

Inkohärente Röntgenstreuung und Dichteschwankungen eines entarteten Fermigases

Autor(en): **Bloch, F.**

Objektyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **7 (1934)**

Heft IV

PDF erstellt am: **21.09.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-110373>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern. Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Inkohärente Röntgenstreuung und Dichteschwankungen eines entarteten Fermigas

von F. Bloch, z. Zt. in Rom¹⁾.

(22. II. 34.)

Zusammenfassung. Es wird darauf hingewiesen, dass sich die inkohärente Röntgenstreuung von Atomen im Rahmen des THOMAS-FERMI'schen Gasmodells als der von den Dichteschwankungen des Elektronengases herrührende Streuan-
teil interpretieren lässt, analog zu der RAYLEIGH-Streuung der Atmosphäre oder der TYNDALL-Streuung von Flüssigkeiten. Der Versuch, ähnlich wie in einer von EINSTEIN gegebenen Theorie der TYNDALL-Streuung die inkohärente Streuung der Wirkung gewisser Schallwellen zuzuschreiben, führt zu einer Diskussion der Existenz elastischer Wellen in einem entarteten Fermigas. Die Tatsache, dass sich während der hier in Betracht kommenden Schwingungszeiten das thermische Gleichgewicht nicht einstellen kann, spielt dabei eine wichtige Rolle.

§ 1. Problemstellung.

Vor einiger Zeit haben wir das Bremsvermögen von Atomen hoher Ordnungszahl berechnet²⁾, indem wir nach dem Vorbild von THOMAS³⁾ und FERMI⁴⁾ die Elektronenwolke des Atoms als ein entartetes Fermigas betrachteten. Dabei war es wesentlich, über die übliche *statische* Anwendung dieses Modells hinauszugehen und verallgemeinernd sein *dynamisches* Verhalten durch hydrodynamische Bewegungsgleichungen zu beschreiben. Ferner hat HEISENBERG⁵⁾ schon früher gezeigt, dass die Berechnung der inkohärenten Röntgenstreuung nach dem Gasmodell ebenfalls auf Züge führt, die wesentlich von seinen statischen Eigenschaften abweichen. Es schien uns von einigem Interesse, zu untersuchen, ob und inwiefern sich auch diese Abweichungen mit Hilfe der dynamischen Beschreibung des Elektronengases erfassen lassen.

Um uns über die hier entscheidenden Umstände zu orientieren, wollen wir zuerst den rein *klassischen* Fall eines Elektronengases betrachten, das, durch thermische und elektrische Kräfte im Gleichgewicht gehalten, der Störung einer äusseren monochromatischen Lichtwelle unterworfen wird und dadurch zu einer Streuung des Lichtes Anlass gibt.

¹⁾ Fellow of the Rockefeller Foundation.

²⁾ F. BLOCH, Zeitschr. f. Phys. **81**, 363, 1933.

³⁾ L. H. THOMAS, Proc. Cambr. Phil. Soc. **23**, 524, 1927.

⁴⁾ E. FERMI, Zeitschr. f. Phys. **48**, 73, 1928.

⁵⁾ W. HEISENBERG, Phys. Zeitschr. **32**, 737, 1931.

Solange man das Gas durch seine mittlere Dichte beschreibt, indem man über Teilvolumina mittelt, die zwar eine hinreichend grosse Anzahl von Elektronen enthalten, aber noch klein sind gegen das Gesamtvolumen des Gases, lässt sich die Ursache der inkohärenten, d. h. frequenzverschobenen Streuung noch nicht erkennen. Unter dem Einfluss der schwachen Störung der Lichtwelle wird nämlich die mittlere Dichte des Gases, die im Gleichgewicht zeitlich konstant ist, entsprechend einem System harmonischer Oszillatoren kleine erzwungene Schwingungen um die Gleichgewichtskonfiguration ausführen mit der selben Frequenz, wie die der einfallenden Lichtwelle. Man wird also dann nur das kohärente Streulicht erhalten, das dieselbe Frequenz hat wie das einfallende Licht, und wir werden später sehen, dass, auf den Fall des entarteten Fermigases angewandt, die Berechnung seiner Intensität in der Tat zu der von DEBYE¹⁾ gegebenen Formel für die kohärente Röntgenstreuung führt.

Um einen Anhaltspunkt für das Auftreten inkohärenter Streuung zu erhalten, muss man also offenbar berücksichtigen, dass bereits im Gleichgewicht die Dichte in einem Teilvolumen nicht konstant, sondern infolge der *Schwankungseigenschaften* des Gases kleinen zeitlichen Änderungen unterworfen ist. Die in der zeitlichen Fourierzerlegung dieser Dichteschwankungen auftretenden Frequenzen werden sich der Frequenz der oben besprochenen erzwungenen Schwingung überlagern und deshalb im wirksamen Streumoment auch frequenzverschobene Fourierkomponenten auftreten lassen. Wir werden später die naheliegende Vermutung bestätigen, dass gerade diese Berücksichtigung der Dichteschwankungen die Ursachen der inkohärenten Röntgenstreuung liefert.

Die Sachlage ist soweit ganz analog der, wie man sie bei der RAYLEIGH'schen Theorie des Himmelsblau findet. Nach dieser Theorie führt ja auch erst die *Dichteschwankung* der atmosphärischen Luft zu der beobachteten inkohärenten Streuung; sie ist ebenfalls wegen des Dopplereffektes an den streuenden Molekülen frequenzverschoben, wenn auch hier diese Verschiebung praktisch zu vernachlässigen ist. Während aber in der klassischen Theorie der inkohärenten Streuung von Flüssigkeiten und Gasen die Dichteschwankungen nur durch die endliche Temperatur und die mit ihr verbundene thermische Bewegung der Moleküle hervorgerufen wird, liegt der Sachverhalt beim Elektronengas der Atome insofern anders, als dieses ja als völlig entartet zu betrachten ist, seine Eigenschaften also im wesentlichen dieselben sind, wie am

¹⁾ P. DEBYE, Phys. Zeitschr. **31**, 419, 1930.

absoluten Nullpunkt der Temperatur. An Stelle der thermischen Energie tritt hier die bekannte Nullpunktsenergie des Fermigases, wodurch der zu untersuchende Effekt zu einem reinen Quantenphänomen gestempelt wird. Die folgenden Ausführungen werden sich daher wesentlich mit den dadurch bedingten Abweichungen zu beschäftigen haben, wobei wir uns aber dennoch bemühen werden, die grösstmögliche Analogie zur klassischen Rechnung aufrecht zu erhalten.

§ 2. Streuung eines Elektronengases.

Wir betrachten ein Gas von Elektronen, dessen Dichte im Gleichgewicht wir mit ϱ bezeichnen. Diese Dichte ist eine Funktion des Ortsvektors \vec{r} ¹⁾ und hängt ferner wegen der Schwankungen von der Zeit t ab. Es ist also

$$\varrho = \varrho(\vec{r}, t).$$

Das Gas stehe unter dem Einfluss der Störung durch eine schwache, ebene und monochromatische Lichtwelle, die in der z -Richtung polarisiert sein und sich in der x -Richtung fortpflanzen möge. Ihre elektrische Feldstärke hat also die Form

$$E_x = E_y = 0; \quad E_z = E_0 e^{\frac{2\pi i \nu}{c}(x-ct)}.$$

Die Frequenz ν sei so gross, dass

a) während der Schwingungszeit $\tau = \frac{1}{\nu}$ die Impulsänderung der Elektronen infolge der auf sie im Atom wirkenden Kräfte klein ist gegen ihren mittleren Impuls im Gleichgewicht,

b) dass die Lichtschwingung rasch erfolgt gegenüber denjenigen Zeiten von der Grössenordnung T , während derer die Änderung von ϱ durch die Schwankungen erfolgt.

Ferner sei die Frequenz so klein, dass

c) $h\nu \ll mc^2$ gültig ist.

Die Bedingungen a) und c) sind, wie schon HEISENBERG (l. c.) bemerkt hat, für normale Röntgenstreuung und Atome nicht zu hoher Ordnungszahl erfüllt. Dasselbe gilt für die zusätzliche Bedingung b), die, wie wir später sehen werden, zutrifft, sobald die mittlere Geschwindigkeit der Elektronen klein gegen die Lichtgeschwindigkeit ist. Aus c) folgt, dass wir den COMPTON-Effekt vernachlässigen dürfen, aus a), dass ein Elektron für die

¹⁾ Wir werden im folgenden Vektorgrössen stets durch einen Pfeil charakterisieren.

Streuung als frei betrachtet werden darf, so dass ihre Berechnung so erfolgen kann, wie bei der bekannten Herleitung der THOMSONSchen Streuformel. Aus b) folgt schliesslich, dass wir die zeitliche Veränderung der Dichte während der Streuung vernachlässigen und quasistatisch rechnen dürfen. Die Streuung wird also dieselbe, wie sie sich nach der klassischen Theorie an freien Elektronen ergibt, die mit einer (in erster Näherung) zeitlich konstanten Dichte ϱ im Raum verteilt sind.

Aus der Bewegungsgleichung

$$m\ddot{z} = eE_0 e^{\frac{2\pi i\nu}{c}(x-ct)}$$

für ein Elektron (die von der magnetischen Feldstärke herrührende Kraft dürfen wir vernachlässigen), folgt nun in einfacher Weise, dass durch die Lichtwelle an Stelle der ursprünglichen Dichte $\varrho(\vec{r}, t)$ die neue Dichte

$$\varrho'(\vec{r}, t) = \varrho(\vec{r}, t) + \frac{\partial \varrho(\vec{r}, t)}{\partial z} \frac{eE_0}{4\pi^2 \nu^2 m} e^{\frac{2\pi i\nu}{c}(x-ct)} \quad (1)$$

und eine Stromdichte in der z -Richtung

$$i'_z(\vec{r}, t) = \varrho(\vec{r}, t) \frac{ieE_0}{2\pi\nu m} e^{\frac{2\pi i\nu}{c}(x-ct)} \quad (2)$$

erzeugt wird.

Aus (1) und (2) berechnet man in bekannter Weise mittels retardierter Potentiale die Feldstärken der gestreuten Lichtwelle in der Wellenzone, und zwar an einer Beobachtungsstelle, deren Abstand R vom Gas gross sei gegen dessen Lineardimensionen. Sind \vec{n} und \vec{n}' beziehungsweise Einheitsvektoren in der Fortpflanzungsrichtung der einfallenden Welle (also $n_x = 1$; $n_y = n_z = 0$) und in der Beobachtungsrichtung, so ergeben sich für diese Feldstärken

$$\begin{aligned} E_x' &= A n_x' n_z' & E_y' &= A n_y' n_z' & E_z' &= A (n_z' - 1) \\ H_x' &= -A n_y' & H_y' &= A n_x' & H_z' &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

wobei zur Abkürzung

$$A = -\frac{e^2 E_0}{m c^2} e^{\frac{2\pi i\nu}{c}(R-ct)} \int \varrho(\vec{r}, t) e^{\frac{2\pi i\nu}{c}(\vec{n} - \vec{n}', \vec{r})} d\vec{r} \quad (4)$$

gesetzt ist¹⁾.

¹⁾ $d\vec{r}$ steht in (4) in üblicher Weise für das Volumelement $dx dy dz$. Wir werden im folgenden durchwegs die analoge Bezeichnungsweise für Volumelemente in dreidimensionalen Vektorräumen gebrauchen.

Bei der Herleitung von (3) und (4) sind die zeitlichen Ableitungen von $\varrho(\vec{r}, t)$ vernachlässigt worden; ihre Berücksichtigung würde zu Zusatztermen der relativen Grössenordnung $\frac{\tau}{T}$ führen, die aber wegen der obigen Bedingung b) vernachlässigbar klein sind. In dieser Näherung stellen also (3) und (4) die richtigen Strahlungsfeldstärken dar und lassen die Richtigkeit der in § 1 aufgestellten Behauptung erkennen, dass neben der Frequenz ν der Primärwelle im Streulicht neue Frequenzen auftreten. Sie sind durch die zeitlichen Veränderungen von $\varrho(\vec{r}, t)$, also durch die Dichteschwankungen bedingt und ihre Verschiebung gegenüber der Frequenz ν ergibt sich aus denjenigen Frequenzen, die bei einer zeitlichen Fourierzerlegung der Grösse $\varrho(\vec{r}, t)$ auftreten. Indem wir uns zunächst nicht weiter für diese Frequenzen interessieren, gehen wir von (3) und (4) zur Intensität I_s der gestreuten Strahlung über.

Sei I_P die Intensität der Primärstrahlung, ϑ der Winkel zwischen Einfalls- und Beobachtungsrichtung; man findet dann nach (3) und (4), indem man über sämtliche Polarisationsrichtungen mittelt,

$$I_s = I_P \left(\frac{e^2}{R m c^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 \vartheta}{2} \overline{\left| \int \varrho(\vec{r}, t) e^{\frac{2\pi i \nu}{c} (\vec{n} - \vec{n}', \vec{r})} d\vec{r} \right|^2}, \quad (5)$$

wobei der Querstrich zeitliche Mittelung bedeuten soll.

Wenn wir mit

$$\varrho_0(\vec{r}) = \overline{\varrho(\vec{r}, t)}$$

den zeitlichen Mittelwert von ϱ bezeichnen und setzen

$$\varrho(\vec{r}, t) = \varrho_0(\vec{r}) + \varrho_1(\vec{r}, t),$$

so folgt aus (5), da

$$\overline{\varrho_1(\vec{r}, t)} = 0$$

wird

$$I_s = I_P \left(\frac{e^2}{R m c^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 \vartheta}{2} \{ |I_0|^2 + \overline{|I_1|^2} \} \quad (6)$$

mit

$$I_0 = \int \varrho_0(\vec{r}) e^{\frac{2\pi i \nu}{c} (\vec{n} - \vec{n}', \vec{r})} d\vec{r} \quad (7)$$

$$I_1(t) = \int \varrho_1(\vec{r}, t) e^{\frac{2\pi i \nu}{c} (\vec{n} - \vec{n}', \vec{r})} d\vec{r}. \quad (8)$$

Der Term mit $|\Gamma_0|^2$ in (6) stellt die Intensität der kohärenten Streuung dar. Setzt man in (7) für $\varrho_0(\vec{r})$ die mittlere Dichte der Elektronen im Atom nach dem THOMAS-FERMI'schen Gasmodell ein, so erhält man tatsächlich die von DEBYE (l. c.) erhaltene und diskutierte Intensität der kohärenten Streuung.

Dagegen stellt der mit $|\Gamma_1|^2$ auftretende Term von (6) die Intensität der inkohärenten Streuung dar, wie sie nach (8) durch die Dichteschwankungen bedingt ist, und mit ihm werden wir uns im folgenden beschäftigen.

§ 3. Dichteschwankungen des entarteten Fermigases.

Während unter den bisher gemachten Voraussetzungen a), b), c) von § 2 die Formel (6) für die Intensität der Streustrahlung allgemeine Gültigkeit beanspruchen darf, müssen wir jetzt eine weitere einschränkende Bedingung einführen, um die in (6) auftretende unbekannte Grösse $|\Gamma_1|^2$ nach dem THOMAS-FERMI'schen Gasmodell berechnen zu können. Wir werden sehen, dass diese Bedingung zwar nicht unerfüllbar ist, die Anwendbarkeit des Gasmodells für das betrachtete Problem aber wesentlich herabsetzt und bei normalen Röntgenwellenlängen bereits fraglich erscheinen lässt.

Wir führen die Bezeichnung

$$\vec{s} = \frac{2\pi\nu}{c}(\vec{n} - \vec{n}'); \quad |s| = \frac{4\pi\nu}{c} \sin \frac{\vartheta}{2} \quad (9)$$

ein. Dann wird aus (8)

$$\Gamma_1(\vec{s}, t) = \int \varrho_1(\vec{r}, t) e^{i(\vec{s} \cdot \vec{r})} d\vec{r}. \quad (10)$$

Wie man sieht, spielt in (10) die örtliche Veränderung von ϱ_1 innerhalb Lineardimensionen der Grössenordnung $\frac{1}{|s|}$ die wesentliche Rolle; für nicht allzu kleine Streuwinkel wird $\frac{1}{|s|}$ nach (9) von der Grössenordnung $\lambda = \frac{c}{\nu}$ der einfallenden Lichtwellenlänge. Die Anwendbarkeit des THOMAS-FERMI'schen Modells verlangt nun, dass man die spezifischen Eigenschaften des Elektronengases nur innerhalb Volumgebieten des Atoms benötigt, die zwar noch eine hinreichend grosse Anzahl von Elektronen enthalten, deren Lineardimensionen aber klein sind gegenüber denjenigen Gebieten, innerhalb derer sich das mittlere auf die Elektronen wirkende Potential merklich verändert, so dass die Elektronen im betrachteten Volumgebiet als frei zu betrachten sind.

Im Gasmodell verändert sich nun das Potential bei einem Atom der Ordnungszahl Z längs Strecken der Grössenordnung

$$a = \frac{10^{-8}}{Z^{1/3}} \text{ cm,}$$

und wir hätten nach dem Obigen zu verlangen, dass die Bedingung

$$\text{d) } \lambda \ll a = \frac{10^{-8}}{Z^{1/3}} \text{ cm}$$

erfüllt ist. Diese neue Bedingung d) steht zwar für Atome nicht allzu hoher Ordnungszahl nicht im Widerspruch mit den in § 2 gemachten Voraussetzungen a), b), c). Jedoch hat z. B. bei der Mo-K_α-Strahlung das Röntgenlicht die Wellenlänge $0,71 \cdot 10^{-8}$ cm, so dass hier die Bedingung d) durchaus nicht erfüllt ist, sondern λ bestenfalls von derselben Grössenordnung wie a wird. Man wird also nicht erwarten dürfen, dass in diesem Fall das Gasmodell mehr als einen grössenordnungsmässig richtigen Ausdruck für die inkohärente Streuung liefert. Dagegen wäre seine Anwendung bei einer ca. 10mal kürzeren Wellenlänge (weiche γ -Strahlung) durchaus legitim.

Es sei hier darauf hingewiesen, dass dieselbe Einschränkung d) auch der Anwendbarkeit der HEISENBERG'schen Rechnung (l. c) aufzuerlegen ist, obwohl sie von HEISENBERG nicht explizit erwähnt wurde. Bei HEISENBERG wurde nämlich so gerechnet (Formel (19) l. c.), dass innerhalb Volumgebieten, in denen die Elektronen als frei zu betrachten sind, sie durch die Lichtstreuung Impulsänderungen der Grösse

$$\delta p = \frac{|s| h}{2 \pi} \cong \frac{h}{\lambda}$$

erfahren. Ein solches Verfahren ist nun natürlich nur dann gestattet, wenn die Impulsänderung δp gross ist gegen die Impulsungenauigkeit Δp der Elektronen, die von ihrer Lokalisierung innerhalb Dimensionen herrührt, die klein gegen a sind. Infolgedessen ist nach der Ungenauigkeitsrelation

$$\Delta p \gg \frac{h}{a}$$

und die Bedingung $\Delta p \ll \delta p$ besagt also

$$\frac{h}{a} \ll \frac{h}{\lambda} \quad \text{oder} \quad \lambda \ll a$$

in Übereinstimmung mit der Bedingung d).

Wir möchten ferner noch bemerken, dass sich wohl *nur* unter der Bedingung d) ein einfacher Ausdruck für die inkohärente Streuung finden lässt. Ist nämlich λ vergleichbar mit a , so verlangt die Berechnung von I_1 die Kenntnis des Verlaufs von ϱ_1 und mithin der Eigenfunktionen der Elektronen im *ganzen* Atom, was zwar, etwa mit Hilfe der HARTREE'schen Methode¹⁾, näherungsweise, keinesfalls aber ohne grösseren Rechenaufwand geschehen kann.

Wir wollen also im folgenden die Bedingung d) als erfüllt voraussetzen, um mit Hilfe des Gasmodells die uns interessierende Grösse $|\overline{I_1}|^2$ zu berechnen.

Ist d) erfüllt, so ist es nach dem Obigen erlaubt, das Gas in Teilvolumina V_i zu zerlegen, deren Lineardimensionen viele Lichtwellenlängen enthalten, und in denen eine grosse Anzahl n_i von Elektronen ein entartetes Fermigas bilden. Diese Teilvolumina werden, wie bei der atmosphärischen Lichtzerstreuung, additiv zur inkohärenten Streuung beitragen, so dass wir setzen dürfen

$$|\overline{I_1}|^2 = \sum_i |\overline{I_{1i}}|^2 \quad (11)$$

mit

$$I_{1i}(\vec{s}, t) = \int_{V_i} \varrho_1(\vec{r}, t) e^{i(\vec{s}, \vec{r})} d\vec{r}. \quad (12)$$

Das Zeichen V_i in (12) soll bedeuten, dass das Integral nur über das Volumen V_i zu erstrecken ist.

Um nunmehr zur Quantenmechanik überzugehen, haben wir zu bedenken, dass die in (12) auftretende Grösse ϱ_1 , also mithin auch I_{1i} und $|\overline{I_{1i}}|^2$, wie jede dynamische Grösse in der Quantenmechanik durch einen Operator darzustellen ist. Der zeitliche Mittelwert \overline{D} irgendeiner dynamischen Grösse D ist in der Quantenmechanik gegeben durch das Integral über den Konfigurationsraum

$$\overline{D} = \int \psi^* D \psi d\tau,$$

wo ψ die Eigenfunktion des Zustandes ist, für den der Mittelwert zu berechnen ist, ψ^* ihre konjugiert Komplexe und D der Operator der Grösse D . Es ist also

$$|\overline{I_{1i}(\vec{s})}|^2 = \int \psi^* |I_{1i}(\vec{s})|^2 \psi d\tau. \quad (13)$$

ψ ist in unserem Falle eine antisymmetrische Funktion der Koordinaten sämtlicher n_i freien Elektronen des Volumens V_i .

¹⁾ I. WALLER und D. R. HARTREE, Proc. Roy. Soc. **124**, 119, 1929.

Sie lässt sich als das antisymmetrisierte Produkt von ebenen Wellen schreiben, deren jede einem durch Elektronen besetzten Impulszustand entspricht. Die Integration in (13) ist für jedes Elektron über das ganze Volumen V_i zu erstrecken.

Es handelt sich nun darum, die Form des Operators $\Gamma_{1i}(\vec{s})$ zu finden. Nach der Definition von ϱ_1 in § 2 ist nach (12)

$$\Gamma_{1i}(\vec{s}) = \int_{V_i} \varrho(\vec{r}, t) e^{i(\vec{s}, \vec{r})} d\vec{r} - \int_{V_i} \varrho_0(\vec{r}) e^{i(\vec{s}, \vec{r})} d\vec{r}. \quad (14)$$

Die mittlere Dichte ϱ_0 ist im Volumen V_i als örtlich konstant zu betrachten; sobald also $\frac{1}{s}$ klein ist gegen die Lineardimensionen von V_i , was wir wegen der Bedingung d) annehmen dürfen, kann

$$\int \varrho_0(\vec{r}) e^{i(\vec{s}, \vec{r})} d\vec{r} = 0$$

gesetzt werden, und wir erhalten also nach (14)

$$\Gamma_{1i}(\vec{s}) = \int \varrho(\vec{r}, t) e^{i(\vec{s}, \vec{r})} d\vec{r}. \quad (15)$$

Dazu konjugiert komplex ist

$$\Gamma_{1i}^*(\vec{s}) = \int \varrho(\vec{r}, t) e^{-i(\vec{s}, \vec{r})} d\vec{r}. \quad (15a)$$

Um $\varrho(\vec{r})$ als Operator auszudrücken, bedienen wir uns der Methode der quantisierten Wellen, wie sie für den Fall der Fermi-statistik von JORDAN und WIGNER²⁾ entwickelt worden ist. Danach hat man zu setzen

$$\varrho(\vec{r}) = a^*(\vec{r}) a(\vec{r}). \quad (16)$$

Die Grössen $a^*(\vec{r})$ und $a(\vec{r})$ sind hier Operatoren, die gewissen Vertauschungsrelationen genügen, und über deren spezielle Form wir zunächst nichts zu wissen brauchen.

Von den Operatoren $a^*(\vec{r})$ und $a(\vec{r})$ im Koordinatenraum gehen wir nun zu neuen Operatoren im Impulsraum über mittels

$$\begin{cases} a^*(\vec{p}) = \frac{1}{h^{3/2}} \int a^*(\vec{r}) e^{\frac{2\pi i}{h}(\vec{p}, \vec{r})} d\vec{r} \\ a(\vec{p}) = \frac{1}{h^{3/2}} \int a(\vec{r}) e^{-\frac{2\pi i}{h}(\vec{p}, \vec{r})} d\vec{r}. \end{cases} \quad (17)$$

¹⁾ Wir wollen hier und im folgenden das Zeichen V_i unter dem Integral weglassen und bis auf weiteres alle Integrationen im Raum über das Volumen V_i verstehen, indem wir uns dieses vorübergehend als unendlich gross vorstellen.

²⁾ P. JORDAN und E. WIGNER, Zeitschr. f. Phys. **47**, 631, 1928.

Aus (15), (16) und (17) erhalten wir

$$\begin{aligned} \Gamma_{1i}(\vec{s}) &= \frac{1}{h^3} \int a^*(\vec{p}') a(\vec{p}) d\vec{p} dp' \int e^{\frac{2\pi i}{h} \left(\vec{p} - \vec{p}' + \frac{h\vec{s}}{2\pi}, \vec{r} \right)} d\vec{r} \\ &= \int a^*(\vec{p}') a(\vec{p}) \delta \left(\vec{p} - \vec{p}' + \frac{h\vec{s}}{2\pi} \right) d\vec{p} d\vec{p}' \end{aligned}$$

oder

$$\Gamma_{1i}(\vec{s}) = \int a^* \left(\vec{p} + \frac{h\vec{s}}{2\pi} \right) a(\vec{p}) d\vec{p} = \int a^*(\vec{p}) a \left(\vec{p} - \frac{h\vec{s}}{2\pi} \right) d\vec{p}. \quad (18)$$

Den konjugiert komplexen Operator $\Gamma_{1i}^*(\vec{s})$ erhält man nach (15a), indem man in (18) \vec{s} durch $-\vec{s}$ ersetzt. Also wird

$$\Gamma_{1i}^*(\vec{s}) = \int a^* \left(\vec{p} - \frac{h\vec{s}}{2\pi} \right) a(\vec{p}) d\vec{p} = \int a^*(\vec{p}) a \left(\vec{p} + \frac{h\vec{s}}{2\pi} \right) d\vec{p}. \quad (18a)$$

Es empfiehlt sich, statt der hier kontinuierlich variablen Impulszustände vorübergehend diskrete Zustände einzuführen, wie dies ja in einem endlichen Volumen V_i tatsächlich der Fall ist, und das Integral im Impulsraum durch eine Summe zu ersetzen.

Wir schreiben also statt (18), bzw. (18a)

$$\Gamma_{1i}(\vec{s}) = \sum_{\vec{p}} b^*(\vec{p}) b \left(\vec{p} - \frac{h\vec{s}}{2\pi} \right) \quad (19)$$

$$\Gamma_{1i}^*(\vec{s}) = \sum_{\vec{p}} b^*(\vec{p}) b \left(\vec{p} + \frac{h\vec{s}}{2\pi} \right) \quad (19a)$$

wobei sich die Operatoren b^*, b von den vorher benutzten a^*, a durch einen Normierungsfaktor unterscheiden.

Um nun den zeitlichen Mittelwert von

$$|\Gamma_{1i}(\vec{s})|^2 = \Gamma_{1i}^*(\vec{s}) \Gamma_{1i}(\vec{s})$$

berechnen zu können, müssen wir die explizite Form der Operatoren $b^*(\vec{p}), b(\vec{p})$ angeben. Hierzu ist es nach JORDAN und WIGNER (l. c.) notwendig, eine bestimmte Ordnung der Impulszustände vorzunehmen. Sei $N(\vec{p})$ die Zahl der Elektronen im Zustand mit dem Impuls \vec{p} , die — indem wir zunächst die Tatsache des Elektronenspins ausser Acht lassen — die Werte 0 und 1 annehmen kann. Ferner sei

$$v(\vec{p}) = \prod_{\vec{p}'} [1 - 2 N(\vec{p}')] \quad (20)$$

¹⁾ Die Integrationen im Impulsraum erstrecken sich über sämtliche Werte der Impulskomponenten von $-\infty$ bis $+\infty$.

eine Grösse, die demnach $+1$ oder -1 sein kann. Die Produktbildung (20) erstreckt sich neben dem Zustand \vec{p} über alle diejenigen Zustände, die bei der getroffenen Anordnung *vor* dem Zustand \vec{p} zu stehen kommen. Dann ist

$$\begin{aligned} b^*(\vec{p}) &= N(\vec{p}) \Delta(\vec{p}) v(\vec{p}) \\ b(\vec{p}) &= v(\vec{p}) \Delta(\vec{p}) N(\vec{p}). \end{aligned} \quad (21)$$

Der Operator $\Delta(\vec{p})$, angewandt auf irgend eine Funktion $f[N(\vec{p})]$ von $N(\vec{p})$ bedeutet

$$\Delta(\vec{p}) f[N(\vec{p})] = f[1 - N(\vec{p})].$$

Aus (21) folgen für die $b^*(\vec{p})$ und $b(\vec{p})$ die Relationen

$$b^*(\vec{p}) b(\vec{p}') + b(\vec{p}') b^*(\vec{p}) = \begin{cases} 1 & \text{für } \vec{p} = \vec{p}' \\ 0 & \text{für } \vec{p} \neq \vec{p}' \end{cases}$$

$$b^*(\vec{p}) b^*(\vec{p}') + b^*(\vec{p}') b^*(\vec{p}) = b(\vec{p}) b(\vec{p}') + b(\vec{p}') b(\vec{p}) = 0$$

und insbesondere

$$\begin{cases} b^*(\vec{p}) b(\vec{p}) = N(\vec{p}) \\ b(\vec{p}) b^*(\vec{p}) = 1 - N(\vec{p}). \end{cases} \quad (22)$$

Wir betrachten nun eine antisymmetrische Wellenfunktion ψ sämtlicher n_i freien Elektronen, bei der (wieder unter Vernachlässigung des Elektronenspins) bestimmte Impulszustände besetzt sein mögen. Es ergibt sich nun nach (19) und (19a)

$$\overline{|G_{1i}(\vec{s})|^2} = \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{p}'} \int \psi^* b^*(\vec{p}) b\left(\vec{p} + \frac{h\vec{s}}{2\pi}\right) b^*(\vec{p}') b\left(\vec{p}' - \frac{h\vec{s}}{2\pi}\right) \psi d\tau. \quad (23)$$

Es ist leicht zu sehen, dass wegen der Orthogonalität der Eigenfunktionen in der Doppelsumme (23) nur diejenigen Glieder von Null verschieden sind, für die

$$\vec{p}' = \vec{p} + \frac{h\vec{s}}{2\pi} \quad \text{ist.}$$

Also wird

$$\overline{|G_{1i}(\vec{s})|^2} = \sum_{\vec{p}} \int \psi^* b^*(\vec{p}) b\left(\vec{p} + \frac{h\vec{s}}{2\pi}\right) b^*\left(\vec{p} + \frac{h\vec{s}}{2\pi}\right) b(\vec{p}) \psi d\tau. \quad (24)$$

Oder mit Benutzung von (22) und wenn man berücksichtigt, dass $\int \psi^* \psi d\tau = 1$ ist:

$$\overline{|G_{1i}(\vec{s})|^2} = \sum_{\vec{p}} N(\vec{p}) \left[1 - N\left(\vec{p} + \frac{h\vec{s}}{2\pi}\right) \right]. \quad (25)$$

Die $N(\vec{p})$ geben die Zahl der Elektronen an, die bei der betrachteten Wellenfunktion einen Impuls \vec{p} haben; sie sind Null oder Eins, je nachdem, ob der betreffende Zustand besetzt oder unbesetzt ist. Anschaulich gesprochen sagt die Summe in (25) aus, wie oft es bei der gegebenen Besetzung der Zustände möglich ist, ein Elektron von einem besetzten Zustand \vec{p} nach einem unbesetzten $\vec{p} + \frac{h\vec{s}}{2\pi}$ zu bringen.

Bei einem vollkommen entarteten Fermigas sind alle Zustände bis zu einem gewissen Maximalbetrag p_0 des Impulses besetzt, die übrigen unbesetzt. Indem wir nunmehr den Elektronenspin berücksichtigen, steht p_0 mit der mittleren Dichte ϱ_0 in der Beziehung

$$\frac{8\pi}{3} \left(\frac{p_0}{h} \right)^3 = \varrho_0.$$

Der Ausdruck (25) ist unter Vernachlässigung des Elektronenspins hergeleitet worden; er kann auch so aufgefasst werden, dass er nur den Anteil der Elektronen *einer* Spinorientierung wiedergibt. Die Berücksichtigung der *beiden* Orientierungsrichtungen hat also zur Folge, dass der richtige Ausdruck für $|\Gamma_{1i}(\vec{s})|^2$ das Doppelte des Ausdrucks (25) ist. Mit Berücksichtigung von

$$2 \sum_{\vec{p}} N(\vec{p}) = n_i$$

finden wir also

$$|\Gamma_{1i}(\vec{s})|^2 = n_i - 2 \sum_{\vec{p}} N(\vec{p}) N\left(\vec{p} + \frac{h\vec{s}}{2\pi}\right). \quad (26)$$

Indem wir uns die möglichen \vec{p} -Werte nunmehr praktisch wieder als ein Kontinuum vorstellen und bedenken, dass sich in einem Element $d\vec{p}$ des Impulsraumes $\frac{V_i}{h^3} d\vec{p}$ Zustände befinden, lässt sich die in (26) auftretende Summe als das $\frac{V_i}{h^3}$ -fache gemeinsame Volumen zweier Kugeln im Impulsraum interpretieren, die den Radius p_0 haben, und deren Mittelpunkte um den Betrag $\frac{h|s|}{2\pi}$ gegeneinander verschoben sind. Dieses Volumen ist

$$\frac{4\pi}{3} \left(p_0 - \frac{h|s|}{4\pi} \right)^2 \left(p_0 + \frac{h|s|}{8\pi} \right),$$

und wir erhalten also

$$|\Gamma_{1i}(\vec{s})|^2 = n_i - \frac{8\pi}{3} \frac{V_i}{h^3} \left(p_0 - \frac{h|s|}{4\pi} \right)^2 \left(p_0 + \frac{h|s|}{8\pi} \right). \quad (27)$$

Also ist nach (11)

$$|\overline{\Gamma_1(\vec{s})}|^2 = \sum_i |\overline{\Gamma_{1i}(\vec{s})}|^2 = \sum_i \left\{ n_i - \frac{8\pi V_i}{3 h^3} \left(p_0 - \frac{h|s|}{4\pi} \right)^2 \left(p_0 + \frac{h|s|}{8\pi} \right) \right\}. \quad (28)$$

Bezeichnen wir mit

$$N = \sum_i n_i$$

die Gesamtzahl der Elektronen und schreiben wir statt der Summe \sum_i in (28) ein Integral über den Gesamtraum des Gases, was wegen der relativ langsamen Veränderlichkeit von p_0 gestattet ist, so erhalten wir also schliesslich

$$|\Gamma_1(\vec{s})|^2 = N - \frac{8\pi}{3 h^3} \int \left(p_0 - \frac{h|s|}{4\pi} \right)^2 \left(p_0 + \frac{h|s|}{8\pi} \right) d\vec{r}. \quad (29)$$

$p_0 = p_0(\vec{r})$ ist hier eine Funktion des Ortes, die mit dem FERMI'schen Potential $\Phi(\vec{r})$ in der Beziehung steht

$$p_0(\vec{r}) = \sqrt{2 m e \Phi(\vec{r})}. \quad (30)$$

Das Integral in (29) ist über den gesamten Raum des Gases, d. h. über das ganze Atom zu erstrecken.

Der Ausdruck (29) stimmt mit dem von HEISENBERG (l. c.) unter Benutzung der WALLER'schen Streuformel hergeleiteten überein und bestätigt die in § 1 gemachte Aussage, dass sich die inkohärente Röntgenstreuung, soweit sie aus dem THOMAS-FERMI'schen Gasmodell herleitbar ist, als der von den Dichteschwankungen des Elektronengases herrührende Streuanteil auffassen lässt.

§ 4. Methode der Schallwellen.

In einer Arbeit über die Intensität der Tyndallstreuung am kritischen Punkt hat EINSTEIN¹⁾ die Dichteschwankungen eines Gases hergeleitet, indem er als dynamische Variable die Elongationen der verschiedenen elastischen Wellen einführte, die sich in dem Gas fortpflanzen können. Das Äquipartitionstheorem der klassischen Statistik führt dann sofort zu dem mittleren Quadrat der Elongation einer Schallwelle, das direkt in den Ausdruck für die Streuintensität eingeht.

Es liegt nahe, ein entsprechendes Verfahren für die Behandlung unseres Problems zu verwenden. Zu diesem Zweck schreiben

¹⁾ A. EINSTEIN, Ann. d. Phys. **33**, 1275, 1910. Für den Hinweis auf diese Arbeit bin ich Herrn Prof. W. Pauli zu Dank verpflichtet.

wir die Dichte $\varrho(\vec{r}, t)$ innerhalb dem in § 3 eingeführten Teilvolumen V_i in der Form eines Fourierintegrals

$$\varrho(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int b(\vec{k}, t) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r})} d\vec{k}. \quad (31)$$

Es folgt

$$b(\vec{k}, t) = \int_{V_i} \varrho(\vec{r}, t) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})} d\vec{r}$$

und mithin durch Vergleich mit (15)

$$b(\vec{s}, t) = \Gamma_{1i}(\vec{s}, t). \quad (32)$$

Die Grösse $b(\vec{s}, t)$ stellt die Elongation der Dichteschwankung dar, die durch eine elastische Welle mit dem Ausbreitungsvektor \vec{s} im Volumen V_i erzeugt wird. Nach (11) geht ihr mittleres Quadrat direkt in die Grösse $|\Gamma_1|^2$ und damit nach (6) in die Intensität der inkohärenten Streuung ein, vollkommen analog, wie in der zitierten Arbeit von EINSTEIN. Hätten wir es mit einem System zu tun, das der klassischen Statistik gehorcht und für das also das Äquipartitionstheorem gelten würde, so könnten wir direkt die von EINSTEIN berechneten mittleren Elongationsquadrate in (11), bzw. (6) einsetzen und hätten dann sofort den richtigen Ausdruck für die Intensität der inkohärenten Streuung.

Indessen liegt in unserem Fall ein vollkommen entartetes System vor, für das das Äquipartitionstheorem nicht mehr anwendbar ist. Man sieht das sofort ein, wenn man bedenkt, dass nach der klassischen Statistik das mittlere Elongationsquadrat einer elastischen Welle, d. h. eines harmonischen Oszillators, proportional der absoluten Temperatur T wird, also am absoluten Nullpunkt verschwindet, während in der Quantentheorie infolge der Nullpunktsenergie des Oszillators ein endliches Schwankungsquadrat übrig bleibt.

Um das hier anzuwendende Verfahren an einem einfacheren Beispiel zu erläutern, betrachten wir zunächst den Fall eines *ein*-dimensionalen entarteten Fermigas, das sich innerhalb einer Strecke der Länge L_i befinden möge. Zunächst lässt sich

$$\overline{|\Gamma_{1i}(s)|^2} = \overline{|b(s)|^2} \quad 1)$$

wie in § 3 direkt berechnen. Der dort gegebene Ausdruck (25) bleibt auch hier gültig, wenn man den Pfeil weglässt und die

1) Wir lassen hier den Vektorgrossen charakterisierenden Pfeil weg, da im eindimensionalen Fall alle Grössen skalaren Charakter haben.

Summation über die hier nur eindimensionale Mannigfaltigkeit der Impulse erstreckt. Indem man die diskreten Impulse wieder durch ein Kontinuum ersetzt, findet man sofort

$$|\overline{\Gamma_{1i}(s)}|^2 = |\overline{b(s)}|^2 = \frac{L_i |s|}{2\pi} \quad (33)$$

Um denselben Ausdruck mittels Schallwellen herzuleiten, müssen wir die elastische Energie des Gases als Funktion der Grössen $b(s)$ kennen. Sei $E = E(\varrho)$ die Energiedichte des Gases als Funktion der Dichte ϱ . Betrachten wir nun eine kleine Abweichung ϱ_1 von der mittleren Dichte ϱ_0 , d. h. setzen wir wieder $\varrho = \varrho_0 + \varrho_1$, so wird bis auf höhere Potenzen von ϱ_1 die potentielle, elastische Energie des Gases gegeben durch

$$P = \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{d \varrho^2} \Big|_{\varrho = \varrho_0} \int \varrho_1^2 dx.$$

Setzen wir nun entsprechend (31)

$$\varrho_1(x) = \frac{1}{2\pi} \int b(k) e^{-i(kx)} dk, \quad (34)$$

so wird

$$\begin{aligned} P &= \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{d \varrho^2} \Big|_{\varrho_0} \frac{1}{4\pi^2} \int b(k) b(k') dk dk' \int e^{-i(k+k')x} dx \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{d^2 E}{d \varrho^2} \Big|_{\varrho_0} \int b(k) b(-k) dk. \end{aligned}$$

Setzen wir nun, um an Stelle der Komplexen b reelle Variable α, β einzuführen:

$$b(k) = \alpha(|k|) + i\beta(|k|); \quad b(-k) = \alpha(|k|) - i\beta(|k|), \quad (35)$$

so wird

$$P = \frac{1}{2\pi} \frac{d^2 E}{d \varrho^2} \Big|_{\varrho_0} \int \{\alpha^2(|k|) + \beta^2(|k|)\} d|k|. \quad (36)$$

Führen wir eine diskrete Schwingungsmannigfaltigkeit ein, indem wir bedenken, dass sich im Intervall $d|k|$ eine Anzahl $\frac{L_i}{2\pi} d|k|$ von Eigenschwingungen befinden, so können wir auch schreiben

$$P = \frac{1}{L_i} \frac{d^2 E}{d \varrho^2} \Big|_{\varrho_0} \left\{ \sum_{(k)} \alpha^2(|k|) + \beta^2(|k|) \right\}. \quad (37)$$

P hat also die Form der potentiellen Energie einer Reihe ungekoppelter harmonischer Oszillatoren. Da der Mittelwert der potentiellen Energie eines Oszillators gleich der Hälfte seiner totalen Energie ist, und diese im Grundzustand bekanntlich den Nullpunktswert $\frac{h\nu}{2}$ hat, wo ν die Frequenz des betreffenden Oszillators ist, wird also

$$\overline{\alpha^2(|k|)} = \overline{\beta^2(|k|)} = \frac{L_i}{\left. \frac{d^2 E}{d \varrho^2} \right|_{\varrho_0}} \frac{h \nu(|k|)}{4}. \quad (38)$$

Um weiter rechnen zu können, müssen wir einen bestimmten Zusammenhang zwischen Energiedichte E und Dichte ϱ annehmen. Es liegt nahe, für diesen Zusammenhang denjenigen zu wählen, wie er beim entarteten Gas auftritt. Bei diesem sind sämtliche Zustände bis zu einem Maximalbetrag p_0' des Impulses besetzt¹⁾, die übrigen unbesetzt. Dieser Maximalimpuls steht mit der Dichte — unter Vernachlässigung des Elektronenspins — im Zusammenhang

$$p_0' = \frac{h \varrho}{2}. \quad (39)$$

Man findet dann leicht

$$E = \frac{p_0'^3}{3 h m} = \frac{h^2 \varrho^3}{24 m}, \quad (40)$$

also

$$\left. \frac{d^2 E}{d \varrho^2} \right|_{\varrho_0} = \frac{h^2 \varrho_0}{4 m}. \quad (41)$$

Um die Frequenz $\nu(|k|)$ zu berechnen, machen wir von der hydrodynamischen Beziehung Gebrauch, dass die Schallgeschwindigkeit v mit dem Druck p in der Beziehung steht

$$v = \sqrt{\left. \frac{1}{m} \frac{d p}{d \varrho} \right|_{\varrho = \varrho_0}}. \quad (42)$$

Andererseits ist der Druck beim eindimensionalen Gas

$$p = 2 E = \frac{h^2 \varrho^3}{12 m}. \quad (43)$$

Also ist nach (42)

$$v = \frac{h \varrho_0}{2 m} = \frac{p_0}{m}. \quad (44)$$

¹⁾ Wir bezeichnen mit p_0' den Maximalimpuls als Funktion der Dichte ϱ , mit p_0 seinen Wert, wenn die Dichte gleich ihrem Mittelwert ϱ_0 ist.

Mithin wird die Frequenz einer elastischen Welle mit der Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{|k|}$

$$v(|k|) = \frac{v}{\lambda} = \frac{h \varrho_0 |k|}{4\pi m} = \frac{p_0 |k|}{2\pi m}. \quad (45)$$

Mit Hilfe von (41) und (45) wird also aus (38)

$$\overline{\alpha^2(|k|)} = \overline{\beta^2(|k|)} = L_i \frac{4m}{h^2 \varrho_0} \frac{h^2 \varrho_0 |k|}{16\pi m} = \frac{L_i |k|}{4\pi}. \quad (46)$$

Andererseits ist nach (35)

$$|b(s)|^2 = b(s)b(-s) = \alpha^2(|s|) + \beta^2(|s|),$$

also nach (46)

$$\overline{|b(s)|^2} = 2 \overline{\alpha^2(|s|)} = \frac{L_i |s|}{2\pi} \quad (47)$$

in Übereinstimmung mit (33).

Während also beim eindimensionalen Gas die Methode der quantisierten Schallwellen tatsächlich zum richtigen Ausdruck für die Dichteschwankung und damit für die Intensität der inkohärenten Streuung führt, tritt beim dreidimensionalen Gas eine charakteristische Schwierigkeit auf.

Nehmen wir

$$\frac{|s| h}{2\pi} \ll p_0$$

an, was für das uns interessierende Problem der Röntgenstreuung vollkommen zutrifft¹⁾, so ist der richtige Ausdruck für $|\overline{\Gamma_{1i}(\vec{s})}|^2 = \overline{|b(\vec{s})|^2}$, wenn man bis zu den in $|s|$ linearen Termen geht und den Elektronenspin vernachlässigt, nach (27) gegeben durch

$$\overline{|b(\vec{s})|^2} = \frac{V_i p_0^2 |s|}{2 h^2}. \quad (48)$$

Setzt man nun entsprechend zu (35)

$$b(\vec{k}) = \alpha(\vec{k}) + i\beta(\vec{k}); \quad b(-\vec{k}) = \alpha(\vec{k}) - i\beta(\vec{k}), \quad (49)$$

¹⁾ Physikalisch bedeutet diese Annahme offenbar, dass die Länge der betrachteten Schallwellen gross sein soll gegen die mittlere de Broglie-Wellenlänge der Elektronen. Für kürzere Schallwellen würde sich eine Dispersion fühlbar machen und die Sachlage wesentlich komplizieren.

so liefert die Methode der quantisierten Schallwellen vollkommen analog zu (38)

$$\overline{\alpha^2(\vec{k})} = \overline{\beta^2(\vec{k})} = \frac{V_i}{\left. \frac{d^2 E}{d \varrho^2} \right|_{e_0}} \frac{h \nu(|k|)}{4}, \quad (50)$$

indem lediglich das eindimensionale Volumen L_i durch das dreidimensionale V_i zu ersetzen ist.

Nehmen wir wieder den Zusammenhang zwischen E und ϱ , wie er beim entarteten Gas vorliegt. Unter Vernachlässigung des Elektronenspins wird der Maximalimpuls p_0' gegeben durch

$$\frac{4\pi}{3} \left(\frac{p_0'}{h} \right)^3 = \varrho \quad (51)$$

und es wird

$$E = \frac{2\pi}{5} \frac{p_0'^5}{m h^3} = \frac{2\pi h^2}{5 m} \left(\frac{3\varrho}{4\pi} \right)^{5/3}, \quad (52)$$

also

$$\left. \frac{d^2 E}{d \varrho^2} \right|_{e_0} = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{2/3} \left(\frac{h^2}{3 m \varrho_0^{1/3}} \right). \quad (53)$$

Andererseits ist der Druck

$$p = \frac{2}{3} E = \frac{4\pi h^2}{15 m} \left(\frac{3\varrho}{4\pi} \right)^{5/3},$$

also die Schallgeschwindigkeit

$$v = \sqrt{\left. \frac{1}{m} \frac{dp}{d\varrho} \right|_{e=e_0}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{3\varrho_0}{4\pi} \right)^{1/3} \frac{h}{m}. \quad (54)$$

Daraus bestimmt sich die Frequenz $\nu(|k|)$ zu

$$\nu(|k|) = \frac{v|k|}{2\pi} = \frac{1}{2\pi\sqrt{3}} \left(\frac{3\varrho_0}{4\pi} \right)^{1/3} \frac{h|k|}{m}, \quad (55)$$

und man erhält mit Hilfe von (51), (53) und (55) schliesslich

$$|\overline{b(\vec{s})}|^2 = \overline{2\alpha^2(\vec{s})} = \frac{V_i p_0^2 |s|}{\sqrt{3} h^2}. \quad (56)$$

Wie man sieht, unterscheidet sich das richtige Resultat (48) von dem hier erhaltenen durch einen Faktor $\frac{\sqrt{3}}{2}$. Dieser Unterschied beruht nicht etwa, wie man zunächst glauben könnte, auf einem einfachen Rechenfehler, sondern hat seine Ursache darin,

dass beim dreidimensionalen Gas eine Rechnung, die lediglich mit dem Zusammenhang zwischen Dichte und Energiedichte beim entarteten Gas operiert, im vorliegenden Fall überhaupt nicht statthaft ist.

Die Formel (52) gilt nämlich nur dann, wenn sich bei jedem Wert der Dichte das thermische Gleichgewicht einstellt, so dass die Impulse der Elektronen um den mittleren Impuls kugelsymmetrisch verteilt sind. Andererseits wurde bei der Herleitung von (48) angenommen, dass zwischen den Elektronen keine Wechselwirkung besteht. Betrachtet man nun eine bestimmte elastische Welle, so wird durch ihre Wirkung das Gas nur in ihrer Fortpflanzungsrichtung dilatiert und komprimiert; es werden also die Impulskomponenten dieser Richtung ausgezeichnet, und da keine Wechselwirkung zwischen den Elektronen angenommen ist, besteht auch keine Möglichkeit, die durch die Welle bedingte Anisotropie der Impulsverteilung wieder auszugleichen. Beim eindimensionalen Gas spielt dieser Umstand keine Rolle, da hier die Impulse ohnehin sämtlich dieselbe Richtung haben.

Den wesentlichen Unterschied zwischen dem ein- und dreidimensionalen Fall sieht man auch einfach ein, wenn man bedenkt, dass ja die Anregungsstufen $h\nu(|k|)$ der Energie der Wellenoszillatoren nichts anderes sind als die Anregungsenergien, die jeweils nötig sind, um aus dem Grundzustand des Gases ein Elektron in einen Zustand zu bringen, dessen Impuls von dem ursprünglichen um $\frac{h\vec{k}}{2\pi}$ verschieden ist. Solche Anregungen können, wenn $\frac{h|\vec{k}|}{2\pi} \ll p_0$ ist, nur dann stattfinden, wenn der ursprüngliche Impuls seinem Betrage nach nahezu p_0 ist. Im eindimensionalen Fall ist nun bis auf höhere Potenzen von $|k|$ diese Anregungsenergie

$$\Delta E = \frac{1}{2m} \left\{ \left(p + \frac{h|k|}{2\pi} \right)^2 - p^2 \right\} \approx \frac{h|k|p_0}{2\pi m},$$

und mit dem Wert (45) der Frequenz $\nu(|k|)$ sieht man tatsächlich, dass die Beziehung

$$\Delta E = h\nu$$

gilt.

Beim dreidimensionalen Gas aber hängt diese Anregungsenergie noch von den Impulskomponenten senkrecht zu \vec{k} ab; man erhält tatsächlich zu einem gegebenen Ausbreitungsvektor \vec{k} ein ganzes Kontinuum von Frequenzen, während wir in (55) einen ganz bestimmten Wert berechnet hatten.

Es ist übrigens möglich, auch im dreidimensionalen Fall mittels gequantelter Schallwellen zum Ziel zu kommen. Allerdings darf man hier nicht so verfahren, dass man einem gegebenen Ausbreitungsvektor \vec{k} , wie es oben geschehen ist, nur zwei Oszillatoren $\alpha(\vec{k})$ und $\beta(\vec{k})$ zuordnet. Vielmehr hat man zu gegebenem \vec{k} so viele Schallwellen zu unterscheiden, als es Paare erlaubter Impulskomponenten der Elektronen senkrecht zu \vec{k} gibt. Jedem solchen transversalen Elektronenimpuls ist eine elastische Welle, also zwei Oszillatoren zuzuordnen. Es lässt sich zeigen, dass jede solche Welle additiv zum mittleren Schwankungsquadrat der Dichte beiträgt; eine Rechnung, die im wesentlichen von den im eindimensionalen Fall aufgestellten Beziehungen Gebrauch macht, liefert dann in einfacher Weise das richtige Resultat (48)¹⁾.

Obzwar die Frequenz einer Schallwelle im dreidimensionalen Fall bei gegebenem \vec{k} nicht einen festen Wert, sondern einen kontinuierlichen Variabilitätsbereich hat, ist ihre Grössenordnung stets durch den Ausdruck (45) gegeben. Diese Feststellung erlaubt uns, die in § 2 aufgestellte Behauptung zu rechtfertigen, dass die dort formulierte Bedingung b) gleichbedeutend damit ist, dass die mittlere Geschwindigkeit der Elektronen klein gegen die Lichtgeschwindigkeit ist. Damit b) zutrifft, muss offenbar die Frequenz ν_L des Röntgenlichtes gross sein gegen die Frequenz ν einer elastischen Welle. Nun ist für nicht zu kleine Streuwinkel

$$\nu_L \approx |k| c$$

und aus

$$\frac{\nu}{\nu_L} \ll 1$$

folgt nach (45)

$$p_0/mc = \frac{v_0}{c} \ll 1,$$

wenn v_0 die Maximalgeschwindigkeit der Elektronen bedeutet; diese ist aber von der Grössenordnung der mittleren Geschwindigkeit.

Nachdem wir im obigen gesehen haben, dass es für die Berechnung der Dichteschwankung wesentlich ist, anzunehmen, dass sich die Isotropie der Impulsverteilung der Elektronen nicht ein-

¹⁾ Wir wollen die etwas langwierige Untersuchung, ob und inwiefern es gestattet ist, statt von einem Gas freier Elektronen von gequantelten Schallwellen zu sprechen, hier nicht wiedergeben, sondern auf diese Frage eventuell an anderer Stelle zurückkommen.

stellt, wollen wir uns noch überlegen, ob diese Annahme für das vorliegende Problem gerechtfertigt ist. Die Bedingung dafür lautet offenbar, dass die mittlere Zahl derjenigen Zusammenstösse eines Elektrons mit andern, bei denen sich seine Bewegungsrichtung wesentlich ändert, während der Zeitdauer einer elastischen Schwingung klein gegen Eins ist. Der Wirkungsquerschnitt für solche Stösse ist wegen der COULOMB'schen Wechselwirkungsenergie der Elektronen von der Grössenordnung $\left(\frac{e^2}{m v^2}\right)^2$, wo v von der Grössenordnung ihrer mittleren Geschwindigkeit ist. Ein Elektron erfährt also während der Zeit $1/\nu$ im Mittel

$$S \cong \left(\frac{e^2}{m v^2}\right)^2 \frac{v}{\nu} \varrho \quad (57)$$

merklich ablenkende Zusammenstösse. Dabei ist ϱ die Dichte der Elektronen; sie steht mit ihrer mittleren Geschwindigkeit grössenordnungsmässig in der Beziehung

$$\varrho \cong \left(\frac{m v}{h}\right)^3.$$

Dies in (57) eingesetzt liefert

$$S \cong \frac{R}{\nu},$$

wo R von der Grössenordnung $\frac{m e^4}{h^3}$ der Rydbergfrequenz ist.

Bedenken wir andererseits, dass grössenordnungsmässig $\nu \cong \nu_L \cdot \frac{v_0}{c}$ ist, so bedeutet also die Bedingung $S \ll 1$:

$$\frac{R}{\nu_L} \cdot \frac{c}{v_0} \ll 1. \quad (58)$$

Die Frequenz des Röntgenlichtes ist aber mindestens 100mal grösser als die Rydbergfrequenz, so dass, abgesehen von Atomen der kleinsten Ordnungszahl, für die die THOMAS-FERMI'sche Methode ohnehin nicht mehr brauchbar ist, die Bedingung (5) weitgehend erfüllt ist. Infolgedessen sind die Zusammenstösse der Elektronen für das betrachtete Problem tatsächlich völlig zu vernachlässigen.

Herrn Professor FERMI möchte ich für die freundliche Aufnahme an seinem Institut und für manche wertvolle Diskussion an dieser Stelle herzlich danken.

Rom, Istituto Fisico dell'Università.