

3. Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale; von P. P. Ewald.

Inhalt: I. 1. Elektrostatische Potentiale. 2. Elektrodynamische Potentiale. 3. Ziel der Arbeit. — II. 1. Thetafunktionen einer Veränderlichen. Zusammenhang zwischen Thetafunktionen und Gitterproblemen. 2. Ableitung der Transformationsformel für Thetafunktionen von 3 Veränderlichen. — III. 1. Potentiale als Summen von Einzelwirkungen (randloser Kristall). 2. Potentialumformung, Trennungsstelle E . Gesamtpotential eines einfachen Gitters. 3. Erregendes Potential eines einfachen Gitters. 4. Gesamtes und erregendes Potential im zusammengesetzten Gitter, Strukturfaktor. — IV. 1. Übergang zu elektrostatischen Potentialen, dimensionslose Größen. 2. Beispiel: Gitterenergie von Steinsalz. 3. Beispiel: Gitterenergie von Flußspat.

I.

1. Bei den Untersuchungen über den Aufbau der Kristalle und ihre Eigenschaften tritt die Notwendigkeit auf, gewisse Potentiale nicht nur als allgemeinen Ausdruck zu kennen, sondern ihren Zahlenwert an irgendeiner Stelle des vom Gitter erfüllten Raumes zu ermitteln. *Das elektrostatische Potential* eines Ionengitters z. B. ist

$$(1) \quad \varphi(P) = \sum \frac{\epsilon_{P'}}{R_{PP'}},$$

wo unter P' ein Atom des Gitterverbandes, unter $\epsilon_{P'}$ seine Ladung, und unter $R_{PP'}$ sein Abstand vom Aufpunkt P verstanden ist und das Summenzeichen sich auf alle Atome P' bezieht. Dies Potential gibt die Arbeit an, die notwendig ist, um eine positive Einheitsladung (wir benutzen gewöhnliche elektrostatische Einheiten) aus dem Unendlichen an den Ort P zu bringen. Wünscht man die Energie zu kennen, die im ganzen Gitterverband aufgespeichert ist, so ist diese¹⁾

1) Vgl. etwa M. Born und A. Landé, Berl. Ber. 45. S. 1048 bis 1068. 1918.

$$(2) \quad A = \frac{1}{2} \sum_P \varepsilon_P \varphi'(P) = \frac{1}{2} \sum_P \sum_{P'}' \frac{\varepsilon_P \varepsilon_{P'}}{R_{PP'}};$$

hierbei fällt der Ort P jetzt mit einem Gitteratom zusammen und der Beitrag $\varepsilon_P \varphi'(P)$, den dieses Atom zum Gesamtpotential liefert, unterscheidet sich von dem obigen Ausdruck (1) durch die Berücksichtigung der Ladung ε_P statt 1 und dadurch, daß beim Hineinrücken des Aufpunkts P in den Gitterpunkt das unendlich werdende Glied aus der Summe (1) fortzulassen ist, das mit $R_{PP'} = 0$ entsteht. (Dies bedeutet der Akzent am Summenzeichen.) Die auf eine Grundzelle des Kristalls entfallende Energie erhält man, wenn der Punkt P nur die zu der Zelle gehörenden Atomlagen durchläuft. Um numerische Werte angeben zu können, sind die Koordinaten der Gitterpunkte zur Berechnung der $R_{PP'}$ zu verwenden, außerdem muß aber die Summe weitgehend umgeformt werden, damit ihre Konvergenz verbessert wird, die in der Form (2) sehr schlecht ist.

Derartige Berechnungen der Gitterenergie sind in der letzten Zeit wiederholt durchgeführt worden, nachdem E. Madelung¹⁾ eine Methode dafür angegeben und am Steinsalzgitter erprobt hat. Ich erwähne die Berechnung für den Gittertypus ZnS (Zinkblende) von M. Born und E. Bormann²⁾ und für CaF₂ (Flußspat) von A. Landé³⁾, die später von Frl. Bormann⁴⁾ berichtigt worden ist.

Gitterpotentiale, die sich nach (2) aus Potentialen des Typus

$$(3) \quad \varphi'(P) = \sum_{P'}' \frac{\varepsilon_{P'}}{R_{PP'}}$$

zusammensetzen, sind erheblich schwieriger in eine geeignete schnell konvergente Gestalt zu bringen, als Potentiale des Typus (1), in denen der Aufpunkt nicht mit einem Gitterpunkt zusammenfällt. Das Madelungsche Verfahren bezieht sich gerade auf diesen Fall und besteht darin, das Potential des Gitters ohne den Aufpunkt aus dem Potential von Halb-

1) E. Madelung, Phys. Zeitschr. 19. S. 524. 1919.

2) M. Born u. E. Bormann, Ann. d. Physik 63. S. 218. 1920.

3) A. Landé, Verh. D. Phys. Ges. 20. S. 217. 1918.

4) E. Bormann, Zeitschr. f. Physik 1. 55. 1920.

geraden, Geraden und Ebenen zusammensetzen, die in regelmäßiger Weise gemäß der Gitterstruktur mit Atomen besetzt sind. Die Potentiale, die von diesen Elementen des Gesamtgitters stammen, lassen sich jeweils in schnellkonvergente Formen bringen, so daß die numerische Rechenarbeit gering wird. Eine der Hauptschwierigkeiten des Verfahrens besteht darin, den geometrischen Überblick über die Lage und Besetzung von Halbgeraden, Geraden und Ebenen nicht zu verlieren. In der Tat ist Herrn Landé durch Fortlassen einer Netzebene beim CaF_2 ein Fehler unterlaufen. Doch bedarf die Geometrie der Gitter ja stets — auch bei der unten anzugebenden Rechenweise — eingehenden Studiums.

2. *Elektrodynamische Potentiale* treten in der Kristalloptik auf. Sie sind charakterisiert durch Summen wie

$$(4) \quad \tilde{\mathfrak{P}}(P) = \sum_{P'} \frac{\tilde{\mathfrak{p}}_{P'} \left(t - \frac{R_{PP'}}{c} \right)}{R_{PP'}}.$$

Die Summe stellt das (vektorielle Hertzsche) Potential zur Zeit t im Aufpunkt P dar, hervorgebracht durch Einzelwirkungen, die von den Momenten $\tilde{\mathfrak{p}}_{P'}$ der Atome P' ausgehen. Gegenüber (1) besteht der wesentlichste Unterschied in dem Auftreten der „Retardierung“, d. h. das Moment $\tilde{\mathfrak{p}}_{P'}$ muß wegen der endlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit der Felder mit dem Wert in Rechnung gesetzt werden, den es zur Zeit $\left(t - \frac{R_{PP'}}{c} \right)$ hatte.

In dem für die Optik wichtigsten Fall der Ausbreitung einer ebenen Welle im Kristall haben die Momente die Form¹⁾

$$(5) \quad \tilde{\mathfrak{p}}_{P'} = \mathfrak{p}_{P'} e^{-i\omega t + i(t\mathfrak{R}_{P'})},$$

\mathfrak{f} heißt hierin der Ausbreitungsvektor der Welle. Er hat die Größe ω/q (ω die Frequenz, q die Phasengeschwindigkeit der Welle) und seine Richtung ist die der Wellennormalen. Denn das skalare Produkt ($\mathfrak{f} \mathfrak{R}_{P'}$), wo $\mathfrak{R}_{P'}$ der Fahrstrahl zum Atom P' von einem beliebigen festen Anfangspunkt aus ist, hat auf den Ebenen senkrecht \mathfrak{f} konstante Werte. — $\mathfrak{p}_{P'}$ ist die (vektorielle) maximale Amplitude des Momentes von P' .

1) Vgl. M. Born, Dynamik d. Kristallgitter. Leipzig, Teubner, 1915. (§ 23 und 24.)

Geht man mit dem Ansatz (5) in (4) ein, und zugleich durch Fortlassen des gemeinsamen zeitlichen Faktors $e^{-i\omega t}$ von $\tilde{\mathfrak{B}}$ zur Amplitude \mathfrak{B} über, so ist der Typ eines optischen Potentials

$$(6) \quad \mathfrak{B}(P) = \sum p_{P'} \frac{e^{iK_0 |PP'|} e^{i(\mathfrak{f}\mathfrak{R}_{P'})}}{R_{PP'}}$$

wo $K_0 = \frac{\omega}{c}$ die Ausbreitungskonstante des Einzelfeldes ist.

Die Summe bezieht sich auf alle Atome P' und ist dadurch zu vereinfachen, daß alle Atome, die dem gleichen einfachen Translationsgitter angehören, in gleicher Weise schwingen, d. h. gleiches $p_{P'}$ haben. (So wie sie in den elektrostatischen Potentialen gleiche Ladung $\varepsilon_{P'}$ haben.)

Wir beschreiben nun das Gitter durch die drei „Achsenvektoren“ a_1, a_2, a_3 , die zusammen ein einfaches Translationsgitter mit den Punkten

$$(7) \quad \mathfrak{R}_i = l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3 = \sum l_i a_i \quad (i = 1, 2, 3, l_i \text{ ganzzahlig})$$

definieren, sowie durch die „Basis“, die T Atome enthalten möge und sich in gleicher durch T Fahrstrahlen r_i zu beschreibender Weise um jeden Gitterpunkt \mathfrak{R}_i wiederholt, so daß

$$(7) \quad \mathfrak{R}_{P'} = \mathfrak{R}_i + r_i = \sum l_i a_i + r_i.$$

Die analogen Punkte jeder Basisgruppe, d. h. solche mit gleichem r_i bilden zusammen ein einfaches Translationsgitter und wir können das Gesamtpotential (6) am Punkte $P = r$ so aufteilen:

$$(8) \quad \left\{ \begin{aligned} \mathfrak{B}(r) &= \sum_i p_i e^{i(\mathfrak{f}r_i)} \cdot \sum \frac{e^{iK_0 R_{PP'}} e^{i(\mathfrak{f}\mathfrak{R}_i)}}{R_{PP'}} \\ &= \sum_i p_i e^{i(\mathfrak{f}r_i)} \cdot II(r - r_i). \end{aligned} \right.$$

Hierin ist II der skalare Anteil des von einem einfachen Translationsgitter herrührenden Vektorpotentials:

$$(9) \quad II(r) = \sum_i \frac{e^{iK_0 |\mathfrak{R}_i - r|} e^{i(\mathfrak{f}\mathfrak{R}_i)}}{|\mathfrak{R}_i - r|}$$

und die Aufgabe ist auf die Berechnung der dreifach unendlichen Summe (9) reduziert. Sie entspricht dem elektrostatischen Potential (1) eines Translationsgitters mit der Ladung $\varepsilon = 1$, in welches sie formal übergeht, wenn K_0 und \mathfrak{f} verschwinden.

Wieder aber genügt für die Zwecke der Kristalloptik die Kenntnis von Π nicht, sondern es ist nötig, den Grenzwert des Potentials zu wissen, wenn der Aufpunkt r in einen Gitterpunkt \mathfrak{R}_ν des Translationsgitters einrückt. Der von dem betr. Gitterpunkt selbst herrührende, wie $\frac{1}{|\mathfrak{R}_\nu - r|}$ unendlich werdende Anteil ist dabei fortzulassen. Wir nennen dies Potential mit dem in der Dispersionstheorie üblichen Namen „*erregendes Potential*“, weil aus ihm die Kraft gewonnen wird, welche das betr. Atom zu seinen Schwingungen erregt und schreiben es, indem wir das Fortlassen des Wertetripels $\nu' = (l'_1, l'_2, l'_3)$ aus der Summe durch den Akzent andeuten,

$$(10) \quad \Pi_\nu(r) = \sum_{\nu'} \frac{e^{i K_0 |\mathfrak{R}_\nu - r| + i (\mathfrak{R}_\nu)_{\nu'}}}{|\mathfrak{R}_\nu - r|}.$$

Da seine Ableitungen am Punkte $r = \mathfrak{R}_\nu'$ gebraucht werden, muß es, bevor zum $\lim (r = \mathfrak{R}_\nu')$ geschritten wird, auch für etwas abweichende Werte von r bekannt sein. Das erregende Potential entspricht genau dem elektrostatischen (3) eines Translationsgitters mit Einheitsladungen und geht mit $K_0 = f = 0$ in φ' über.

Wie bei φ' beruht auch hier die Schwierigkeit der Berechnung auf dem Auslassen des einen Gitterpunktes aus dem Gesamtpotential. Ich habe in meiner Dissertation¹⁾ eine Methode zur numerischen Rechnung angegeben, bei der nicht wie bei der Madelung'schen das Potential aus einzelnen Elementen zusammengesetzt wird, sondern zunächst das Gesamtpotential Π [Gleichung (9)] gebildet und hiervon die Wirkung des einen Gitterpunktes abgezogen wird; daraufhin kann der Grenzübergang ausgeführt werden, der den Aufpunkt in den Gitterpunkt führt. Diese Methode, die auf der Transformationsformel der Thetafunktionen beruht, wurde seinerzeit benutzt, um für ein rhombisches Translationsgitter von gegebenem Achsenverhältnis die Doppelbrechung numerisch zu berechnen.

3. Die Wichtigkeit, welche die Berechnung der Kristallpotentiale gewonnen hat, veranlaßt mich, meine Berechnungsmethode in zweierlei Hinsicht zu erweitern. *Erstens* nämlich,

1) Dispersion und Doppelbrechung von Elektronengittern (Kristallen). München 1912; auch Ann. d. Phys. 49. S. 1. 1916.

sie auf *schiefwinklige Kristallgitter auszudehnen*. Dies schien zunächst einige Schwierigkeiten zu bereiten, weil Summen, die bei orthogonalem Gitter durch das Produkt von drei einfachen ϑ -Funktionen von je einer Variablen dargestellt werden, im allgemeinen Fall eine verwickelte ϑ -Funktion von drei Variablen geben. Es zeigt sich aber, daß bei geeigneter Bezeichnungsweise diese Schwierigkeiten in der Tat sehr gering sind. Es ist einer der zahlreichen Fälle von Kristallgitterrechnungen, in denen der Gebrauch von zwei zueinander reziproken Systemen von Achsenvektoren ungeheure Vereinfachungen für die Beschreibung und Auffassung der Formeln herbeiführt, ohne natürlich in mathematischer Hinsicht neues zu bieten. Nur unsrer Gewöhnung, fast alles in rechtwinkligen Koordinaten zu rechnen, ist es zuzuschreiben, daß das Hilfsmittel der reziproken Vektoren nicht viel allgemeiner in Gebrauch ist. Zwingen uns äußere Umstände, wie z. B. schiefwinklige Kristallgitter, zum Abweichen von dieser Übung, so sind reziproke Vektoren die angemessene und unvermeidliche Ausdrucksform.¹⁾

Die zweite Erweiterung gegenüber den in meiner Dissertation durchgeführten Betrachtungen ist der *Übergang auf elektrostatische Potentiale*, indem

$$K_0 = 0, \quad f = 0$$

gesetzt wird. Dieser Übergang ist natürlich nicht möglich für ein einzelnes Translationsgitter, sondern nur für solche zusammengesetzten Gitter, deren Basis neutral ist. Dann läßt er sich aber ohne Schwierigkeit ausführen und man er-

1) Man vergleiche C. Runge, Vektoranalysis. Leipzig, S. Hirzel, 1919. Sind a_1, a_2, a_3 drei Vektoren, so sind die zu ihnen reziproken b_1, b_2, b_3 definiert durch die sechs Gleichungen (wir benutzen die Bezeichnungen der Enzykl. d. math. Wiss.)

$$(a_i, b_i) = 1, \quad (a_i, b_\kappa) = 0 \quad (i, \kappa = 1, 2, 3, \quad i \neq \kappa).$$

Die a_i sind auch die reziproken zu den b_i . Ist A das von den a_i , B das von den b_i aufgespannte Volum,

$$A = (a_1 [a_2 a_3]), \quad B = (b_1 [b_2 b_3]), \quad B = 1/A,$$

so ist

$$b_1 = \frac{[a_2 a_3]}{A}, \dots; \quad a_1 = \frac{[b_2 b_3]}{B}, \dots \text{ u. zykl. Vert.}$$

Für jeden beliebigen Vektor gelten die identischen Darstellungen:

$$r \equiv a_1 (b_1 r) + a_2 (b_2 r) + a_3 (b_3 r) \equiv b_1 (a_1 r) + b_2 (a_2 r) + b_3 (a_3 r).$$

hält auf diese Weise aus den zur Berechnung elektrodynamischer Potentiale geeigneten Formeln solche für die elektrostatischen Potentiale, die an Bequemlichkeit der Handhabung den Madelung'schen Formeln nicht nachstehen dürften. Es wird von den Besonderheiten der Kristallstruktur und der persönlichen Vorliebe des Rechners abhängen, welche von beiden Methoden schneller zum Ziele führt. Jedenfalls dürfte es nicht unerwünscht sein, über zwei voneinander völlig unabhängige Rechnungsweisen zu verfügen.

II.

1. Unsere erste Aufgabe ist die Ableitung der Transformationsformel einer ϑ -Funktion von 3 Variablen in einer für unsere Zwecke übersichtlichen Form. Mathematisch neues bietet diese Formulierung nicht, welche übrigens durch Spezialisierung der sehr allgemeinen Transformationsformel in A. Kräzers Lehrbuch der Thetafunktionen¹⁾ entnommen werden kann. Ihre Neuableitung in den geeigneten Bezeichnungen ist fast einfacher und setzt nur die wohlbekannte Transformationsformel für eine gewöhnliche ϑ -Funktion von einer Variablen und einem Periodenverhältnis voraus. Die dabei auftretende elementare vektorielle Umrechnung habe ich im Text unterdrückt und gebe dafür auf Anregung von Hrn. A. Sommerfeld in einer Anmerkung eine interessantere Ableitung.

Eine einfache ϑ -Funktion ist als Reihe bekanntlich definiert durch die Summe von Exponentialfunktionen, deren Exponent den Summenzeiger im zweiten Grade enthält. Letzterer heiße l und laufe von $-\infty$ bis $+\infty$. Indem man das einzelne Summenglied nach Fourier in eine Summe auflöst, und die Reihenfolge der Summationen vertauscht, erhält man eine Umformung der Summe, die als Transformationsformel bezeichnet wird.²⁾ Sie besagt im besonderen Falle die Identität folgender Summen:

1) Leipzig, Teubner, 1903, S. 108.

2) Der Physiker wird sich den Inhalt der Transformationsformel gern durch die *Wärmeleitung in einem Drahring* veranschaulichen:

Der Drahring (x von 0 bis 2π) besitze zur Zeit $t = 0$ einen Wärmepol von der Stärke 1 im Punkt $x = 0$. Gefragt ist nach der Temperaturverteilung zur Zeit t .

1. *Methode der Wärmepole (d'Alembertsche Lösung)*. Man denke sich den Drahring aufgeschnitten auf das Stück $-\pi$ bis $+\pi$ der x -Achse

$$(13) \sum_{-\infty}^{+\infty} l e^{-\tau(l+g)^2 + 2(l+g)u} = \sqrt{\frac{\pi}{\tau}} e^{\frac{u^2}{\tau}} \sum_{-\infty}^{+\infty} l e^{-\frac{\pi^2}{\tau} l^2 - 2\pi i l \left(\frac{u}{\tau} - g\right)}.$$

Als Wurzelwert ist dabei derjenige zu nehmen, dessen reeller Teil positiv ist. u heißt das Argument, τ der Modul der ϑ -Funktion und g ist ein Teil der Charakteristik $\begin{bmatrix} g \\ 0 \end{bmatrix}$. Doch ist ein Eingehen auf die Bedeutung dieser Größen für die Periodi-

gelegt. Eine in diesem Abschnitt periodische Lösung mit einem Wärmepol im Punkte $x=0$ erhält man durch sukzessive Spiegelung, d. h. Belegung der x -Achse mit Einheitspolen in den Punkten $x = 2\pi l$ (l ganzzahlig). Das Abklingen der Temperatur von einem Einheitspol nach Ort und Zeit geschieht nach der Funktion

$$u = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{e^{-\frac{\xi^2}{4t}}}{\sqrt{t}} \quad (\xi = \text{Abstand vom Pol}).$$

Also ist die gesuchte Temperaturverteilung im Ring

$$U_1 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{(2\pi l - x)^2}{4t}}}{\sqrt{t}} = \frac{e^{-\frac{x^2}{4t}}}{2\sqrt{\pi}\sqrt{t}} \sum_{-\infty}^{+\infty} e^{-\pi^2 l^2 \frac{1}{t} + \pi l \frac{x}{t}}.$$

2. *Methode der Fourierreentwicklung.* Die gesuchte Temperaturverteilung muß die räumliche Periode 2π haben, also die Fourierreentwicklung

$$U = \sum_{-\infty}^{+\infty} A_l e^{i l x} \quad (A = F u(t)).$$

Damit die Differentialgleichung der Wärmeleitung $\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = \frac{\partial U}{\partial t}$ befriedigt ist, muß sein

$$-l^2 A_l = \frac{\partial A_l}{\partial t}, \quad A_l = a_l e^{-l^2 t}, \quad (a_l = \text{konst}).$$

Der Anfangszustand für $t=0$ ($U =$ Zackenfunktion Z vom Inhalt 1 im Punkt $x=0$) verlangt

$$a_l = \frac{1}{2\pi} \int Z(\xi) e^{-i l \xi} d\xi = \frac{1}{2\pi}.$$

Daher ist

$$U_2 = \frac{1}{2\pi} \sum_{-\infty}^{+\infty} e^{-l^2 t + i l x}.$$

Der Vergleich von U_1 und U_2 gibt die obige Formel für $g=0$, $u = ix/2$, $t = \tau$ (vgl. H. v. Helmholtz, Vorlesungen Bd. VI. S. 142).

zitätseigenschaften der \mathcal{F} -Funktionen im folgenden nicht erforderlich, da uns allein die Gleichheit der beiden Reihen interessiert. Nur soviel sei an dieser Stelle über den Zusammenhang zwischen \mathcal{F} -Funktionen und Kristallgittern bemerkt: Die \mathcal{F} -Funktion von einem komplexen Argument u teilt bekanntlich die u -Ebene in Periodenparallelogramme, in denen sich der Wert der Funktion bis auf einen Faktor wiederholt. Ebenso wird der $2p$ -dimensionale Raum, in dem sich die p komplexen Veränderlichen einer Funktion von p Argumenten bewegen, in ein Zellsystem von Periodenparallelotopen aufgeteilt, in denen die Funktionswerte sich bis auf einfache Faktoren wiederholen. Der Quotient zweier \mathcal{F} mit gleichem Periodensystem ist eine $2p$ -fach streng periodische Funktion, und es gilt der Satz, daß jede $2p$ -fach periodische Funktion sich durch solche \mathcal{F} -Quotienten darstellen läßt. Die Kristallgitterpotentiale (1) bzw. (9) sind nun 3-fach periodische bzw. bis auf einen einfachen Faktor periodische Funktionen. Ihre Periodizität im Reellen wird sich als Ausschnitt aus dem R^{VI} der Argumente einer \mathcal{F} -Funktion von 3 komplexen Variablen darstellen lassen. Die Bearbeitung der Charakteristikentheorie der mehrfachen \mathcal{F} im Hinblick auf die Bedürfnisse der Kristallgitterrechnungen würde gewiß manchen beachtenswerten Zusammenhang zutage fördern, der einen auf funktionentheoretischer Basis beruhenden direkten Ausdruck solcher Potentiale gestatten würde.

2. Betrachten wir nun eine \mathcal{F} -Funktion von 3 Argumenten, die wir uns in kurzer Schreibweise durch folgende Reihe geben:

$$(14) \quad \Theta = \sum_{l_1, l_2, l_3}^{-\infty \dots +\infty} e^{-q_l^2 + i(q_l \cdot v)}.$$

Hierin sind q_l und v Vektoren, $(q_l \cdot v)$ ihr skalares Produkt. q_l ist so definiert: es seien d_1, d_2, d_3 drei beliebige Vektoren, l_1, l_2, l_3 drei ganze Zahlen und $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ drei Parameter. Dann soll sein:

$$(15) \quad q_l = (l_1 + \alpha_1) d_1 + (l_2 + \alpha_2) d_2 + (l_3 + \alpha_3) d_3 = \sum (l_i + \alpha_i) d_i.$$

Denken wir uns mit den Vektoren d_i das Translationsgitter hergestellt, so ist q_l der Fahrstrahl zu einem Gitterpunkt dieses Gitters vom Punkt $-\mathcal{A} = -\sum \alpha_i d_i$ aus, $q_l^2 = (q_l, q_l)$ das

Quadrat seiner Länge. Die Summe bezieht sich auf sämtliche Gitterpunkte des b_i -Gitters.

Der Exponent eines e -Termes lautet in ausgeschriebener Form

$$(16) \quad E = - \sum_i \sum_{\kappa} (l_i + \alpha_i)(l_{\kappa} + \alpha_{\kappa})(b_i b_{\kappa}) + i \sum (l_i + \alpha_i)(b_i v)^{.1)}$$

Nur im Fall, daß die b_i ein orthogonales Vektorensystem bilden, reduziert sich der erste quadratische Term auf die Summe von drei Quadraten. Dies bedeutet, daß die Funktion Θ in das Produkt von drei einfachen \mathcal{D} -Funktionen der Form (13) zerfällt, in denen $\frac{i}{2}(b_i v)$ die Argumente sind. Dieser Fall findet sich bei Kristallen mit orthogonalen Achsensystem verwirklicht und ist der früher von mir untersuchte.

Die Konvergenz der Summe (14) ist gesichert, wenn die Größen b_i, α_i reell sind und mithin q_i der reelle Fahrstrahl ist, wie oben beschrieben. Nichts hindert jedoch die vorstehenden Größen als komplex anzusehen, solange die Summen konvergent bleiben.

Man kann nun die Summe (14) umformen, indem man die Gleichheit (13) schrittweise auf die Summen nach l_1, l_2, l_3 anwendet. Nach einer elementaren, aber in ihrem Verlauf nicht sehr übersichtlichen Rechnung, bei der sich frühzeitige Einführung der zu den b_i reziproken c_i empfiehlt, gelangt man zu folgender Transformationsformel²⁾:

1) Es wird kaum zu Verwechslungen Anlaß geben können, daß i sowohl als Index, wie als imaginäre Einheit auftritt. In der Bezeichnungsweise von Krazer (S. 30/31) wäre, wie der Vergleich der dortigen Formeln mit (16) zeigt, $\Theta = \mathcal{D} \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \end{bmatrix} ([(b v)])_{(b_i b_{\kappa})}$.

2) Eleganter und übersichtlicher als auf dem oben angegebenen Wege läßt sich die Transformationsformel der dreifachen Theta wie folgt begründen, — ich verdanke den Hinweis darauf Hrn. A. Sommerfeld, der seinerzeit den Zusammenhang von Thetafunktionen und Wärmeleitungsproblemen als Thema zum Habilitationsvortrag eingereicht hatte.

Es sei eine Lösung der Wärmeleitungsgleichung

$$(a) \quad \frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = 0$$

aufzustellen, die in dem aus drei Vektoren $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ gebildeten parallel-epipedischen Grundbereich periodisch sein soll und zur Zeit $t = 0$ im Punkt mit dem Fahrstrahl \mathcal{B} einen Wärmepol hat. Allgemeine Sätze

Bestimmen 3 Vektoren $\delta_1 \delta_2 \delta_3$ zusammen mit einem vierten \mathfrak{A} und 3 Summenzeigern l_1, l_2, l_3 einen „Summationsvektor“

$$(15) \quad \alpha_l = l_1 \delta_1 + l_2 \delta_2 + l_3 \delta_3 + \mathfrak{A};$$

besagen die Eindeutigkeit der Lösung und wir können, indem die Lösung in zwei Formen aufgestellt wird, durch Vergleich die gewünschte Transformationsformel entnehmen.

Die d'Alembertsche Lösung dieses Problems wird erhalten, indem mit den Vektoren α_i ein Gitter errichtet wird, dessen Gitterpunkte die Fahrstrahlen

$$(b) \quad \mathfrak{R}_l = l_1 \alpha_1 + l_2 \alpha_2 + l_3 \alpha_3 \quad (l = \text{Indexripel!})$$

haben. Man setzt nun zur Zeit $t = 0$ in alle Punkte $\mathfrak{R}_l + \mathfrak{B}$ einen Einheitspol ein, der bekanntlich eine Temperaturverteilung

$$u = \frac{1}{\pi^{3/2}} \frac{1}{(4t)^{3/2}} e^{-\frac{R^2}{4t}}$$

erzeugt, wo R der Abstand Pol-Aufpunkt ist. Indem man $R^2 = (\mathfrak{R}_l + \mathfrak{B} - \mathfrak{r})^2$ einsetzt, wird die gesuchte Lösung für den Aufpunkt \mathfrak{r} :

$$(c) \quad U = \frac{1}{\pi^{3/2}} \frac{1}{(4t)^{3/2}} \sum_l e^{-\frac{1}{4t} (\mathfrak{R}_l + \mathfrak{B} - \mathfrak{r})^2}$$

Andererseits stelle man die Lösung nach Fourier⁷ her. Sie hat die Form

$$(d) \quad U = \sum A_l e^{2\pi i (\mathfrak{h}_l \mathfrak{r})}$$

wobei die „Fouriervektoren“ $2\pi \mathfrak{h}_l$ durch die zu den α_i reziproken Achsen b_i bestimmt sind:

$$(e) \quad 2\pi \mathfrak{h}_l = 2\pi (l_1 b_1 + l_2 b_2 + l_3 b_3).$$

Denn nur so läßt sich erreichen, daß alle Summenglieder in (d) ihren Wert beibehalten, wenn \mathfrak{r} um $\{n_1 \alpha_1 + n_2 \alpha_2 + n_3 \alpha_3\}$ (n_i ganzzahlig) vermehrt wird. Die Koeffizienten A_l sind Funktionen von l und t und zunächst so zu bestimmen, daß die Differentialgleichung (a) befriedigt wird. Nun ist bekanntlich das Resultat der Operation Δ , angewandt auf eines der Glieder von (d) (dies hat dieselbe räumliche Abhängigkeit wie eine ebene Welle vom Ausbreitungvektor $2\pi \mathfrak{h}_l$) nichts anderes als ein Faktor $-(2\pi \mathfrak{h}_l)^2$, der zum Glied hinzutritt. Wir erhalten somit aus (a) für A_l :

$$\frac{\partial A_l}{\partial t} \cdot e^{2\pi i (\mathfrak{h}_l \mathfrak{r})} + A_l 4\pi^2 \mathfrak{h}_l^2 e^{2\pi i (\mathfrak{h}_l \mathfrak{r})} = 0,$$

$$(f) \quad \text{integriert:} \quad A_l = C_l e^{-4\pi^2 \mathfrak{h}_l^2 \cdot t}.$$

Der Faktor C_l , der noch von l abhängen kann, ist aus der Anfangsbedingung zu bestimmen, daß für $t = 0$, $U = 0$ bis auf den Punkt $\mathfrak{r} = \mathfrak{B}$, wo U mit dem Inhalt 1 unendlich wird („Zackenfunktion“). Nun bestimmt sich der Koeffizient C_l des Gliedes $e^{2\pi i (\mathfrak{h}_l \mathfrak{r})}$ in der Fourierentwicklung einer Funktion $Z(\mathfrak{r})$ bekanntlich so:

$$(g) \quad C_l = \frac{1}{v_a} \int Z(\mathfrak{r}) e^{-2\pi i (\mathfrak{h}_l \mathfrak{r})} d\mathfrak{r}.$$

sind ferner c_i die zu den b_i reziproken Vektoren, v_a der von den b_i aufgespannte Rauminhalt und p_i ein zweiter Summationsvektor:

$$(17) \quad p_i = \pi(l_1 c_1 + l_2 c_2 + l_3 c_3),$$

so gilt für jedes Argument v die Gleichheit:

$$(18) \quad \sum_{l_1, l_2, l_3}^{-\infty \dots + \infty} e^{-q_l^2 + i(q_l, v)} \equiv \frac{\pi^{3/2}}{v_a} \sum_{l_1, l_2, l_3}^{-\infty \dots + \infty} e^{-\left(p_l - \frac{v}{2}\right)^2 + 2i(p_l, v)}$$

Das Integral rechter Hand ist dabei über alle Punkte r des Entwicklungsbereiches zu erstrecken, v_a ist der Inhalt dieses Bereichs. Im Fall unserer „Zackenfunktion“ ergibt sich:

$$(h) \quad C_l = \frac{1}{v_a} \int e^{-2\pi i(\eta_l, \mathfrak{B})}.$$

Somit lautet die Fouriersche Lösung unseres Problems:

$$(i) \quad U = \frac{1}{v_a} \sum_l e^{-4\pi^2 \eta_l^2 t + 2\pi i(\eta_l, r - \mathfrak{B})}.$$

Der Vergleich der beiden Lösungen (e) und (i) liefert die Transformationsformel der Thetafunktion. Um sie klar hervortreten zu lassen, schaffen wir die Variable t fort, indem wir setzen: $\frac{\alpha_l}{2\sqrt{t}} = b_l$. Dementsprechend wird, wenn c_i die zu den b_i reziproken Vektoren sind, $c_i = 2\sqrt{t} \bar{b}_i$; führen wir

$$\mathfrak{D}_l = \frac{\mathfrak{R}_l}{2\sqrt{t}}, \quad \mathfrak{A} = \frac{\mathfrak{B}}{2\sqrt{t}}, \quad v = \frac{r}{2\sqrt{t}}, \quad \mathfrak{S}_l = 2\sqrt{t} \bar{b}_l$$

ein, so behalten die drei ersten Größen ihre Bedeutung von Fahrstrahlen im primären, die letzte als Fahrstrahl im reziproken Gitter bei, nur daß als ersteres das zeitlich variable Gitter aus den b_i zugrunde liegt. Nennen wir schließlich v_a das aus den b_i gebildete Volumen, so ist:

$$v_a = \frac{1}{(2\sqrt{t})^{3/2}} v_a.$$

Der Vergleich von (e) und (i) ergibt nun:

$$\frac{1}{\pi^{3/2}} \sum_l e^{-(\mathfrak{D}_l + \mathfrak{A} - v)^2} = \frac{1}{v_a} \sum_l e^{-(\pi \mathfrak{S}_l)^2 + 2\pi i(\mathfrak{S}_l, v - \mathfrak{A})}$$

oder auch:

$$\sum_l e^{-(\mathfrak{D}_l + \mathfrak{A})^2 + 2(\mathfrak{D}_l + \mathfrak{A}, v)} = \frac{\pi^{3/2}}{v_a} \sum_l e^{-(\pi \mathfrak{S}_l - i v)^2 - 2\pi i(\mathfrak{S}_l, \mathfrak{A})}.$$

Ersetzen wir hierin schließlich noch v durch $i \frac{v}{2}$, $\mathfrak{D}_l + \mathfrak{A}$ durch q_l und $\pi \mathfrak{S}_l$ durch p_l , so ergibt sich die in Gleichung (18) des Textes ausgesprochene Transformation.

Die vektorielle, invariante Schreibweise der Exponenten ist bei Transformationen in den Bezugsachsen oder in den Summenzeigern sehr bequem, wovon man sich bei den Rechnungen an Steinsalz bzw. Flußspat überzeugen möge.

III.

1. Bevor wir die eigentliche Summierung der in (3) bzw. (4) aufgeschriebenen Einzelwirkungen in Angriff nehmen, müssen wir fragen, von welcher Art die Konvergenz dieser Summen ist. Die Notwendigkeit, sich mit dieser Frage zu befassen, erhellt daraus, daß eine Summe von Termen, die wie $1/R$ abnehmen, über ein allseits unbegrenztes Kristallgitter erstreckt, unmöglich konvergieren kann, es sei denn, daß positive und negative Faktoren der Terme eine geeignete Vernichtung der Einzelbestandteile bewirken. Aber auch dann kommt es auf die Reihenfolge der Summierung — allgemein auf die Summationsvorschrift — an, durch die erst einer von beliebig vielen errechenbaren Werten als der physikalisch richtige Summenwert herausgehoben wird. Beim endlichen Gitterstück treten derartige Unbestimmtheiten nicht auf und man könnte ihnen aus dem Wege gehen, wenn man einen aus endlich vielen Zellen bestehenden Kristall betrachten würde. Man würde aber hiermit eine sehr große Komplikation der Verhältnisse in Kauf nehmen, die aus der Ungleichwertigkeit der Zellen je nach ihrer Lage gegen den Rand hervorgeht: die reine Periodizität, das hervorstechende Merkmal des Kristalls, wäre in den Formeln verdeckt. Dabei ist es einleuchtend, daß die physikalisch wichtigen Erscheinungen aufgeteilt werden können in Volum- oder Materialeigenschaften, die wesentlich von der inneren Struktur, und in Oberflächen-(Rand-)erscheinungen, die vom Vorhandensein der Berandung herrühren. Letztere interessieren uns hier nicht, da es zunächst auf die Berechnung der Materialeigenschaften ankommt.¹⁾

1) Ich möchte hier auf das von mir über die optischen Potentiale (Ann. d. Phys. 49. S. 11 u. 12. 1916) gesagte verweisen, um mich nicht zu wiederholen. Man vergleiche dazu die Behandlung durch C. W. Oseen, Ann. d. Phys. 48. S. 1—56. 1915, insbesondere § 2, auch bei R. Lundblad, Untersuchungen über die Optik d. disperg. Medien, Uppsala Univ Årsskrift 1920, besonders III, 2.

Die Summationsvorschrift, durch die im folgenden die Materialeigenschaften herausgeschält werden, ohne daß die Periodizität im Kristall verdeckt würde, besteht in folgendem: es wird zunächst der Wert der Summen aufgesucht, der entstehen würde, wenn die Momente bzw. Ladungen der Atome in großer Entfernung vom Aufpunkt exponentiell abnehmen würden. Anstatt ε/R wird

$$\varepsilon \frac{e^{-K'R}}{R}, \quad \text{statt} \quad \wp \frac{e^{iK_0 R}}{R} \quad \text{wird} \quad \wp \frac{e^{iK_0 R - K'R}}{R}$$

summiert, in beiden Fällen also Glieder, die wie $e^{iK_0 R}$ abnehmen, wo K_0 einen positiv imaginären Anteil besitzt. Dieser Anteil selbst darf beliebig klein sein, so daß in endlicher Entfernung vom Aufpunkt nur unmerkliche Abänderungen des wirklichen Zustandes entstehen. Doch genügt er, um die absolute Konvergenz der Summen zu erzwingen. Der Kristall verschwimmt sozusagen in großen Entfernungen, ohne je plötzlich abubrechen. Alle Eigenschaften, die wir als Materialeigenschaften bezeichnen, d. h. solche, die aus einer gewissen beschränkten Umgebung stammen und sich deshalb unabhängig von der Begrenzung an allen gleichwertigen Punkten eines Kristallgitters wiederfinden, müssen aus diesem *randlos aufgehörenden Kristall* berechenbar sein. Für sie ist der physikalisch richtige Wert der Summen derjenige, der in der Grenze für verschwindenden Imaginärteil von K_0 hervorgeht.

2. Zur Auswertung des Potentials (9) bedienen wir uns der folgenden Darstellung der zu summierenden Einzelwirkungen:

Sei für den Augenblick $R = |\mathfrak{R}_i - \mathfrak{r}|$ die Entfernung eines Atoms vom Aufpunkt, so ist

$$(20) \quad \frac{e^{iK_0 R}}{R} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^{\infty} e^{-R^2 \varepsilon^2 + \frac{K_0^2}{4\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

Der Integrationsweg erstreckt sich von 0 bis ∞ , muß aber aus dem Punkt 0 derart herausgeführt werden, daß der

(20') reelle Teil von $\frac{K_0^2}{4\epsilon^2}$ für kleine ϵ negativ ist, etwa auf dem Wege von Fig. 1. Auf die Ableitung dieser Integraldarstellung gehe ich hier nicht ein, sondern verweise auf meine Dissertation.

Setzen wir die Darstellung in (9) ein, so wird das Potential:

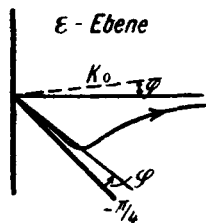


Fig. 1.

$$(21) \quad \Pi(r) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^{\infty} \sum e^{-(\mathfrak{R}_i - r)^2 \epsilon^2 + i(\tau \mathfrak{R}_i) + \frac{K_0^2}{4\epsilon^2}} d\epsilon.$$

Reihenfolge von Integration und Summation durften hierbei vertauscht werden; letztere bezieht sich auf alle Gitterpunkte \mathfrak{R}_i des einfachen Translationsgitters,

$$(7) \quad \mathfrak{R}_i = l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3.$$

Die Funktion unter dem Integral ist eine \mathcal{D} -Funktion von 3 durch die Lage des Aufpunktes r bestimmten Argumenten, auf die wir nunmehr die Transformationsformel (18) anwenden wollen. Wir vergleichen mit den auf der rechten Seite dieser Formel vorkommenden Bezeichnungen, indem wir setzen:

$$\frac{v}{2} = r\epsilon; \quad p_i = \pi \sum l_i c_i = \epsilon \mathfrak{R}_i = \epsilon \sum l_i a_i;$$

mithin
$$c_i = \frac{\epsilon}{\pi} a_i,$$

$$2\pi a_i = (f a_i), \quad |D| = \left| \frac{1}{C} \right| = \frac{\pi^3}{\epsilon^3} \frac{1}{V}, \quad \text{wo } V = (a_1 [a_2 a_3])$$

das Elementarvolumen des Atomgitters ist.

Hiernach ergeben sich für die in (18) links stehenden Größen folgende Werte, wenn mit b_i die zu den Gitterachsen a_i reziproken Vektoren bezeichnet werden:

$$b_i = \frac{\pi}{\epsilon} b_i; \quad q_i = \sum \left(l_i + \frac{(f a_i)}{2\pi} \right) \frac{\pi}{\epsilon} b_i.$$

Beachtet man, daß

$$\sum b_i (f a_i) \equiv f;$$

und führt weiter den bei allen Kristallgitterrechnungen auftretenden *Fahrstrahl im reziproken Gitter*

$$(22) \quad h_i = l_1 b_1 + l_2 b_2 + l_3 b_3$$

ein, dessen Richtung mit der Normale jener Gitterebene zusammenfällt, deren Millersche Indizes $\{l_1 l_2 l_3\}$ sind¹⁾; so läßt sich schreiben

$$q_l = \frac{1}{2\varepsilon} (2\pi h_l + f).$$

Wir erhalten so die mit (21) äquivalente Darstellung

$$(23) \quad \Pi(\tau) = \frac{2\pi}{V} \int \sum_{(0)} e^{- (2\pi h_l + f)^2 \frac{1}{4\varepsilon^2} + i(2\pi h_l + f, \tau) + \frac{K_0^2}{4\varepsilon^2} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon^3}},$$

oder indem noch eingeführt wird

$$(22') \quad \mathfrak{R}_l = 2\pi h_l + f :$$

$$(23') \quad \Pi(\tau) = \frac{2\pi}{V} \int \sum_{(0)} e^{- \frac{(\mathfrak{R}_l^2 - K_0^2) \frac{1}{4\varepsilon^2} + i(\mathfrak{R}_l, \tau)}{\mathfrak{R}_l^2 - K_0^2} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon^3}}.$$

Die Summation bezieht sich diesmal darauf, daß der Fahrstrahl h_l alle Punkte des reziproken Gitters durchläuft. Der Vektor \mathfrak{R}_l ist das 2π -fache desjenigen Fahrstrahls zum Punkte l ($= l_1, l_2, l_3$) des reziproken Gitters, der vom Anfangspunkt $(-\frac{f}{2\pi})$ aus gezogen wird.

Es sei betont, daß die Gleichheit der Integranden in (21) und (23) für jeden Wert von ε gilt, für den die Summen konvergieren — und das ist dank (20') auf dem ganzen Integrations-

1) Definition der Millerschen Indizes $h_1 h_2 h_3$: die Ebene schneidet die Achsenrichtungen in den Punkten

$$\frac{a_1}{h_1}, \frac{a_2}{h_2}, \frac{a_3}{h_3},$$

vgl. Fig. 2. Daher Normalenrichtung der Ebene gegeben durch das Vektorprodukt aus 2 Seiten:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{a_2}{h_2} - \frac{a_1}{h_1}, \frac{a_3}{h_3} - \frac{a_1}{h_1} \right] \\ &= \frac{1}{h_2 h_3} [a_2 a_3] + \frac{1}{h_1 h_2} [a_1 a_2] + \frac{1}{h_1 h_3} [a_3 a_1] = \frac{(a_1 [a_2 a_3])}{h_1 h_2 h_3} \cdot h_j. \end{aligned}$$

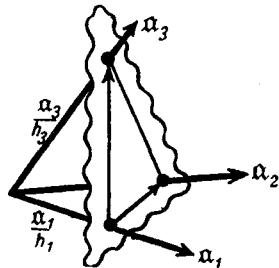


Fig. 2.

weg der Fall.¹⁾ Es ist also erlaubt, bei einer gewissen Stelle E der Integration eine, von da ab die andere Darstellung zu gebrauchen. Hierin liegt die Verwertung der Formeln zur numerischen Rechnung. In Formel (21) ist die Konvergenz der Reihe bei großen ε gut, während sie bei kleinen ε schlecht ist infolge der Kleinheit von K_0 , das zur Berechnung der elektrostatischen Potentiale sogar gegen 0 gehen soll. Umgekehrt aber ist die Konvergenz der Summe in (23) für große ε schlecht, für kleine ε auch bei $K_0 = 0$ gut.

Beide Darstellungen ergänzen sich und man wird zur numerischen Rechnung geeignete Formeln erhalten, wenn für kleine Werte von ε (23), für große ε (21) benutzt wird, indem eine Trennungsstelle $\varepsilon = E$ auf dem Integrationsweg eingeführt wird, bei der die eine Darstellung zugunsten der anderen verlassen wird:

$$(24) \quad \left\{ \begin{array}{l} II = II^{(1)} + II^{(2)}, \\ II^{(1)} = \frac{2\pi}{V} \int_{(0)}^E \sum e^{-\Re_l^2 \frac{1}{4\varepsilon^2} + \frac{K_0^2}{4\varepsilon^2} + i(\Im_l, r)} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon^3}, \\ II^{(2)} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_E^\infty \sum e^{-\Re_l^2 - r^2 \varepsilon^2 + i(t \Im_l) + \frac{K_0^2}{4\varepsilon^2}} d\varepsilon. \end{array} \right.$$

Die Integration in $II^{(1)}$ läßt sich allgemein ausführen, da

$$\int_{(0)}^E e^{-\frac{A}{4\varepsilon^2}} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon^3} = \frac{2}{A} e^{-\frac{A}{4E^2}}$$

ist, wenn der Integrand auf dem betr. Wege für $\varepsilon = 0$ verschwindet. Also ist:

$$(25) \quad II^{(1)} = \frac{4\pi}{V} \sum e^{-\frac{(\Re_l^2 - K_0^2)}{4\varepsilon^2} + i(\Im_l, r)} \frac{1}{\Re_l^2 - K_0^2} \dots$$

1) Mit Ausschluß des Grenzpunktes $\varepsilon = 0$ in (21) und $\varepsilon = \infty$ in (23). Man überzeugt sich jedoch, daß der Ausschluß der Grenzpunkte auf dem Integrationsweg den Wert weder des Einzelintegrals (20) noch der Summe II ändert, solange sie überhaupt endlich ist, dank den Faktoren $e^{-\frac{K_0^2}{4\varepsilon^2}}$ und $\frac{1}{\varepsilon^3}$ in (21) bzw. (23).

Wählen wir insbesondere $E = \infty$, sodaß $\Pi^{(1)}$ unser gesamtes Potential darstellt, so erhalten wir die bekannte *Fourierdarstellung des Potentials*

$$(25') \quad \Pi = \frac{4\pi}{V} \sum \frac{e^{i(\mathfrak{R}_i r)}}{\mathfrak{R}_i^2 - K_0^2},$$

deren Identität mit der z. B. von Born in seinem Buche (II, § 25) gegebenen Fourierreentwicklung unschwer eingesehen wird. Das einzelne Summenglied in (25') stellt in Verbindung mit dem zeitlichen Periodizitätsfaktor $e^{-i\omega t}$ eine ebene Welle vom Ausbreitungsvektor \mathfrak{R}_i dar, deren Amplitude um so größer ist, je mehr sich die Größe von \mathfrak{R}_i der Ausbreitungskonstante $K_0 = \frac{\omega}{c}$ im leeren Raume nähert.¹⁾

Die \mathcal{F} -Transformationsformel (18) vermittelt also den gleichen Übergang wie diejenige für ein Argument beim Problem der Wärmeleitung im Ringe: von der „d'Alembertschen“²⁾ zur Fourierschen Darstellung, vom Aufbau aus Quellen zum Aufbau aus Eigenfunktionen. Da jede Fourierreentwicklung, deren Gültigkeitsbereich ein gewisses, durch 3 Vektoren \mathfrak{a}_i festgelegtes Parallelepipid ist, nach den Fahrstrahlen \mathfrak{h}_j zu den Punkten des zugehörigen reziproken Gitters fortschreitet³⁾, so ist das Auftreten der reziproken Vektoren in der Transformationsformel (18) kein Zufall, sondern steht in unmittelbarem Zusammenhang mit dieser Eigentümlichkeit der \mathcal{F} , das Bindeglied zwischen der d'Alembertschen und der Fourierschen Lösung zu sein.

3. Wichtiger für die meisten Zwecke und schwieriger zu berechnen als das Gesamtpotential (9) ist das erregende Po-

1) Die sog. Kugelkonstruktion der Theorie der Röntgeninterferenzen ist die geometrische Veranschaulichung des Potentials (25'). Vgl. Phys. Zeitschr. 14. S. 465, 1913 oder meine Habilitationsschrift Ann. d. Phys. 54. S. 519. 1917.

2) Bei Wärmeleitungsproblemen hat Laplace als erster die Lösung als Integral über die Wirkungen von Quellen aufgestellt; Fourier kennt diese Bedeutung der mathematischen Form (vgl. Enzyklop. d. math. Wiss. V, 4, § 5 und 6). Jedoch darf die Lösung hier wohl nach d'Alembert benannt werden, der die entsprechende Behandlung bei der Saite durchgeführt hatte.

3) Vgl. Anm. zu S. 262.

tential (10), das durch Fortlassen des von einem Gitterpunkte P stammenden Einzelpotentials aus (9) entsteht:

$$(26) \quad \Pi'_P(r) = \Pi(r) - \frac{e^{i K_0 |\Re_P - r|} + i (\Im \Re_P)}{|\Re_P - r|}.$$

Die Integraldarstellung (20) gestattet, das Einzelpotential vom Gesamtpotential abzuziehen. $\Pi(r)$ in $\Pi^{(1)}$ und $\Pi^{(2)}$ nach (24) aufteilend und die Integration in (20) ebenfalls in die Teile $0 \dots E$, $E \dots \infty$ zerlegend, sehen wir, daß sich aus der Summe $\Pi^{(2)}$ das auf $\Re_i = \Re_P$ bezügliche Glied gerade forthebt — wie ja verständlich ist, da in $\Pi^{(2)}$ jedes Summenglied die Wirkung eines Atoms darstellt. Drücken wir das Fortlassen des Gliedes \Re_P bei der Summation durch das Zeichen $\sum_{(P)}$ aus.

An $\Pi^{(1)}$ hingegen ist das Integral

$$(27) \quad \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^E e^{-(\Re_P - r)^2 \varepsilon^2 + \frac{K_0^2}{4\varepsilon^2}} d\varepsilon,$$

abzuziehen. Wird die wohlbekannte und tabulierte Fehlerfunktion¹⁾

$$(28) \quad \Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-x^2} dx$$

eingeführt, so läßt sich das Integral exakt durch sie ausdrücken, wie im Anhang gezeigt wird:

$$(29) \quad \left\{ \begin{aligned} & \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^E e^{-(\Re_P - r)^2 \varepsilon^2 + \frac{K_0^2}{4\varepsilon^2}} d\varepsilon = i \frac{\sin K_0 |\Re_P - r|}{|\Re_P - r|} \\ & + \frac{1}{2 |\Re_P - r|} \left\{ e^{i K_0 |\Re_P - r|} \Phi \left(|\Re_P - r| E + \frac{i K_0}{E} \right) \right. \\ & \quad \left. + e^{-i K_0 |\Re_P - r|} \Phi \left(|\Re_P - r| E - \frac{i K_0}{E} \right) \right\}. \end{aligned} \right.$$

Man hat demnach die folgenden streng gültigen Formeln für das erregende Potential:

1) Jahnke-Emde, Funktionentafeln, Teubner 1909.

$$\begin{aligned}
 & \Pi_P'(\mathbf{r}) = \Pi_P^{(1)}(\mathbf{r}) + \Pi_P^{(2)}(\mathbf{r}), \\
 & \Pi_P^{(1)}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{v} \sum e^{-\left\{ \Re_l^2 - K_0^2 \right\} \frac{1}{4E^2} + i(\Re_l, \mathbf{r})} - i \frac{\sin K_0 |\Re_P - \mathbf{r}|}{|\Re_P - \mathbf{r}|} \\
 & \quad - \frac{1}{2|\Re_P - \mathbf{r}|} \left\{ e^{iK_0 |\Re_P - \mathbf{r}|} \Phi \left(|\Re_P - \mathbf{r}| E + \frac{iK_0}{E} \right) \right. \\
 & \quad \left. + e^{-iK_0 |\Re_P - \mathbf{r}|} \Phi \left(|\Re_P - \mathbf{r}| E - \frac{iK_0}{E} \right) \right\}, \\
 & \Pi_P^{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_E^\infty \sum_{(P)} e^{-(\Re_l - \mathbf{r})^2 \varepsilon^2 + i(\mathfrak{t} \Re_l) + \frac{K_0^2}{4\varepsilon^2}} d\varepsilon \\
 & = \sum_{(P)} \left\{ \frac{\cos K_0 |\Re_l - \mathbf{r}|}{|\Re_l - \mathbf{r}|} \right. \\
 & \quad - \frac{1}{2|\Re_l - \mathbf{r}|} \left[e^{iK_0 |\Re_l - \mathbf{r}|} \Phi \left(|\Re_l - \mathbf{r}| E + \frac{iK_0}{2E} \right) \right. \\
 & \quad \left. \left. + e^{-iK_0 |\Re_l - \mathbf{r}|} \cdot \Phi \left(|\Re_l - \mathbf{r}| E - \frac{iK_0}{2E} \right) \right] \right\} e^{i(\mathfrak{t} \Re_l)}.
 \end{aligned}
 \tag{30}$$

In $\Pi_P^{(2)}$ ist das Integral gemäß Formel (III) des Anhangs eingesetzt worden.

Was ist nun bezüglich der Konvergenz der Summen durch die Umformungen erreicht worden?

$\Pi_P^{(1)}$ ist offenbar sehr schnell konvergent, da die Summenglieder im wesentlichen abnehmen wie $\frac{1}{\mathfrak{h}_l^2} e^{-4\pi^2 \mathfrak{h}_l^2 \frac{1}{E^2}}$, wo \mathfrak{h}_l der Fahrstrahl im reziproken Gitter ist, über dessen Punkte summiert werden muß. (\Re_l ist nach (22') von der Größenordnung \mathfrak{h}_l). Je kleiner E , um so besser die Konvergenz von $\Pi_P^{(1)}$.

Bei $\Pi_P^{(2)}$ scheint zunächst gegenüber der ursprünglichen Gestalt kein Fortschritt erzielt, da hier wieder Größen von der Ordnung $\frac{\cos K \Re}{\Re}$ über die Gitterpunkte des Atomgitters zu summieren sind. Man sieht jedoch, daß dieser schlecht konvergente Teil der Summe sich heraushebt, sobald es bei größeren Werten der Entfernung $\Re = |\Re_l - \mathbf{r}|$ erlaubt ist, die Fehlerfunktion wie folgt anzunähern:

$$\Phi(x) = 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-x^2}}{x}.
 \tag{31}$$

Das einzelne Summenglied von $\Pi_P^{(2)}$ wird dann, indem der schlecht konvergierende Teil sich forthebt:

$$(32) \quad \frac{E}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{e^{-\left(\mathfrak{R}_l - r\right)^2 E^2 + \frac{K_0^2}{4 E^2}}}{\left(\mathfrak{R}_l - r\right)^2 E^2 + \frac{K_0^2}{4 E^2}} \cdot e^{i\left(t \mathfrak{R}_l\right)} .$$

Dies heißt aber, daß die Summe in der gleichen Weise konvergiert wie $\Pi_P^{(1)}$, indem nämlich die Glieder abnehmen wie

$$\frac{1}{E \sqrt{\pi}} \frac{1}{\left(\mathfrak{R}_l - r\right)^2} e^{-\left(\mathfrak{R}_l - r\right)^2 E^2} .$$

$\left(\mathfrak{R}_l - r\right)$ ist der Fahrstrahl vom Aufpunkt zu den Punkten des Atomgitters. Die Konvergenz ist um so besser, je *größer* E .

Durch die Wahl der Übergangsstelle E haben wir es somit in der Hand, entweder die Reihen von $\Pi_P^{(1)}$ oder die von $\Pi_P^{(2)}$ zu beliebig schneller Konvergenz zu zwingen. Ein mittlerer Wert von E wird beide Reihen für die numerische Rechnung geeignet machen.

4. Handelt es sich nicht um das erregende, sondern um das *Gesamtpotential*, welches in einem Aufpunkt P zu bilden ist, der nicht mit einem Gitterpunkt zusammenfällt, so ist in $\Pi^{(2)}$ das vorher fortgelassene Glied mitzunehmen und in $\Pi^{(1)}$ fallen die abzuziehenden Terme fort.

Es ist also, indem wieder in $\Pi^{(1)}$ die Summe über das reziproke, in $\Pi^{(2)}$ über das Atomgitter erstreckt wird:

$$(33) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Pi(r) = \Pi^{(1)}(r) + \Pi^{(2)}(r), \\ \Pi^{(1)}(r) = \frac{4\pi}{V} \sum e^{-\left\{\mathfrak{R}_l^2 - K_0^2\right\} \frac{1}{4 E^2} + i\left(\mathfrak{R}_l, r\right)} \frac{1}{\mathfrak{R}_l - K_0^2}, \\ \Pi^{(2)}(r) = \sum \left[\frac{\cos K_0 R_{lP}}{R_{lP}} - \frac{1}{2 R_{lP}} \left\{ e^{i K_0 R_{lP}} \Phi\left(R_{lP} E + \frac{i K_0}{2 E}\right) \right. \right. \\ \left. \left. + e^{-i K_0 R_{lP}} \Phi\left(R_{lP} E - \frac{i K_0}{2 E}\right) \right\} \right] e^{i\left(t \mathfrak{R}_l\right)}, \\ R_{lP} = \left| \mathfrak{R}_l - r \right|. \end{array} \right.$$

Wenn nun das ganze Gitter aus mehreren (T) Translationsgittern besteht, so ist nach (7) und (8), sowie (33)

$$(34) \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathfrak{P}(r) = \sum_t \mathfrak{p}_t e^{i\left(t \tau_t\right)} \left\{ \Pi^{(1)}\left(r - r_t\right) + \Pi^{(2)}\left(r - r_t\right) \right\} \\ = \mathfrak{P}^{(1)}(r) + \mathfrak{P}^{(2)}(r). \end{array} \right.$$

In $\Pi^{(2)}$ ist die Summe jetzt über alle Gitterpunkte, also über l und t zu erstrecken und der erste Bestandteil läßt sich übersichtlicher unter Einführung des Strukturfaktors¹⁾

$$(35) \quad \mathfrak{S}_l = \sum_t p_t e^{-2\pi i(\mathfrak{h}_l, \mathbf{r})}$$

schreiben:

$$(36) \quad \mathfrak{P}^{(1)}(\mathbf{r}) = \sum_l \mathfrak{S}_l \frac{e^{-\{\mathfrak{K}_l^2 - K_0^2\} \frac{1}{4E^2} + i(\mathfrak{K}_l, \mathbf{r})}}{\mathfrak{K}_l^2 - K_0^2}.$$

Die Bedeutung von \mathfrak{S}_l zeigt sich, wenn $E = \infty$ gesetzt wird und sich das Potential auf $\mathfrak{P}^{(1)}$ reduziert: \mathfrak{S}_l ist das gesamte Moment, mit dem die Basisgruppe an der Aussendung derjenigen ebenen Welle beteiligt ist, die durch das l^{te} Summenglied dargestellt wird. Diese Welle entsteht nach der Kugelkonstruktion aus der „einfallenden“ Welle mit der Normalen \mathfrak{K} durch „Reflexion“ an der Ebene mit der Normalen \mathfrak{h}_l . Der im Strukturfaktor auftretende Phasenfaktor $(\mathfrak{h}_l, \mathbf{r})$ berücksichtigt das Heraustreten der einzelnen Atome der Basisgruppe aus der reflektierenden Ebene.

Schließlich sei noch angedeutet, daß auch im zusammengesetzten Gitter das erregende Potential für ein Atom P in zwei Teile zerlegt wird:

$$\mathfrak{P}_P(\mathbf{r}) = \mathfrak{P}_P^{(1)}(\mathbf{r}) + \mathfrak{P}_P^{(2)}(\mathbf{r}),$$

die leicht aus (20) und (35) aufzuschreiben sind.

Hiermit brechen wir die Betrachtungen für das optische Potential ab, das nicht selbst, sondern dessen räumliche Ableitungen in der Optik Gegenstand der Berechnung sind. Diese Ableitungen können an den angegebenen Reihen gliedweise gebildet werden, während z. B. zweimalige gliedweise Differentiation der Fourierdarstellung (25') nicht erlaubt ist, da sie zu nicht konvergenten Reihen führt. Die absolut konvergenten Darstellungen, die durch die Umformung gewonnen sind, stellen somit auch in dieser Hinsicht einen Fortschritt dar.

1) In der Theorie der Röntgeninterferenzen sind die Momente p_t gleichgerichtet; es tritt deshalb in der üblichen Definition des Strukturfaktors der vektorielle Charakter nicht hervor.

IV.

1. Der *Grenzübergang von den optischen zu den elektrostatischen Potentialen*, der durch Verschwindenlassen von \mathfrak{k} und K_0 und Ersetzen des Momentes \mathfrak{p} durch die Ladung ε geschieht, ist natürlich nur möglich, wenn die Basisgruppe neutral ist. Indem wir das Gitter gemäß Gl. (7), (7') in einfache Translationsgitter (Index t) zerlegt denken, sprechen wir diese Bedingung so aus:

$$(37) \quad \sum \varepsilon_t = 0 \quad t = 1, 2, \dots T.$$

Das Gesamtpotential an irgend einem Aufpunkt \mathfrak{r} , der nicht mit einem Gitterpunkt zusammenfällt, wird aus (33) bis (36) erhalten, wenn dort $K_0 = \mathfrak{k} = 0$ gesetzt wird. Hierbei geht \mathfrak{R}_t in $2\pi \mathfrak{h}_t$ über. Es wird:

$$(38) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Pi(\mathfrak{r}) = \Pi^{(1)}(\mathfrak{r}) + \Pi^{(2)}(\mathfrak{r}), \\ \Pi^{(1)}(\mathfrak{r}) = \frac{1}{\pi V} \sum_t S_t \frac{e^{-\frac{\pi^2}{E^2} \mathfrak{h}_t^2 + 2\pi i(\mathfrak{h}_t \mathfrak{r})}}{\mathfrak{h}_t^2}; \\ \Pi^{(2)}(\mathfrak{r}) = \sum_t \sum_l \varepsilon_t \frac{1 - \Phi(R_{ltP} E)}{R_{ltP}}; \end{array} \right. \quad \left. \begin{array}{l} S_t = \sum_{t'} \varepsilon_{t'} e^{-2\pi i(\mathfrak{h}_{t'} \mathfrak{r}_{t'})}, \\ R_{ltP} = |\mathfrak{R}_t + \mathfrak{r}_t - \mathfrak{r}|. \end{array} \right.$$

Das unendlich werdende Glied in $\Pi^{(1)}$ für $\mathfrak{h}_t = 0$ fällt wegen (37) fort, da der Strukturfaktor S_t Null wird. Übrigens hat, da es sich um ein skalares Potential handelt, der Strukturfaktor den Vektorcharakter eingebüßt. Beide Reihen konvergieren sehr gut.

Indem wir uns wieder dem für einen Gitterpunkt $\mathfrak{R}_{t'} + \mathfrak{r}_{t'}$ geltenden *erregenden Potential* zuwenden, ist bei $\Pi^{(2)}$ das eine durch die Kombination (l', t') gekennzeichnete Glied fortzulassen, wie an der Summe angedeutet werden möge. Der von $\Pi^{(1)}$ abzuziehende Betrag wird aus (30) erhalten. Sonach ist:

$$(39) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Pi_{v'v'}(\mathfrak{r}) = \Pi_{v',v'}^{(1)}(\mathfrak{r}) + \Pi_{v',v'}^{(2)}(\mathfrak{r}), \\ \Pi_{v',v'}^{(1)}(\mathfrak{r}) = \frac{1}{\pi V} \sum_t S_t \frac{e^{-\frac{\pi^2}{E^2} \mathfrak{h}_t^2 + 2\pi i(\mathfrak{h}_t \mathfrak{r})}}{\mathfrak{h}_t^2} - \varepsilon_{v't'} \frac{\Phi(E \mathfrak{R}_{v't'P})}{R_{v't'P}}, \\ \Pi_{v',v'}^{(2)}(\mathfrak{r}) = \sum_{l'} \sum_{t'} \varepsilon_{lt'} \frac{1 - \Phi(E \mathfrak{R}_{lt'P})}{\mathfrak{R}_{lt'P}}. \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} S_t = \sum_{v'} \varepsilon_{v'} e^{-2\pi i(\mathfrak{h}_{v'} \mathfrak{r}_{v'})}, \\ \mathfrak{R}_{lt'P} = |\mathfrak{R}_t + \mathfrak{r}_t - \mathfrak{r}|. \end{array} \right.$$

Schließlich erhält man hieraus den Faktor φ' , Gl. (3), der gesamten beim Gitteraufbau gegen das Ion l' , t' geleisteten Arbeit, indem man $r = \mathfrak{R}_l' + r_t'$ werden läßt. Offenbar muß für alle Ionen des gleichen Translationsgitters t' derselbe Wert entstehen und wir dürfen $l' = (000)$ setzen. Es wird dann, da $\lim \frac{\Phi(x)}{x} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}$ ist, aus (39)

$$(40) \quad \left\{ \begin{array}{l} \varphi_{l'}' = \varphi_{l'}^{(1)} + \varphi_{l'}^{(2)}, \\ \varphi_{l'}^{(1)} = \frac{1}{\pi V} \sum_{l, t} S_{lt'} e^{-\frac{\pi^2}{E^2} b_l'^2} - \varepsilon_{l'} \frac{2E}{\sqrt{\pi}}, \\ S_{lt'} = \sum_t \varepsilon_t e^{2\pi i (b_l, r_{l'} - r_t)}, \\ \varphi_{l'}^{(2)} = \sum_{ll'(0l')} \varepsilon_t \frac{1 - \Phi(E R_{ll'})}{R_{ll'}}; \quad R_{ll'} = |\mathfrak{R}_l + r_t - r_{l'}|. \end{array} \right.$$

Am Summenzeichen für $\varphi_{l'}^{(1)}$ ist durch den Akzent daran erinnert, daß das Glied $b_l'^2 = 0$ fortfällt.

Diese in Strenge gültigen Formeln für die elektrostatischen Potentiale bilden einfache geschlossene Ausdrücke und haben den Vorteil, daß die höheren Summenglieder sehr schnell abnehmen. Die Trennungsstelle E , von deren Wert die Summe $\varphi^{(1)} + \varphi^{(2)}$ nicht abhängen kann, gibt der Formel eine gewisse Geschmeidigkeit, die noch eine Anpassung je nach dem speziellen zu berechnenden Gitter gestattet. Vergrößerung von E bedeutet Ersparnis von Gliedern in $\varphi^{(2)}$, Verkleinerung Ersparnis bei $\varphi^{(1)}$. Es ist übrigens zu beachten, daß E die Dimension einer reziproken Länge hat, wie die Integrationsvariable ε in (20), aus der es entstanden ist.

Um die Formel in den Dimensionen übersichtlicher zu schreiben, setzen wir $E = \eta/\delta$, indem unter δ irgend eine Längendimension des Kristallgitters verstanden wird. Dann wird

$$(40') \quad \left\{ \begin{array}{l} \varphi_{l'}^{(1)} = \frac{\delta^2}{\pi V} \sum_{l, t} S_{lt'} e^{-\frac{\pi^2}{\eta^2} b_l'^2 \delta} - \frac{\varepsilon_{l'}}{\delta} \frac{2\eta}{\sqrt{\pi}}, \\ S_{lt'} = \sum_t \varepsilon_t e^{2\pi i (b_l, r_{l'} - r_t)}, \\ \varphi_{l'}^{(2)} = \frac{1}{\delta} \sum_{ll'(0l')} \varepsilon_t \frac{1 - \Phi\left(\eta \frac{R_{ll'}}{\delta}\right)}{R_{ll'} / \delta}. \end{array} \right.$$

2. *Gitterenergie von Steinsalz.* Die Auswertung der obigen Formeln mag am Steinsalz und Flußspatgitter erläutert werden, deren Energien durch die Berechnungen von Madelung bzw. Landé-Bormann bekannt sind. Wir beschränken uns im Text auf die notwendigsten Erläuterungen.

Na^+ und Cl^- bilden je ein flächenzentriertes Gitter von der Würfelkante a .¹⁾ Wir wählen $\delta = a$. Achsen a_i , siehe Fig. 3a, zugehöriges Volum

$$F = \frac{a^3}{4}; \quad r_{\text{Na}} = 0, \quad r_{\text{Cl}} = \frac{1}{2}(a_1 + a_2 + a_3).$$

Reziproke Achsen b_i (vgl. Fig. 3b) ergeben für den Endpunkt von b_i alle Punkte eines körperzentrierten Gitters von der Würfelkante $2/a$. Der Strukturfaktor ist

$$S_{l_i, \text{Na}} = \varepsilon(1 - e^{\pi i (l_1 + l_2 + l_3)}) = \begin{cases} 0 & \text{für } \sum l_i \text{ gerade} \\ 2\varepsilon & \text{für } \sum l_i \text{ ungerade.} \end{cases}$$

1) Die Geometrie der 3 Bravais'schen kubischen Gitter und ihrer Reziproken gestaltet sich folgendermaßen:

1. *Gewöhnliches kubisches Gitter.* Länge der Würfelkante a . 3 orthogonale Achsen a_i beschreiben das Gitter als Translationsgitter. $V = a^3$. Die reziproken Vektoren b_i fallen der Richtung und dem Sinn nach mit den a_i zusammen, ihre Länge $1/a$, das von ihnen aufgespannte Volumen $B = 1/a^3$.

2. *Flächenzentriertes kubisches Gitter.* Als Translationsgitter beschrieben durch $a_i =$ halben Flächendiagonalen des Grundwürfels. $|a_i| = a/\sqrt{2}$. Da das Gitter auch aufgefaßt werden kann als bestehend aus 4 einfachen kubischen Gittern, ist $V = \frac{1}{4}a^3$. Die b_i fallen in die Richtung der Würfelkörperdiagonalen,

$$|b_i| = \frac{\sqrt{3}}{a}, \quad B = \frac{4}{a^3},$$

s. Fig. 3.

3. *Körperzentriertes kubisches Gitter*
 $a_i =$ halbe Körperdiagonalen,

$$|a_i| = a \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad V = \frac{a^3}{2};$$

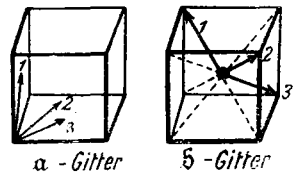


Fig. 3.

die α -Achsen haben also die gleiche Lage, wie bei 2. die β -Achsen. Daher müssen diesmal die β -Achsen die Richtung der Flächendiagonalen haben, das eingeschlossene Volum ist $B = 2/a^3$, ihre Länge daher $\frac{\sqrt{2}}{a}$.

Betrachtet man die ganzen von den a_i und b_i gebildeten Gitter, so findet sich folgende Zuordnung, welche die obigen Tatsachen anders ausspricht:

Von den Gitterpunkten liefert also die Hälfte keinen Beitrag. Die übrigbleibenden Gitterpunkte sind diejenigen des „körperzentrierenden“ Gitters, die insgesamt ein einfaches kubisches Gitter von der Kante $2/a$ bilden, in dem jedoch der Fahrstrahl h_i vom Zentrum eines Elementarwürfels aus zu zählen ist:

$$\begin{aligned} h_i^2 &= \{(H_1 - 1/2)^2 + (H_2 - 1/2)^2 + (H_3 - 1/2)^2\} \cdot 4/a^2 \\ &= 1/a^2 \sum (2H_i - 1)^2. \end{aligned}$$

H_i sind wieder ganze Zahlen (die mit den l_i durch die gleiche Substitution zusammenhängen, welche die Achsen a_i in die orthogonalen Achsen des einfachen kubischen Gitters überführt. Vgl. bei Flußspat den Übergang zu orthogonalen Achsen durch Substitution statt geometrisch am Gitter ausgeführt).

Abstand $R_{liNa}^2 = \sum (l_i \frac{a}{2})^2$; Ladung $\varepsilon_i = \begin{cases} +\varepsilon & \text{für } \sum l_i \text{ gerade} \\ -\varepsilon & \text{für } \sum l_i \text{ ungerade.} \end{cases}$

$$(41) \quad \begin{cases} \varphi_{Na}^{(1)} = \frac{\varepsilon}{a} \left\{ \frac{4}{\pi} \sum 2 \cdot \frac{e^{-\frac{\pi^2}{\eta^2} \sum (2H_i - 1)^2}}{\sum (2H_i - 1)^2} - \frac{2\eta}{\sqrt{\pi}} \right\} \\ \varphi_{Na}^{(2)} = \frac{\varepsilon}{a} \sum (-1)^{\sum l_i} \frac{1 - \Phi(\eta/2 \sqrt{\sum l_i^2})}{1/2 \sqrt{\sum l_i^2}}. \end{cases}$$

Erste numerische Berechnung: Wir wählen die Übergangsstelle η so, daß in beiden Reihen $\varphi^{(1)}$ und $\varphi^{(2)}$ die Summenglieder asymptotisch gleich schnell abnehmen. Wegen (31) gibt dies für große Werte der Summenzeiger:

$$\frac{4\pi^2}{\eta^2} = \frac{\eta^2}{4}, \quad \eta = 2\sqrt{\pi}.$$

Atomgitter.

1. Gewöhnliches kubisches Gitter, Würfelkante a .
2. Flächenzentriertes kub. Gitter, Würfelkante a .
3. Körperzentriertes kub. Gitter, Würfelkante a .

Reziprokes Gitter.

- Gewöhnliches kubisches Gitter, Würfelkante $1/a$.
- Körperzentriertes kub. Gitter, Würfelkante $2/a$.
- Flächenzentriertes kub. Gitter, Würfelkante $2/a$.

Ein *Translationsgitter* (einerlei ob Atomgitter oder reziprokes) mit Achsen $2c_i$ enthält die Punkte $\mathfrak{R} = l_1 c_1 + l_2 c_2 + l_3 c_3$, wo die l_i alle geraden Zahlen durchlaufen. Durch *Körperzentrierung* dieses Gitters entsteht ein Gitter, in dem die l_i nur die „ungemischten“ Tripel durchlaufen, d. h. die l_i entweder alle gerade oder alle ungerade sind. Durch *Flächenzentrierung* des gewöhnlichen kubischen wird den l_i die Bedingung $\sum l_i = \text{gerade Zahl}$ auferlegt.

Also Rechenformeln:

$$(41') \quad \begin{cases} \varphi_{Na}^{(1)} = \frac{\epsilon}{a} \cdot 2 \left\{ \sum \frac{e^{-\pi/4 \sum (2H_i - 1)^2}}{\pi/4 \sum (2H_i - 1)^2} - 2 \right\} \\ \varphi_{Na}^{(2)} = \frac{\epsilon}{a} 2\sqrt{\pi} \sum (-1)^{\sum l_i} \frac{1 - \Phi \sqrt{\pi (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)}}{\sqrt{\pi (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)}} \end{cases}$$

Zur numerischen Rechnung tragen wir in die erste Spalte der Tabellen die Wertetripel der Indizes ein, in die zweite die Anzahl Glieder, die sich unter Berücksichtigung von Vertauschungen und Vorzeichenwechsel daraus bilden lassen. Die Bedeutung der weiteren Spalten erhellt genügend aus den Überschriften.

$\varphi_{Na}^{(1)}$	$(2H_i - 1)$	Anzahl	$\sum (2H_i - 1)^2$	Argum.	$e^{-\text{Arg.}}$	$\frac{e^{-\text{Arg.}}}{\text{Argum.}}$	Anz.
	111	8	3	2,356	0,09500	0,3226	
	113	24	11	8,639	0,00018	0,0005	
	133	24	19	14,91	—	—	
	⋮	⋮	⋮	⋮	—	—	
							0,3231

$$\frac{\alpha}{\epsilon} \varphi_{Na}^{(1)} = -2 \cdot 1,677 = -3,3538.$$

$\varphi_{Na}^{(2)}$	l_i	$(\pm) \cdot \text{Anzahl}$	$\sum l_i^2$	Argum.	$1 - \Phi$	$(1 - \Phi) \frac{\text{Anzahl}}{\text{Argum.}}$
	001	- 6	1	1,7725	0,0122	- 0,0413
	011	+ 12	2	2,506	0,0004	+ 0,0019
	111	- 8	3	3,065	—	—
	002	+ 6	4	—	—	—
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
						- 0,0394

$$\frac{\alpha}{\epsilon} \varphi_{Na}^{(2)} = -2 \sqrt{\pi} \cdot 0,0394 = -0,1403$$

$$\frac{\alpha}{\epsilon} \varphi_{Na} = -3,494(1)$$

Wie man sieht, konvergieren beide Reihen so stark, daß nur je zwei verschiedene Glieder berücksichtigt werden müssen, um die dritte Stelle hinter dem Komma noch mitzunehmen. Die gesamte beim Gitteraufbau zu leistende Arbeit ist, da $\varphi_{Cl} = -\varphi_{Na}$ und $-\epsilon_{Cl} = \epsilon_{Na} = \epsilon$:

$$1/2 (\epsilon_{Na} \varphi_{Na} + \epsilon_{Cl} \varphi_{Cl}) = \epsilon \varphi_{Na} = -\frac{\epsilon^2}{\alpha} \cdot 3,494(1).$$

Zweite numerische Berechnung: Die Übergangsstelle η soll so groß gewählt werden, daß nur $\varphi^{(1)}$ zu berücksichtigen ist. Das größte Glied in $\varphi^{(2)}$ ist

$$2(1 - \Phi(\eta/2))$$

und tritt sechsmal auf. $1 - \Phi(2,9)$ ist nach den Funktionentafeln $< 0,0005$, also ist für eine Rechengenauigkeit von drei Dezimalstellen die geforderte Kleinheit von $\varphi^{(2)}$ gewiß erreicht, wenn $\eta = 2\pi$ genommen wird:

$$(41'') \quad \varphi_{Na} = \varphi_{Na}^{(1)} = \frac{\varepsilon}{a} \left\{ \frac{2}{\pi} \sum \frac{e^{-\frac{1}{4} \sum (2H_i - 1)^2}}{1/4 \sum (2H_i - 1)^2} - 4\sqrt{\pi} \right\}.$$

$(2H_i - 1)$	Anzahl	$\sum (2H_i - 1)^2$	Argum.	$e^{-\text{Arg.}}$	$e^{-\text{Arg.}}$	Anzahl Argum.
111	8	3	0,75	0,47237		5,03861
113	24	11	2,75	0,06393		0,55777
133	24	19	4,75	0,00865		0,04373
115	24	27	6,75	0,00117		0,00556
333	8					
135	48	35	8,75	0,00016		0,00087
117	24	51	⋮	⋮		⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		⋮

$$\varphi_{Na} = \frac{\varepsilon}{a} \left\{ \frac{2}{\pi} \cdot 5,64654 - 4\sqrt{\pi} \right\}$$

$$= -\frac{\varepsilon}{a} \cdot 3,494(3).$$

5,64654

Die Übereinstimmung mit dem zuerst berechneten Werte ist auf mehr als 1 Promille erreicht. Von dem Madelung'schen Wert 3,487(6) bemerkt man eine geringfügige Abweichung (2 Promille), die ich infolge der guten Übereinstimmung meiner beiden Werte und da meine Reihen noch schneller konvergieren, als die Madelung'schen, für reell halten möchte.

Es sei übrigens darauf aufmerksam gemacht, daß die Ausführung der numerischen Berechnung für zwei verschiedene Übergangsstellen *eine wirksame Kontrolle* gegen alle Arten von Rechenfehlern (systematische und unsystematische) bildet. Ein Auslassen von Teilen der Summe (wie bei Hrn. Landés Flußspatrechnung) zeigt sich sofort in der Diskrepanz der beiden Werte, ebenso wie Fehler in der Bestimmung des Strukturfaktors. Eine analoge Kontrolle besteht beim Madelung'schen Verfahren darin, daß die Berechnung zweimal durchgeführt wird, indem das Gitter nach verschiedenen

Gittergeraden und -ebenen aufgelöst wird. Doch scheint mir die Rechenarbeit für die Kontrollrechnung bei meinem Verfahren wesentlich geringer zu sein, da man von den gleichen geschlossenen Formeln ausgeht wie für die erste Rechnung.

3. *Gitterenergie von Flußspat (CaF₂)*. Die Ionen Ca⁺⁺ und 2 · F⁻ bilden drei flächenzentrierte Gitter (Achsen a_i wie Fig. 3a).

$$r_{Ca} = 0, \quad r_{F_1} = + \frac{1}{4} (a_1 + a_2 + a_3), \quad r_{F_2} = - \frac{1}{4} (a_1 + a_2 + a_3).$$

Wir berechnen erst $\varphi_{Ca'}$, dann $\varphi_{F'}$, indem wir η so groß wählen, daß $\varphi^{(2)}$ vernachlässigt werden kann.

1. *Potential der Calciumionen* $\boxed{\varphi_{Ca'}}$.

Strukturfaktor:

$$S_{l, Ca} = \varepsilon \left(2 - e^{\frac{\pi i}{2} \sum l_i} - e^{-\frac{\pi i}{2} \sum l_i} \right) = 2\varepsilon \left(1 - \cos \frac{\pi}{2} \sum l_i \right),$$

$$= \begin{cases} 0 \\ 4\varepsilon \\ 2\varepsilon \end{cases} \text{ wenn } \sum l_i \equiv \begin{cases} 0 \\ 2 \\ \pm 1 \end{cases} \pmod{4}.$$

Als Länge δ wird, wie bei Steinsalz, die Würfelkante a gewählt. $V = \frac{1}{4} a^3$.

$$(42) \quad \begin{cases} \varphi_{Ca}^{(1)} = \frac{a^2 \varepsilon}{\pi V} \sum \left\{ \begin{matrix} 0 \\ 4 \\ 2 \end{matrix} \right\} \frac{e^{-\frac{\pi^2}{\eta^2} h_i^2 a^2}}{h_i^2 a^2} - \frac{2\varepsilon}{a} \cdot \frac{2\eta}{|\pi}, \\ \varphi_{Ca}^{(2)} = \frac{1}{a} \sum \varepsilon_i \frac{1 - \Phi\left(\eta \frac{R_{iit'}}{a}\right)}{R_{iit'} | a}. \end{cases}$$

Bestimmung von η : Der kleinste Abstand zweier Ionen liegt zwischen Ca und F-Ion, seine Länge: $\frac{1}{4} a \sqrt{3}$. Jedes Ca hat acht solche Nachbarn. Mit $\eta = 2\pi$ ist der größte Beitrag zu $\varphi_{Ca}^{(2)} \dots \frac{\varepsilon}{a} 8 \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} \left(1 - \Phi\left(\pi \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \right)$. Da $1 - \Phi\left(\pi \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \sim 0,0001$, ist dieser Beitrag etwa 0,0018 und kommt, wie der Gang der Rechnung zeigt, neben dem Gesamtwert von $\varphi_{Ca'}$ nicht in Betracht. Festsetzung: $\eta = 2\pi$.

Einführung neuer Summenzeiger in $\varphi_{Ca}^{(1)}$ (geometrisch: Beziehung des aus den b_i (Fig. 3b) gebildeten reziproken Gitters auf neue, orthogonale Achsen, algebraisch: Transformation der quadratischen Form h_i^2 in eine Summe von Quadraten).

Es ist

$$h_i = \sum_j l_j b_j$$

$$h_i^2 = \sum_j \sum_x l_i l_x (b_i b_x).$$

Fig. 3 b wird entnommen:

$$b_i^2 = \frac{3}{a^2}, \quad (b_1 b_2) = (b_1 b_3) = (b_2 b_3) = -\frac{1}{a^2}.$$

Hiermit

$$\begin{aligned} h_i^2 &= \frac{1}{a^2} \{3(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2) - 2l_1 l_2 - 2l_1 l_3 - 2l_2 l_3\}, \\ &= \frac{1}{a^2} \{(\sum l_i - 2l_1)^2 + (\sum l_i - 2l_2)^2 + (\sum l_i - 2l_3)^2\}, \\ &= \frac{1}{a^2} \{H_1^2 + H_2^2 + H_3^2\}. \end{aligned}$$

Die neuen ganzzahligen Zeiger

$$H_1 = \sum l_i - 2l_1; \quad H_2 = \sum l_i - 2l_2; \quad H_3 = \sum l_i - 2l_3$$

sind die Endpunktkoordinaten des Fahrstrahls h_i bezogen auf gewöhnliche kubische Achsen. Daß h_i ein körperzentriertes Gitter₂ durchläuft, zeigt sich darin, daß die H_i nur „ungemischte“ Wertetripel annehmen ($H_1 \equiv H_2 \equiv H_3 \equiv \sum l_i \pmod{2}$).

Strukturfaktor in H_i ausgedrückt: Da $\sum H_i = \sum l_i$ ist, folgt:

$$S_{H_i \text{ Ca}} = \begin{cases} 0 & \text{wenn } \sum H_i \equiv \begin{cases} 0 \\ 2 \end{cases} \pmod{4}. \\ 4\epsilon & \\ 2\epsilon & \\ \pm 1 & \end{cases}$$

Rechenformel für φ_{Ca} aus (42):

$$(42') \quad \varphi_{\text{Ca}} = \frac{\epsilon}{a} \frac{1}{\pi} \sum \left\{ \begin{matrix} 0 \\ 4 \\ 2 \end{matrix} \right\} \frac{e^{-\frac{1}{4} \sum H_i^2}}{\frac{1}{4} \sum H_i^2} - \frac{2\epsilon}{a} 4\sqrt{\pi}.$$

2. Potential der Fluorionen $\boxed{\varphi_{\text{F}}^{(1)}}$.

Strukturfaktor für Ionen F_1 und F_2 :

$$S_{l_i F_1} = -\epsilon \left(1 - 2e^{\frac{\pi i}{2} \sum l_i} + e^{\pi i \sum l_i} \right);$$

$$= e^{\frac{\pi i}{2} \sum l_i} \cdot S_{l_i \text{ Ca}}$$

$$= e^{\frac{\pi i}{2} \sum H_i} \cdot S_{H_i \text{ Ca}}$$

$$S_{l_i F_2} = -\epsilon \left(1 - 2e^{-\frac{\pi i}{2} \sum l_i} + e^{-\pi i \sum l_i} \right)$$

$$= e^{-\frac{\pi i}{2} \sum l_i} \cdot S_{l_i \text{ Ca}}$$

$$= e^{-\frac{\pi i}{2} \sum H_i} \cdot S_{H_i \text{ Ca}}.$$

Da $S_{H_i Ca}$ eine gerade Funktion von $\sum H_i$ ist, fällt der imaginäre Teil der Potentiale von selbst fort. Man erhält als *Rechenformel*:

$$(43) \quad \varphi_{F_{1,2}'} = \frac{1}{a} \frac{1}{\pi} \sum e^{\pm \frac{\pi i}{2} \sum H_i} S_{H_i Ca} \cdot \frac{e^{-\frac{1}{4} \sum H_i^2}}{\frac{1}{4} \sum H_i^2} + \frac{\varepsilon}{a} 4 \sqrt{\pi}.$$

3. *Gitterenergie pro Gitterkubus a^3* . Wir erhalten mit den ursprünglichen Achsen a_i für die im Volum a^3 enthaltene Energie gemäß (2):

$$A = \frac{1}{2} \{ 2\varepsilon \varphi_{Ca'} - \varepsilon \varphi_{F_1'} - \varepsilon \varphi_{F_2'} \}.$$

Die im Würfel von der Kante a enthaltene Energie ist viermal so groß, also

$$(44) \quad \left\{ \begin{aligned} 4A &= 2\varepsilon \{ 2\varphi_{Ca'} - \varphi_{F_1'} - \varphi_{F_2'} \}, \\ &= \frac{2\varepsilon^2}{a} \frac{1}{\pi} \sum \left\{ \begin{matrix} 0 \\ 4 \\ 2 \end{matrix} \right\} \left\{ 2 - e^{\frac{\pi i}{2} \sum H_i} - e^{-\frac{\pi i}{2} \sum H_i} \right\} \\ &\quad \cdot \frac{e^{-\frac{1}{4} \sum H_i^2}}{\frac{1}{4} \sum H_i^2} - \frac{\varepsilon^2}{a} 48 \sqrt{\pi}. \end{aligned} \right.$$

Der aus den beiden ersten Faktoren zusammengesetzte Strukturfaktor hat folgende Werte:

$$(44') \quad S = \left\{ \begin{matrix} 0 \\ 4 \\ 2 \end{matrix} \right\} \left\{ 2 - 2 \cos \frac{\pi}{2} \sum H_i \right\} = \begin{cases} 0 \\ 16 \\ 4 \end{cases} \text{ wenn } \sum H_i \equiv \begin{matrix} 0 \\ \pm 1 \\ \pm 2 \end{matrix} \pmod{4}.$$

Nach dieser Formel erfolgt die *numerische Berechnung* (vgl. Tabelle auf folgender Seite):

Der numerische Faktor steht in guter Übereinstimmung (1 Proz.) mit dem von Frh. Bormann berechneten: 46,93.

Das Beispiel des Flußspatgitters zeigt besser als das des besonders einfachen Steinsalzgitters wie die Methode bei Kristallen mit verwickelter Struktur anzuwenden ist. Man behält die allgemeinen Formeln möglichst lange bei, indem man sie auf den besonderen Fall bezieht und gestaltet dadurch die numerische Rechnung kurz und gedrungen. Es scheint mir gegenüber der Madelung'schen Methode ein Vorzug zu sein, daß die Ermittlung der einzelnen Geraden- und Ebenenlagen und -abstände fortfällt. Notwendig ist nur die Kenntnis des kleinsten vorkommenden Atomabstandes, um danach die Tren-

H_i	$\sum H_i^2$	$\frac{1}{4} \sum H_i^2$	S-Anzahl	$e^{-\text{Argum.}}$	$e^{-\text{Arg.}} \frac{\text{S-Anzahl}}{\text{Argum.}}$
002	4	1	16·6	0,36788	35,317
004	16	4	0		
006	36 ←	9	16·(6 + 24)	0,000123	0,007
022	8	2	0		
024	20	5	16·24	0,006738	0,517
026	40	10	0		
044	32	8	0		
222	12	3	16·8	0,049787	2,125
224	24	6	0		
226	44	11	16·24		
244	36 ←				
444	48	12	0		37,966
111	3	0,75	4·8	0,47237	20,154
113	11	2,75	4·24	0,063928	2,234
115	27 ←	6,75	4·(24 + 8)	0,001171	0,022
133	19	4,75	4·24	0,008652	0,175
135	35	8,75	4·48	0,000158	0,003
155	51	—			
333	27 ←				
355	43	10,75	4·24	—	22,588

$$4A = \frac{\varepsilon^2}{a} \left\{ \frac{2}{\pi} (37,966 + 22,588) - 48 \sqrt{\pi} \right\} = \frac{\varepsilon^2}{a} \left\{ 38,55 - 85,08 \right\} = - \frac{\varepsilon^2}{a} \cdot 46,53.$$

nungsstelle bemessen zu können. Im übrigen werden nur die Koordinaten der Basisgruppe selbst benutzt, also unmittelbar gegebene Größen. Drücken sich die Atomabstände der Basisgruppe rational durch die Gitterkanten aus, so nimmt der Strukturfaktor eine beschränkte Reihe einfacher Werte an, wie in den beiden obigen Beispielen. Ob bei irrationaler Anlage der Basisgruppe die Schwierigkeiten bei meiner oder der Madelung'schen Methode geringer sind, kann nur der weitere Gebrauch der Methode lehren.

Anhang.

Berechnung des Integrals (27) $\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^E e^{-R^2 \varepsilon^2 + \frac{K^2}{4\varepsilon^2}} d\varepsilon.$

Unter E sei eine reelle Trennungsstelle, unter K gemäß der Konvergenzbetrachtung in III, 1 eine komplexe Größe verstanden, die in der

komplexen Ebene den Winkel φ mit der reellen Achse einschließt. Der Integrationsweg ist der in Fig. 1 beschriebene. Der Wert des $\int_{(0)}^{\infty}$ ist bekannt, wir berechnen statt (27) lieber

$$(I) \quad J = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_E^{\infty} e^{-R^2 \varepsilon^2 + \frac{K^2}{4\varepsilon^2}} d\varepsilon,$$

wobei die Integration auf der reellen Achse zu führen ist. Indem wir die Variable

$$\begin{aligned} \eta &= R\varepsilon + i\frac{K}{2\varepsilon}, & \varepsilon &= \frac{\eta}{2R} \pm \sqrt{\frac{\eta^2}{4R^2} - \frac{iK}{2R}}, \\ d\varepsilon &= \frac{1}{2R} \left(1 \pm \frac{\eta}{\sqrt{\eta^2 - 2iKR}} \right) d\eta, \end{aligned}$$

einführen, wird

$$J = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{iKR} \int_E^{\infty} e^{-\left(R\varepsilon + \frac{iK}{2\varepsilon}\right)^2} d\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{iKR}}{R} \int_{\left(RE + \frac{iK}{2E}\right)}^{\infty} e^{-\eta^2} \left(d\eta \pm \frac{\eta d\eta}{\sqrt{\eta^2 - 2iKR}} \right).$$

Wir führen das Gauss'sche Fehlerintegral ein:

$$\int_0^x e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Phi(x) = \left(x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{10} - \dots \right), \quad \Phi(\infty) = 1,$$

bemerken, daß die zweite Integration der vorigen Gleichung sich auch darauf reduziert, indem gesetzt wird:

$$\eta^2 - 2iKR = \zeta^2,$$

wobei die Grenzen werden

$$\zeta = \pm \left\{ \left(RE - \frac{iK}{2E} \right) \right\}$$

und erhalten

$$(II) \quad J = \frac{e^{iKR}}{2R} \left\{ 1 - \Phi \left(RE + \frac{iK}{2E} \right) \right\} \pm \frac{e^{-iKR}}{2R} \left\{ 1 - \Phi \left(RE - \frac{iK}{2E} \right) \right\}.$$

Hierbei wurde für beide Grenzen von ζ das Vorzeichen + gewählt, was wegen des \pm vor dem Integral keine Beschränkung bedeutet.

Um das Vorzeichen zu bestimmen, vergleichen wir die Entwicklungen von (I) und (II) für kleines K . Nach der ersteren ist

$$\begin{aligned} J &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_E^{\infty} e^{-R^2 \varepsilon^2} \left(1 + \frac{K^2}{4\varepsilon^2} + \dots \right) d\varepsilon = \frac{1}{R} \left\{ 1 - \Phi(RE) \right\} \\ &\quad + \frac{K^2}{2\sqrt{\pi}} \left\{ \frac{e^{-R^2 E^2}}{E} - \sqrt{\pi} R (1 - \Phi(RE)) \right\} \end{aligned}$$

da nämlich

$$\int_E^\infty -e^{-K^2 \varepsilon^2} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon^3} = \left[-\frac{1}{\varepsilon} e^{-K^2 \varepsilon^2} \right]_E^\infty - 2 R^2 \int_E^\infty e^{-K^2 \varepsilon^2} d\varepsilon$$

$$= \frac{e^{-K^2 E^2}}{E} - \sqrt{\pi} R (1 - \Phi(R E))$$

ist.

Bei der Entwicklung von (II) ist zu beachten, daß nach Taylor gilt

$$\Phi \left(R E + \frac{i K}{2 E} \right) = \Phi(R E) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-K^2 E^2} \frac{i K}{2 E}$$

$$- \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot 2 R E \cdot e^{-R^2 E^2} \frac{1}{2!} \left(\frac{i K}{2 E} \right)^2 + \dots$$

Also wird aus (II)

$$J = \frac{1}{2 R} \left[e^{i K R} \left\{ 1 - \Phi(R E) - \frac{i K}{\sqrt{\pi} E} e^{-K^2 E^2} - \frac{K^2 R}{2 \sqrt{\pi} E} e^{-R^2 E^2} + \dots \right\} \right.$$

$$\left. \pm e^{-i K R} \left\{ \dots \right\} \right].$$

Das Glied mit dem unbestimmtem Vorzeichen ist eine Wiederholung des ersten nach Abänderung von $+K$ in $-K$. Indem wir noch $e^{i K R}$ nach K entwickelt denken, suchen wir die von K freien Glieder heraus:

$$\frac{1}{2 R} \left[1 - \Phi(K E) \pm (1 - \Phi(R E)) \right]$$

und bestimmen danach das Vorzeichen zu $+$.

Es ist demnach

$$(III) J = \frac{\cos K R}{R} - \frac{1}{2 R} \left\{ e^{i K R} \Phi \left(R E + \frac{i K}{2 E} \right) + e^{-i K R} \Phi \left(R E - \frac{i K}{2 E} \right) \right\}$$

und das gesuchte Integral (27)

$$(IV) \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^E e^{-K^2 \varepsilon^2 + \frac{K^2}{4 \varepsilon^2}} d\varepsilon = i \frac{\sin K R}{R} + \frac{1}{2 R} \left\{ e^{i K R} \Phi \left(R E + \frac{i K}{2 E} \right) \right. \right.$$

$$\left. \left. + e^{-i K R} \Phi \left(R E - \frac{i K}{2 E} \right) \right\} \right\}.$$

Zusammenfassung.

Optische (elektrodynamische) und elektrostatische Potentiale für Kristallgitter sind zunächst gegeben als Summen von

Einzelpotentialen, z. B. $\sum_{P'} \frac{e_{P'}}{R_{PP'}}$ ($e_{P'}$ Ladung, $R_{PP'}$ Abstand

des Gitterpunktes P' vom Aufpunkt P) (I). Man kann durch eine Integraldarstellung des Einzelpotentials (III, 2) $R_{PP'}^2$ in den Exponenten einer e -Funktion bringen und erhält durch Ausführung der Summe eine \mathcal{F} -Funktion von drei Variablen als

Integranden (III, 2). Für diese wird die Transformationsformel aufgestellt (II). Durch Anwendung der Transformation auf den Integranden gelangt man von der „d'Alembertschen“ zur „Fourierschen“ Darstellung des Potentials (III, 2), wenn auf dem ganzen Integrationsweg die transformierte \mathcal{F} -Funktion benutzt wird. Für die Konvergenz der Reihen ist es vorteilhaft, auf einem Teil des Integrationsweges die eine, auf dem andern Teil die andere Darstellung der \mathcal{F} -Funktion zu verwenden, unter Einführung einer Trennungsstelle E (bzw. dimensionslos η) (III, 2; IV, 1). Es wird ein allgemeiner gut konvergierender Ausdruck der elektrodynamischen Potentiale aufgestellt, der sich zur numerischen Rechnung eignet.

Spezialisierung dieses Ausdrucks auf elektrostatische Potentiale (IV, 1), ihre allgemeine Form. Beispielsweise Berechnung der Gitterenergie infolge der Coulombschen Kräfte zwischen den Ionen (Madelungsche Konstante) bei Steinsalz und Flußspat (IV, 2 u. 3).

München, Institut f. theor. Physik, August 1920.

(Eingegangen 7. August 1920.)