt

$$G_{\ell} \approx \frac{1}{kr} \cdot H_{\ell} \quad (109)$$

wobei  $H_{\ell}$  die asymptotische Lösung der Differentialgleichung (13) sein soll

$$\begin{aligned} H_{\ell} &\approx \frac{i}{2} \left\{ e^{-i(kr - \frac{\ell}{2}\pi)} - S_{\ell} e^{i(kr - \frac{\ell}{2}\pi)} \right\} \\ &= \sin(kr - \ell \frac{\pi}{2}) + \frac{i}{2} (-i)^{\ell} (1 - S_{\ell}) e^{ikr} \\ H_{-\ell-1} &\approx \sin(kr - \ell \frac{\pi}{2}) + \frac{i}{2} (-i)^{\ell} (1 - S_{-\ell-1}) e^{ikr} \end{aligned} \quad (110)$$

Die Größe  $S$  bestimmt die Änderung der auslaufenden Welle und heißt das Diagonalelement der Streumatrix. Einsetzen von (109) und (110) in (108) liefert

$$\begin{aligned} \psi_3 &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{\sin(kr - \frac{\ell}{2}\pi)}{kr} i^{\ell} P_{\ell} \\ &+ \frac{i}{2k} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ (\ell+1)(1 - S_{\ell}) + \ell(1 - S_{\ell-1}) \right\} P_{\ell} \frac{e^{ikr}}{r} \end{aligned} \quad (111)$$

Durch Vergleich mit (8) folgt daraus

$$f_1(\theta, \phi) = \frac{i}{2k} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ (\ell+1)(1 - S_{\ell}) + \ell(1 - S_{\ell-1}) \right\} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (112)$$

da in asymptotischer Darstellung

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{\sin(kr - \frac{\ell}{2}\pi)}{kr} i^{\ell} P_{\ell} \quad \text{ist.}$$

Ganz analog folgt durch Einsetzen von (109) und (110) in (108)

$$\psi_4 = \frac{i}{2k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (S_{\ell} - S_{\ell-1}) P_{\ell} e^{i\phi} \cdot \frac{e^{ikr}}{r}$$

und damit nach (8)

$$g_1(\phi, \theta) = \frac{i}{2k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (S_{\ell} - S_{\ell-1}) P_{\ell}^2(\cos \theta) e^{i\phi} \quad (113)$$

Im Falle der elastischen Streuung, die behandelt wird, lassen sich die Matrixelemente der Streumatrix durch reelle Streuphasen ausdrücken

$$S_{\ell} = e^{2i\delta_{\ell}} \quad , \quad S_{\ell-1} = e^{2i\delta_{\ell-1}} \quad (114)$$

Mit (114) erhält man dann endgültig die Form (14)

$$f_1(\theta, \phi) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \{ (\ell+1)(e^{2i\delta_{\ell}} - 1) + \ell(e^{2i\delta_{\ell-1}} - 1) \} P_{\ell}$$

$$g_1(\theta, \phi) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \{ -e^{2i\delta_{\ell}} + e^{2i\delta_{\ell-1}} \} P_{\ell} e^{i\phi} = f(\theta) e^{i\phi}$$

Aus dem Vergleich von (8), (9) mit (8a), (9a) erkennt man sofort, daß

$$f_1 = f_2 = f \quad \text{und} \quad g_2 = -f(\theta) e^{-i\phi}$$

sein muß.

#### 6.4. Zusammenhang zwischen Polarisisation und Dichtematrix.

Aus (16) folgt sofort

$$S = \psi \psi^{\dagger} = \begin{pmatrix} AA^* & A\beta^* \\ \beta A^* & \beta\beta^* \end{pmatrix} \quad (115)$$

und weiter

$$\text{tr } S = AA^* + \beta\beta^* = \psi^{\dagger} \psi = I \quad (116)$$

wobei I die Intensität bedeuten soll. Definiert man den Polarisationsvektor durch

$$\vec{p} = \frac{\langle \vec{\sigma} \rangle}{\text{tr } S} \quad (117)$$

so läßt sich mit den Paulischen Spinmatrizen (88) zeigen, daß

$$\text{tr } S \vec{\sigma} = \langle \vec{\sigma} \rangle = \vec{p} \cdot \text{tr } S \quad \text{ist} \quad (118)$$

z.B.

$$\langle \sigma_x \rangle = (A^* \beta^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ \beta \end{pmatrix} = A^* \beta + \beta^* A$$

$$S \vec{\sigma}_x = \begin{pmatrix} AA^* & A\beta^* \\ \beta A^* & \beta\beta^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A\beta^* & AA^* \\ \beta\beta^* & \beta A^* \end{pmatrix}$$

$$\text{tr } S \vec{\sigma}_x = A\beta^* + \beta A^*$$

Multiplizieren von (118) mit  $\vec{\sigma}$  liefert

$$\vec{p} \vec{\sigma} = \frac{\vec{\sigma} \text{tr } S \vec{\sigma}}{\text{tr } S} = \frac{\sum p_i \sigma_i}{\text{tr } S} = 1 \quad (119)$$

Um Gleichung (119) zu beweisen, geht man so vor. Die 2x2 - Matrix  $\rho$  läßt sich allgemein darstellen durch

$$\rho = a \mathbb{1} + b \sigma_x + c \sigma_y + d \sigma_z \quad (120)$$

Dann folgt, da die Pauli-Matrizen die Spur Null haben,

$$\left. \begin{aligned} \text{tr } \rho &= 2a \\ \text{tr } \rho \sigma_x &= 2b, \quad \text{tr } \rho \sigma_y = 2c, \quad \text{tr } \rho \sigma_z = 2d \end{aligned} \right\} \quad (121)$$

Mit (120) und (121) ergibt sich

$$\rho = \frac{1}{2} \text{tr } \rho + \frac{1}{2} \vec{\sigma} \text{tr } \rho \vec{\sigma}$$

oder

$$\vec{\sigma} \text{tr } (\rho \vec{\sigma}) = 2\rho - \text{tr } \rho \quad (122)$$

Mit (122) stellt sich die Richtigkeit von (119) heraus und damit

$$\rho = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + \vec{P} \vec{\sigma}) \text{tr } \rho \quad \text{in (20)} \quad (123)$$

Die gleichen Formeln (116), (119) und (123) gelten auch für gewichtete Mischungen reiner Zustände.

Beweis von Formel (25).

$$\begin{aligned} \rho_2 &= T_2 \rho_1 T_2^\dagger = (f_2 - i g_2 \vec{n}_2 \vec{\sigma}) \frac{1}{2} I_0 I_1 (1 + \vec{P}_1 \vec{\sigma}) (f_1^* + i g_1^* \vec{n}_1 \vec{\sigma}) \\ &= \frac{1}{2} I_0 I_1 \left\{ (f_2 - i g_2 \vec{n}_2 \vec{\sigma}) (f_1^* + i g_1^* \vec{n}_1 \vec{\sigma}) + (f_2 - i g_2 \vec{n}_2 \vec{\sigma}) \vec{P}_1 \vec{\sigma} (f_1^* + i g_1^* \vec{n}_1 \vec{\sigma}) \right\} \\ &= \frac{1}{2} I_0 I_1 \left\{ I_2 + D_2 \vec{n}_2 \vec{\sigma} + [f_2 \vec{P}_1 \vec{\sigma} - i g_2 (\vec{n}_2 \vec{\sigma}) (\vec{P}_1 \vec{\sigma})] (f_1^* + i g_1^* \vec{n}_1 \vec{\sigma}) \right. \\ &= \frac{1}{2} I_0 I_1 \left\{ I_2 + D_2 \vec{n}_2 \vec{\sigma} + f_2 f_1^* \vec{P}_1 \vec{\sigma} + i f_2 g_1^* (\vec{P}_1 \vec{\sigma}) (\vec{n}_2 \vec{\sigma}) - i g_2 f_1^* (\vec{n}_2 \vec{\sigma}) (\vec{P}_1 \vec{\sigma}) \right. \\ &\quad \left. + [g_2 g_1^* (\vec{n}_2 \vec{\sigma}) (\vec{P}_1 \vec{\sigma})] \vec{n}_2 \vec{\sigma} \right\} \\ &= \frac{1}{2} I_0 I_1 \left\{ I_2 + D_2 \vec{n}_2 \vec{\sigma} + f_2 f_1^* \vec{P}_1 \vec{\sigma} + i (f_2 g_1^* - g_2 f_1^*) \vec{P}_1 \vec{n}_2 - (f_2 g_1^* + g_2 f_1^*) \vec{P}_1 \times \vec{n}_2 \vec{\sigma} \right. \\ &\quad \left. + g_2 g_1^* [\vec{P}_1 \vec{n}_2 + i \vec{\sigma} \vec{n}_2 \times \vec{P}_1] \vec{n}_2 \vec{\sigma} \right\} \\ &= \frac{1}{2} I_0 I_1 \left\{ I_2 + D_2 \vec{n}_2 \vec{\sigma} + f_2 f_1^* \vec{P}_1 \vec{\sigma} + D_2 \vec{P}_1 \vec{n}_2 - B_2 \vec{P}_1 \times \vec{n}_2 \vec{\sigma} \right. \\ &\quad \left. + g_2 g_1^* (\vec{P}_1 \vec{n}_2) \vec{n}_2 \vec{\sigma} + g_2 g_1^* \vec{n}_2 \times (\vec{n}_2 \times \vec{P}_1) \vec{\sigma} \right\} \\ &= \frac{1}{2} I_0 I_1 \left\{ I_2 + D_2 \vec{n}_2 \vec{\sigma} + f_2 f_1^* \vec{P}_1 \vec{\sigma} + D_2 \vec{P}_1 \vec{n}_2 - B_2 \vec{P}_1 \times \vec{n}_2 \vec{\sigma} \right. \\ &\quad \left. + g_2 g_1^* (\vec{P}_1 \vec{n}_2) \vec{n}_2 \vec{\sigma} + g_2 g_1^* (\vec{P}_1 \vec{n}_2) \vec{n}_2 \vec{\sigma} - g_2 g_1^* \vec{P}_1 \vec{\sigma} \right\} \\ \rho_2 &= \frac{1}{2} I_0 I_1 \left\{ (I_2 + D_2 \vec{P}_1 \vec{n}_2) \right. \\ &\quad \left. + C_2 \vec{P}_1 \vec{\sigma} + [D_2 + (I_2 - C_2) (\vec{P}_1 \vec{n}_2)] \vec{n}_2 \vec{\sigma} - B_2 \vec{P}_1 \times \vec{n}_2 \vec{\sigma} \right\} \end{aligned}$$

q. e. d.

6.5. Beweis der Formeln (51) .

Ausgehend von den Formeln (49)

$$\left. \begin{aligned} E(\theta) &= \frac{1}{4i} \sum_{\ell=1}^{\infty} \ell \{ e^{2i\delta_{\ell-1}} + e^{2i\delta_{\ell-1}} - 2 \} \{ P_{\ell} + P_{\ell-1} \} \\ H(\theta) &= \frac{1}{4i} \sum_{\ell=1}^{\infty} \ell \{ e^{2i\delta_{\ell-1}} - e^{2i\delta_{\ell-1}} \} \{ P_{\ell} - P_{\ell-1} \} \end{aligned} \right\} \quad (49)$$

erhält man für

$$\begin{aligned} E(\theta) - H(\theta) &= \frac{1}{2i} \sum_{\ell=1}^{\infty} \ell \{ (e^{2i\delta_{\ell-1}} - 1) P_{\ell-1} + (e^{2i\delta_{\ell-1}} - 1) P_{\ell} \} \\ &= \frac{1}{2i} \sum_{\ell=0}^{\infty} \{ (\ell+1)(e^{2i\delta_{\ell}} - 1) + \ell(e^{2i\delta_{\ell-1}} - 1) \} P_{\ell} \\ &= k f(\theta) \end{aligned}$$

wegen (14) . Analog läuft der zweite Beweis

$$\begin{aligned} E(\theta) \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} + H(\theta) \operatorname{cotg} \frac{\theta}{2} &= \frac{1}{4i} \sum_{\ell=1}^{\infty} \ell \{ (\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} + \operatorname{cotg} \frac{\theta}{2}) e^{2i\delta_{\ell-1}} P_{\ell} + (\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} - \operatorname{cotg} \frac{\theta}{2}) e^{2i\delta_{\ell-1}} P_{\ell} \\ &\quad + (\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} - \operatorname{cotg} \frac{\theta}{2}) e^{2i\delta_{\ell-1}} P_{\ell-1} + (\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} + \operatorname{cotg} \frac{\theta}{2}) e^{2i\delta_{\ell-1}} P_{\ell-1} \\ &\quad - 2 \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} (P_{\ell} + P_{\ell-1}) \} \\ &= \frac{1}{2i} \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{\ell}{\sin \theta} \{ (P_{\ell} - P_{\ell-1} \cos \theta) e^{2i\delta_{\ell-1}} - (P_{\ell} \cos \theta - P_{\ell-1}) e^{2i\delta_{\ell-1}} \\ &\quad - (1 - \cos \theta) (P_{\ell} - P_{\ell-1}) \} \end{aligned}$$

wegen

$$\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} + \operatorname{cotg} \frac{\theta}{2} = \frac{2}{\sin \theta} \quad , \quad \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} - \operatorname{cotg} \frac{\theta}{2} = -2 \frac{\cos \theta}{\sin \theta}$$

Mit den Formeln (Jahnke, Emde; 1945)

$$\begin{aligned} P_{\ell}^{\prime} &= P_{\ell}^{\prime} \sin \theta = \frac{dP_{\ell}}{d(\cos \theta)} \cdot \sin \theta \\ &= \frac{\ell(P_{\ell-1} - P_{\ell} \cos \theta)}{\sin \theta} = \frac{(\ell+1)(P_{\ell} \cos \theta - P_{\ell+1})}{\sin \theta} \end{aligned}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} E \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} + H \operatorname{cotg} \frac{\theta}{2} &= \frac{1}{2i} \sum_{\ell=1}^{\infty} \{ -P_{\ell-1}^{\prime} e^{2i\delta_{\ell-1}} + P_{\ell}^{\prime} e^{2i\delta_{\ell-1}} - P_{\ell}^{\prime} + P_{\ell-1}^{\prime} \} \\ &= \frac{1}{2i} \sum_{\ell=1}^{\infty} \{ -e^{2i\delta_{\ell}} + e^{2i\delta_{\ell-1}} \} P_{\ell}^{\prime} \\ &= k g(\theta) \end{aligned}$$

da  $P_0^{\prime} = 0$  , und sich alle Glieder  $P_{\ell}^{\prime}$  durch die Summation herausheben.

6.6. Beweis der Rekursionsformeln (58) und (57) .

Es gilt

$$(1-x) \sum_{\ell=1}^{\infty} b_{\ell}^m P_{\ell} = \sum_{\ell=1}^{\infty} b_{\ell}^{m+1} P_{\ell}$$

Die Koeffizienten zu gleichem  $P_{\ell}$  werden gesucht. Auf der linken Seite tragen dazu die folgenden Glieder bei

$$\begin{aligned} b_{\ell}^m P_{\ell} &\longrightarrow b_{\ell}^m P_{\ell} \\ x b_{\ell-1}^m P_{\ell-1} &\longrightarrow \frac{\ell}{2\ell-1} P_{\ell} b_{\ell-1}^m \\ x b_{\ell+1}^m P_{\ell+1} &\longrightarrow \frac{\ell+1}{2\ell+3} P_{\ell} b_{\ell+1}^m \end{aligned} \tag{124}$$

wegen der Rekursionsformel für die Legendre - Polynome

$$(\ell+1) P_{\ell+1} = (2\ell+1) x P_{\ell}(x) - \ell P_{\ell-1}(x)$$

Mit (124) ergibt sich sofort Formel (58)

$$b_{\ell}^{m+1} = b_{\ell}^m - \frac{\ell}{2\ell-1} b_{\ell-1}^m - \frac{\ell+1}{2\ell+3} b_{\ell+1}^m$$

Zum analogen Beweis von Formel (57) geht man von der Beziehung aus

$$(1-x) \sum_{\ell=1}^{\infty} a_{\ell}^{(n-1)} L_{\ell}^{\pm} = \sum_{\ell=1}^{\infty} a_{\ell}^{(n)} L_{\ell}^{\pm}$$

Man sucht wieder die Glieder auf der linken Seite der obigen Gleichung, die zu einem beitragen. Das sind

$$\begin{aligned} a_{\ell}^{(n-1)} L_{\ell}^{\pm} &\longrightarrow a_{\ell}^{(n-1)} L_{\ell}^{\pm} \\ x a_{\ell-1}^{(n-1)} L_{\ell-1}^{\pm} &\longrightarrow \frac{\ell-1}{2\ell-1} L_{\ell}^{\pm} \\ x a_{\ell}^{(n-1)} L_{\ell}^{\pm} &\longrightarrow \pm \frac{1}{2\ell+1} x P_{\ell-1} \longrightarrow \pm \frac{\ell P_{\ell}}{(2\ell+1)(2\ell-1)} \quad \text{wegen (124)} \\ &\longrightarrow \pm \frac{L_{\ell}^{\pm}}{(2\ell+1)(2\ell-1)} \end{aligned}$$

wobei das zusätzliche Glied mit  $\ell P_{\ell-1}$  bei der Ordnung von  $L_{\ell-1}^{\pm}$  verarbeitet wird.

$$\begin{aligned} x a_{\ell+1}^{(n-1)} L_{\ell}^{\pm} &\longrightarrow \frac{\ell+2}{2\ell+3} L_{\ell}^{\pm} + \frac{P_{\ell}}{2\ell+3} \pm \frac{x P_{\ell}}{2\ell+3} \\ &\longrightarrow \frac{\ell+2}{2\ell+3} L_{\ell}^{\pm} + \frac{P_{\ell}}{2\ell+3} \pm \frac{\ell P_{\ell-1}}{(2\ell+3)(2\ell+1)} \\ &\longrightarrow \frac{(2\ell+1)(\ell+2)}{(2\ell+1)(2\ell+3)} L_{\ell}^{\pm} + \frac{L_{\ell}^{\pm}}{(2\ell+3)(2\ell+1)} + \frac{(\ell+1) P_{\ell}}{(2\ell+3)(2\ell+1)} \\ &\longrightarrow \frac{2\ell^2+5\ell+3}{(2\ell+3)(2\ell+1)} L_{\ell}^{\pm} = \frac{\ell+1}{2\ell+1} L_{\ell}^{\pm} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich genau die Formel (57)

$$a_{\ell}^{(n)} = \left(1 \mp \frac{1}{(2\ell+1)(2\ell-1)}\right) a_{\ell}^{(n-1)} - \frac{\ell-1}{2\ell-1} a_{\ell-1}^{(n-1)} - \frac{\ell+1}{2\ell+1} a_{\ell+1}^{(n-1)}$$

Der Autor dankt Privatdozent Dr. E.W. Blauth für die Möglichkeit, diesen zusammenfassenden Artikel als Laborbericht anfertigen zu können. Den Anstoß zu dieser Arbeit gab Privatdozent Dr. H. Chr. Siegmann, der durch viele anregende Diskussionen zur Klärung des behandelten Gebietes beitrug. Für den ersten theoretischen Teil hat mir Herr Dr. H. Weiß seine tatkräftige Unterstützung gewährt. Herrn Müller bin ich für seine Hilfe, insbesondere für das letzte Kapitel über den Polarisationsnachweis und für viele Gespräche zu großem Dank verpflichtet. Anregende Diskussionen mit Frl. Schmittsdorff und den Herren Dr. D. Maison und M. Campagna sowie auch mit meinen Kollegen im Institut, insbesondere Dr. H. Vernickel, lieferten einen wertvollen Beitrag. Der mühevollen Arbeit der Herstellung der Abbildungen haben sich Frl. Schmittsdorff, Frl. Selig und Herr Schuster unterzogen, das Schreiben des Manuskripts besorgte Frau Krauß. Auch Ihnen sei herzlich gedankt.

Literatur

- M. Abramovitz  
I.A. Stegun  
Handbook of Mathematical Functions,  
Dover Publications Inc., New York, 1965
- A.I. Alikhanov  
G.P. Eliseiev  
V.A. Lubimov  
B.V. Ershler  
Nucl. Phys. 6(1958), 588
- V.A. Apalin  
I.Y. Kutikov  
I.I. Lukashevich  
L.A. Mikaelyan  
G.V. Smirnov  
P.Y. Spivak  
Nucl. Phys. 31(1962), 657  
JETP 41(1961), 1064  
JETP 14(1962), 759
- A. Barmann  
H. Harting  
Z. Astroph. 22(1942), 87
- J.H. Bartlett  
R.E. Watson  
Phys. Rev. 56(1939), 612
- J.H. Bartlett  
R.E. Watson  
Proc. Am. Acad. Arts Sci. 74(1940), 53
- J.H. Bartlett  
T.A. Welton  
Phys. Rev. 59(1941), 281
- G. Baum  
Dissertation Bonn, 1968
- H. Bienlein  
R. Fleischmann  
H. Wegener  
Z. Phys. 150(1957), 80
- H. Bienlein  
K. G uthner  
H. von Issendorff  
H. Wegener  
Nucl. Instr. and Meth. 4(1959), 79
- H. Bienlein  
G. Felsner  
K. G uthner  
H. von Issendorff  
H. Wegener  
Z. Phys. 154(1959), 376
- H. Bienlein  
G. Felsner  
R. Fleischmann  
K. G uthner  
H. von Issendorff  
H. Wegener  
Z. Phys. 155(1959), 101

- J.K. Bienlein  
G. Schlosser  
Z. Phys. 174(1963), 91
- H. Boersch  
J. Lemmerich  
R.Schliepe  
Z. Phys. 182(1964), 166
- F. Bopp  
D. Maison  
G. Regenfus  
H.C. Siegmann  
Z. Phys. 185(1965), 48
- J.P. Bromberg  
J. Chem. Phys. 50(1969), 3906
- A. Brosi  
A.I. Galonsky  
B.H. Ketelle  
H.B. Willard  
Nucl. Phys. 33(1962), 353
- H.N. Browne  
E. Bauer  
Phys. Rev. Lett. 16(1966), 495
- W. Bühring  
J. Heintze  
Z. Phys. 153(1958), 134
- W. Bühring  
Z. Phys. 155(1959), 566
- W. Bühring  
Z. Phys. 187(1965), 180
- W. Bühring  
Nucl. Phys. 61(1965), 110
- W. Bühring  
Z. Phys. 208(1968), 286
- W. Bühring  
Z. Phys. 212(1968), 61
- P.J. Bunyan  
Proc. Phys. Soc. (London) 81(1963), 816
- P.J. Bunyan  
J.L. Schonfelder  
Proc. Phys. Soc. (London) 85(1965), 455
- G. Busch  
M. Campagna  
H.C. Siegmann  
Solid State Com. 7(1969), 775
- G. Busch  
M. Campagna  
P. Cotti  
H.C. Siegmann  
Phys. Rev. Lett. 22(1969), 597
- W.J. Byatt  
Phys. Rev. 104(1956), 1298
- J. Byrne  
P.S. Farago  
Proc. Phys. Soc. (London) 86(1965), 801



- L.V. Doggett  
J.A. Spencer  
Phys. Rev. 103(1956), 1597
- B. Donally  
W. Raith  
R. Becker  
Phys. Rev. Lett. 20(1968), 575
- R.C. Dougal  
Proc. Phys. Soc. (London) 85(1965), 851
- R.J. van Duinen  
J.W.G. Aalders  
Nucl. Phys. A115(1969), 353
- V. Eckardt  
A. Ladage  
U.V. Moellendorff  
Phys. Lett. 13(1964), 53
- W. Eckstein  
Z. Phys. 203(1967), 59
- W. Eitel  
K. Jost  
J. Kessler  
Phys. Rev. 159(1967), 47
- W. Eitel  
K. Jost  
J. Kessler  
Z. Phys. 209(1968), 348
- W. Eitel  
K. Jost  
J. Kessler  
Z. Naturf. 23a(1968), 2122
- H. Faissner  
Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften 32(1959), 180
- U. Fano  
Phys. Rev. 178(1969), 131
- P.S. Farago  
Nucl. Instr. Methods 15(1962), 222
- P.S. Farago  
Adv. in electr. and electron phys. 21(1966), 1
- P.S. Farago  
H.C. Siegmann  
Phys. Lett. 20(1966), 279
- P.S. Farago  
H.C. Siegmann  
Proc. Int. Symp. on the Phys. of one and two  
Electron Atoms, Munic, Sep. 1968
- P.S. Farago  
Am.J.Phys. 35 (1967), 246

- H.A. Fowler  
L. Marton  
Bull. Am. Phys. Soc. 4(1959), 235
- W. Franzen  
R. Gupta  
Phys. Rev. Lett. 15(1965), 819
- H. Frauenfelder  
A. Rossi  
Methods of Experimental Physics, Volume 5/B,  
Section 2.5, New York, 1963
- H. Frauenfelder  
R. Bobone  
E. von Goeler  
N. Levine  
H.R. Lewis  
R.N. Peacock  
A. Rossi  
G. DePasquali  
Phys. Rev. 106(1957), 386
- A.J. Freeman  
C. Froese-Fischer  
Phys. Rev. 91(1953), 1410  
unveröffentlicht
- E. Fues  
H. Hellmann  
Physik Z. 31(1930), 465
- W.R. Garrett  
R.A. Mann  
Phys. Rev. 130(1963), 658
- R. Gasper  
Acta Phys. Hung. 3(1954), 263
- R.L. Gluckstern  
S.R. Lin  
J. Math. Phys. 5(1964), 1594
- J.S. Greenberg  
D.P. Malone  
R.L. Gluckstern  
V.W. Hughes  
Phys. Rev. 120(1960), 1393
- E.B. Gunnarsen  
Austr. J. Sci. Res. A5(1952), 259
- D.M. Harmsen  
K. Holm  
Z. Phys. 166(1962), 227
- D.R. Hartree  
Reports on Progress in Physics, The Physical  
Society, London, 1946, Vol. 11, Seite 113
- R. Haug  
Z. Phys. 215(1968), 550
- J. Heintze  
Z. Phys. 150(1957), 134

- J. Heintze  
W. Bühring  
Phys. Rev. Lett. 1(1958), 176
- W. Hilgner  
J. Kessler  
Phys. Rev. Lett. 18(1967), 983
- W. Hilgner  
J. Kessler  
Z. Phys. 221(1969), 305
- W. Hilgner  
J. Kessler  
E. Steeb  
Z. Phys. 221(1969), 324
- M. Hofmann  
G. Regenfus  
D. Schärpf  
P.J. Kennedy  
Phys. Lett. 25A(1967), 270
- G. Holzwarth  
H.J. Meister  
Nucl. Phys. 59(1964), 56
- G. Holzwarth  
Tables of asymmetry, cross section and related functions for Mott scattering of electrons by screened gold and mercury nuclei.  
München, Institut für Theoretische Physik der Universität.  
Fotodruck, Mikrokopie GmbH, 1964
- H. von Issendorff  
R. Fleischmann  
Z. Phys. 167(1962), 11
- E. Jahnke  
F. Emde  
Tables of Functions, 4th Edition, Dover Publications, New York, 1945
- K. Jost  
J. Kessler  
Phys. Rev. Lett. 15(1965), 575
- K. Jost  
J. Kessler  
Z. Phys. 195(1966), 1
- K. Jost  
J. Kessler  
Phys. Lett. 21(1966), 524
- K. Keck  
H. Deichsel  
Optik 17(1960), 401
- P.J. Kennedy  
Phys. Lett. 19(1965), 161
- J. Kessler  
H. Lindner  
Z. angew. Phys. 18(1964), 7

- J. Kessler Z. Phys. 155(1959), 350
- J. Kessler Z. Phys. 183(1965), 1  
H. Lindner
- J. Kessler Z. Phys. 212(1968), 48  
N. Weichert
- J. Kessler Rev. Mod. Phys. 41(1969), 3
- M.M. Klein Phys. Rev. 111(1958), 1115  
K.A. Brueckner
- J. van Klinken Proefschrift, Rijksuniversiteit te Groningen, 1965
- J. van Klinken Nucl. Phys. 75(1966), 161
- R. Kollath Handbuch der Physik, Band XXXIV, Seite 1-28,  
Korpuskeln und Strahlung in Materie II,  
Springer Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg, 1958
- A. Ladage Promotion Hamburg 1961
- H. Langevin-Joliot Comp. rend 244(1957), 3142  
N. Marty  
P. Sergent
- C.J. Lenander Phys. Rev., 142(1966), 1
- S.R. Lin Nucl. Phys. 45(1963), 492  
N. Sherman  
J.K. Percus
- S.R. Lin Phys. Rev. 133(1964), A 965
- R.L. Long, jur. Phys. Rev. Lett. 15(1965), 1  
W. Raith  
V.W. Hughes
- R.L. Long Phys. Rev. 138(1965) A, 1630  
V.W. Hughes  
J.S. Greenberg  
I. Ames  
R.L. Christensen
- R. Loth Phys. Lett. 20(1966), 390  
W. Eckstein
- R. Loth Phys. Lett. 203(1967), 66
- W.H. Louisell Phys. Rev. 94(1954), 7  
R.W. Pidd

- M.S. Lubell  
W. Raith  
Phys. Rev. Lett. 23(1969), 211
- D. Maison  
Phys. Lett. 19(1966), 654
- H.S.W. Massey  
C.B.O. Mohr  
Proc. Roy. Soc. A 177(1941), 341
- D.F. Mayers  
Proc. Roy. Soc. (London) A 241(1957), 93
- M.V. McCusker  
L.L. Hatfield  
G.K. Walters  
Phys. Rev. Lett. 22(1969), 817
- W.A. McKinley  
H. Feshbach  
Phys. Rev. 74(1948), 1759
- J. Mehr  
Dissertation Mainz 1966
- J. Mehr  
Z. Phys. 198(1967), 345
- H.J. Meister  
H. Weiss  
Z. Phys. 216(1968), 165
- H. Mendlowitz  
K.M. Case  
Phys. Rev. 97(1955), 33
- H. Mendlowitz  
K.M. Case  
Phys. Rev. 100(1955), 1551
- H. Mendlowitz  
Am. J. Phys. 26(1958), 17
- A. Messiah  
Quantum Mechanics, Vol. II, chap. XX, 33  
Amsterdam, North-Holland Publ. Co., 1962
- G. Mie  
Ann. Phys. (4) 25(1908), 377
- L. Mikaelyan  
A. Borovoi  
E. Denisov  
Nucl. Phys. 47 (1963), 328  
JETP 17 (1963), 785  
JETP 44 (1963), 1162
- C.B.O. Mohr  
L.J. Tassie  
Proc. Phys. Soc. (London) A 67(1954), 711
- N.F. Mott  
Proc. Roy. Soc. 124(1929), 425
- N.F. Mott  
Nature 128(1931), 454
- N.F. Mott  
Proc. Roy. Soc. 135(1932), 429
- N.F. Mott  
The Theory of Atomic Collisions,  
3rd Edition, Oxford, 1965, Clarendon Press

- J.W. Motz Phys. Rev. 132(1963), 2558  
R.C. Placious  
C.E. Dick
- J.W. Motz Rev. Mod. Phys. 36(1964), 881  
H. Olsen  
H.W. Koch
- N. Müller Diplomarbeit München, 1966
- N. Müller Phys. Lett. 24A(1967), 733
- D.F. Nelson Phys. Rev. 114(1959), 728  
R.W. Pidd
- G. Obermair Z. Phys. 217(1969), 91
- W.G. Pettus Phys. Rev. 109 (1958), 1458
- W.T. Pimbley J. Appl. Phys. 33(1962), 238  
E.W. Müller
- W. Raith Dissertation TU Berlin, 1962
- W. Raith Z. Phys. 170(1962), 185  
R. Schliepe
- W. Raith Atomic Physics (1969), 389
- E. Reichert Z. Phys. 173(1963), 392
- E. Reichert Phys. Lett. 25A(1967), 560  
H. Deichsel
- L.B. Robinson Phys. Rev. 127(1962), 2076
- M. Rotenberg Phys. Rev. Lett. 16(1968), 969
- L.N. Rozentsveig Zh. Exp. Teor. Fiz. 31(1956), 520
- A.E. Ruark Phys. Rev. 57(1940), 62
- A. Rubinovicz Quantentheorie des Atoms, Joh. Ambrosius

- N. Ryu J. Phys. Soc. Japan 7(1952), 125
- N. Ryu J. Phys. Soc. Japan 7(1952), 130
- N. Ryu J. Phys. Soc. Japan 8(1953), 575  
. Hashimoto  
. Noonaka
- N. Ryu J. Phys. Soc. Japan 8(1953), 804
- K. Schackert Z. Phys. 213(1968), 316
- G. Schatz Z. Phys. 177(1964), 495  
H. Rebel  
W. Bühring
- I. Schiff Quantum Mechanics, McGraw Hill, 1955, Seite 286, 333
- J.L. Schonfelder Proc. Phys. Soc. (London) 87(1966), 163
- H. Schopper Weak Interactions and Nuclear Beta Decay,  
North-Holland Publ. Co., Amsterdam, 1966
- A. deShalit Phys. Rev. 107(1957), 1459  
S. Kuperman  
H.J. Lipkin  
T. Rothen
- N. Sherman Phys. Rev. 103(1956), 1601
- N. Sherman Phys. Rev. 114(1959), 1541  
D.F. Nelson
- K. Shinohara J. Phys. Soc. Japan 5(1950), 119  
N. Ryu
- C.G. Shull Phys. Rev. 63(1943), 29  
C.T. Chase  
F.E. Myers
- E.A. Silverstein Nucl. Instr. 4(1959), 53
- C. Simpson Rev. Sci. Instr. 32(1961), 802  
L. Marton
- J.C. Slater Phys. Rev. 81(1951), 385
- V. Spiegel, jr. Am. Phys. (N.Y.) 6 (1959), 70  
T.F. Ruane  
D.J. Antony  
B. Waldmann  
W.C. Miller

- P.E. Spivak  
L.A. Mikaelyan  
Nucl. Phys. 20(1960), 475
- P.E. Spivak  
L.A. Mikaelyan  
JETP 12(1961), 404
- P.E. Spivak  
L.A. Mikaelyan  
I.E. Kutikov  
U.F. Apalin  
Nucl. Phys. 23(1961), 169  
JETP 12(1961), 1027  
JETP 39(1960), 1479
- L. Spruch  
Phys. Rev. Lett. 16(1966), 1137
- H. Steidl  
E. Reichert  
H. Deichsel  
Phys. Lett. 17(1965), 31
- H.A. Tolhoek  
S.R. deGroot  
Physica 17(1951), 17
- H.A. Tolhoek  
Rev. Mod. Phys. 28(1956), 277
- H. deWaard  
O.J. Poppema  
Physica 23(1957), 597
- D.W. Walker  
Phys. Rev. Lett. 20(1968), 827
- D.W. Walker  
J. Phys. B (Atom. Molec. Phys.) 2(1969), 356
- M.B. Webb  
J.S. Schilling  
Bull. Am. Phys. Soc. 14(1969), 794, F8
- H. Wegener  
Z. Phys. 151(1958), 252
- H. Wegener  
Bull. Am. Phys. Soc. 5(1960), 238
- H.F. Weiss  
Z. Phys. wird veröffentlicht
- V.F. Weisskopf  
Z. Phys. 93, (1935), 561
- E.J. Williams  
Proc. Roy. Soc. (London) A 169(1939), 531
- M. Wilmers  
R. Haug  
H. Deichsel  
Z. Angew. Phys. 27(1969), 204
- C.S. Wu  
Beta Decay, Interscience Monographs and Texts  
in Physics and Astronomy, Vol. XVI, Wiley and Sons

H.N. Yadav	Proc. Phys. Soc. (London) A <u>68</u> (1955), 348
A.C. Yates T.G. Strand	Phys. Rev. <u>170</u> (1968), 184
A.C. Yates	Phys. Rev. Lett. <u>20</u> (1968), 829
A.C. Yates M. Fink	Phys. Rev. Lett. <u>22</u> (1969), 1
D.R. Yennie D.G. Ravenhall R.N. Wilson	Phys. Rev. <u>95</u> (1954), 500
E. Zeitler H. Olsen	Phys. Rev. <u>136</u> (1964), A 1546
E. Zeitler H. Olsen	Z. Naturf. <u>21a</u> (1966), 1321

This IPP report is intended for internal use.

IPP reports express the views of the authors at the time of writing and do not necessarily reflect the opinions of the Institut für Plasmaphysik or the final opinion of the authors on the subject.

Neither the Institut für Plasmaphysik, nor the Euratom Commission, nor any person acting on behalf of either of these:

1. Gives any guarantee as to the accuracy and completeness of the information contained in this report, or that the use of any information, apparatus, method or process disclosed therein may not constitute an infringement of privately owned rights; or
2. Assumes any liability for damage resulting from the use of any information, apparatus, method or process disclosed in this report.