

MAGNETISCHE KRACHTEN  
IN EEN KRISTAL VAN HET  
KLIPZOUTTYPE

DOOR

JOH. BOUMAN

DIBLIJOTHEEK  
GORLAEUS LABORATORIA

Postbus 9502  
2300 RA LEIDEN  
Tel.: 071 - 527 43 66 / 67

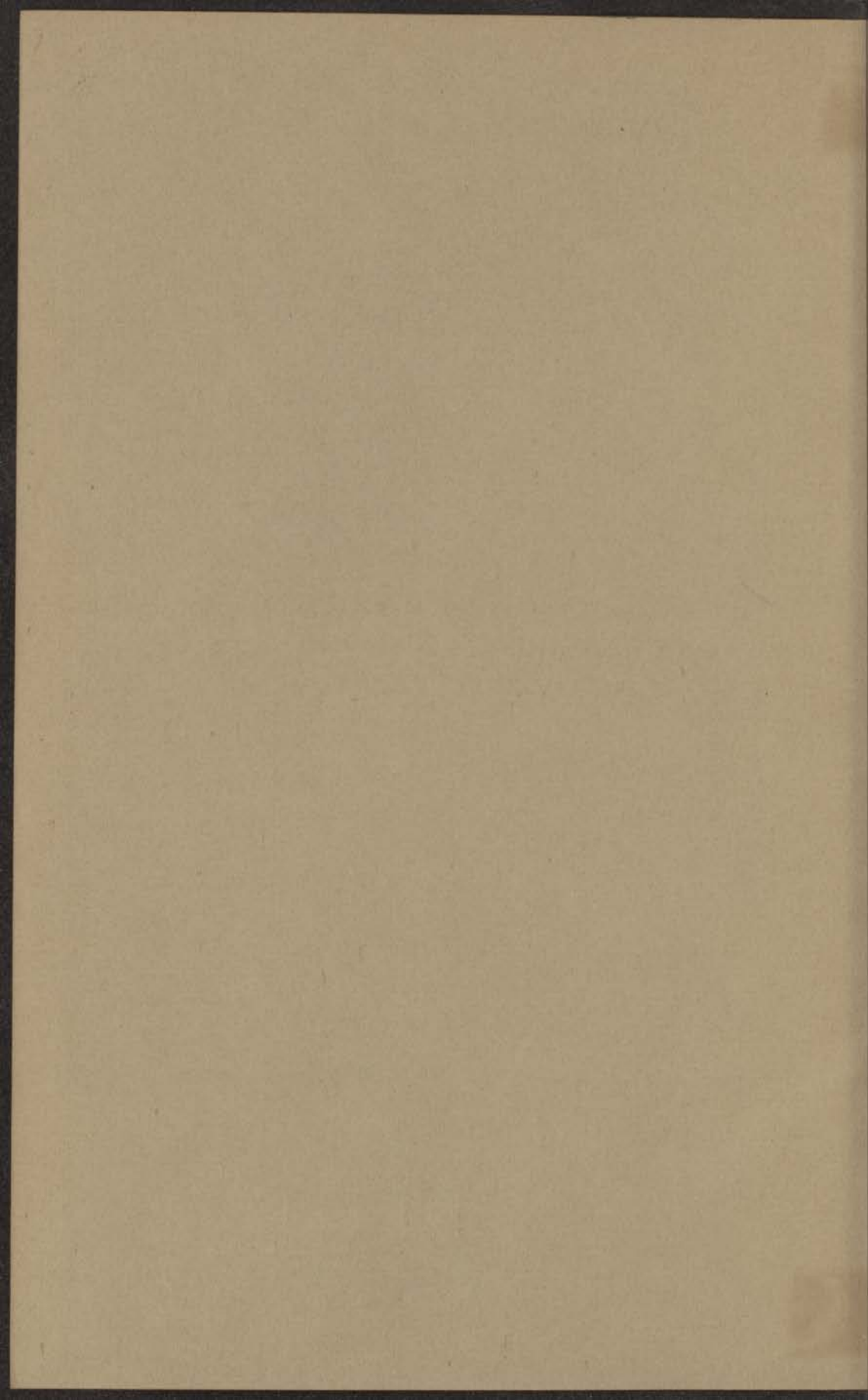
Universiteit Leiden



1 393 748 2



kast dissertatus



MAGNETISCHE KRACHTEN  
IN EEN KRISTAL VAN HET  
KLIPZOUTTYPE

**MAGNETISCHE KRACHTEN  
IN EEN KRISTAL VAN HET  
KLIPZOUTTYPE**



1911

MAGNETISCHE KRÄFTEN  
IN EIN KRYSTAL VON ZIN  
KALPHOUTYNE

Boscher

# MAGNETISCHE KRACHTEN IN EEN KRISTAL VAN HET KLIPZOUTTYPE

PROEFSCHRIFT TER VERKRIJGING VAN DEN  
GRAAD VAN DOCTOR IN DE WIS- EN NATUUR-  
KUNDE AAN DE RIJKSUNIVERSITEIT TE LEI-  
DEN, OP GEZAG VAN DEN RECTOR MAGNIFICUS  
JHR. MR. W. J. M. v. EYSINGA, HOOGLEERAAR IN  
DE FACULTEIT DER RECHTSGELEERDHEID,  
VOOR DE FACULTEIT DER WIS- EN NATUUR-  
KUNDE TE VERDEDIGEN OP VRIJDAG 23 NO-  
VEMBER 1928, DES NAMIDDAGS TE 4 UUR

DOOR

**JOHANNES BOUMAN**  
GEBOREN TE ROTTERDAM



H. J. PARIS  
AMSTERDAM MCMXXVIII

MAGNETISCHE KRACHTEN  
IN EEN KRISTAL VAN HET  
KILPZOUTTYPE

VERVOLG VAN DE VERHANDLINGEN VAN DE  
ACADEMIE VAN WETENSCHAPPEN EN LETTEREN  
VAN AMSTERDAM, DEEL 11, PAG. 1-10  
1881



W. J. VAN DER WOUDE  
AMSTERDAM



Bij het voleindigen van mijn proefschrift is het mij een behoefte, mijn dank uit te spreken jegens allen, die tot mijn wetenschappelijke vorming hebben bijgedragen. In de eerste plaats geldt dit U, Hooggeleerde FOKKER, hooggeachte promotor. De belangstelling, die U in mijn werk hebt getoond, Uw aanmoediging zijn voor mij van onschatbare waarde geweest. Ik dank U voor de groote bereidwilligheid, waarmee U mij steeds met raad en daad terzijde hebt gestaan, en die de jaren, in Delft doorgebracht, tot een zeer vruchtbaren studietijd heeft gemaakt.

Verder dank ik U, Hooggeleerde EHRENFEST, voor wat ik op Uw colleges en colloquium heb geleerd, en voor de mogelijkheid, welke U mij hebt geboden, als Uw assistent mijn studietijd te verlengen.

Uw colleges, Hooggeleerde KLUYVER, Hooggeleerde VAN DER WOUDE, Zeergeleerde DROSTE, hebben er veel toe bijgedragen, mijn belangstelling in de wiskunde aan te wakkeren.

Ik betreur het, niet meer mijn dank te kunnen uitspreken, voor wat ik van Professor LORENTZ en Professor KUENEN heb mogen leeren.

Ten slotte wil ik mijn vriend, Dr W. F. DE JONG danken voor de waarde, die onze omgang voor mij heeft gehad.

Die vorliegende Arbeit ist ein Auszug aus dem Buch "Die Geschichte der Naturwissenschaften in Deutschland" von Dr. W. F. Schlegel, Berlin 1858. Die Arbeit ist in drei Teile gegliedert: I. Die Naturwissenschaften im Mittelalter, II. Die Naturwissenschaften in der Renaissance, III. Die Naturwissenschaften in der Neuzeit. Die Arbeit ist in drei Bänden erschienen. Der erste Band enthält die Geschichte der Naturwissenschaften im Mittelalter, der zweite Band die Geschichte der Naturwissenschaften in der Renaissance, der dritte Band die Geschichte der Naturwissenschaften in der Neuzeit. Die Arbeit ist in drei Bänden erschienen. Der erste Band enthält die Geschichte der Naturwissenschaften im Mittelalter, der zweite Band die Geschichte der Naturwissenschaften in der Renaissance, der dritte Band die Geschichte der Naturwissenschaften in der Neuzeit.

Die vorliegende Arbeit ist ein Auszug aus dem Buch "Die Geschichte der Naturwissenschaften in Deutschland" von Dr. W. F. Schlegel, Berlin 1858. Die Arbeit ist in drei Teile gegliedert: I. Die Naturwissenschaften im Mittelalter, II. Die Naturwissenschaften in der Renaissance, III. Die Naturwissenschaften in der Neuzeit. Die Arbeit ist in drei Bänden erschienen. Der erste Band enthält die Geschichte der Naturwissenschaften im Mittelalter, der zweite Band die Geschichte der Naturwissenschaften in der Renaissance, der dritte Band die Geschichte der Naturwissenschaften in der Neuzeit.

Die vorliegende Arbeit ist ein Auszug aus dem Buch "Die Geschichte der Naturwissenschaften in Deutschland" von Dr. W. F. Schlegel, Berlin 1858. Die Arbeit ist in drei Teile gegliedert: I. Die Naturwissenschaften im Mittelalter, II. Die Naturwissenschaften in der Renaissance, III. Die Naturwissenschaften in der Neuzeit. Die Arbeit ist in drei Bänden erschienen. Der erste Band enthält die Geschichte der Naturwissenschaften im Mittelalter, der zweite Band die Geschichte der Naturwissenschaften in der Renaissance, der dritte Band die Geschichte der Naturwissenschaften in der Neuzeit.

Die vorliegende Arbeit ist ein Auszug aus dem Buch "Die Geschichte der Naturwissenschaften in Deutschland" von Dr. W. F. Schlegel, Berlin 1858. Die Arbeit ist in drei Teile gegliedert: I. Die Naturwissenschaften im Mittelalter, II. Die Naturwissenschaften in der Renaissance, III. Die Naturwissenschaften in der Neuzeit. Die Arbeit ist in drei Bänden erschienen. Der erste Band enthält die Geschichte der Naturwissenschaften im Mittelalter, der zweite Band die Geschichte der Naturwissenschaften in der Renaissance, der dritte Band die Geschichte der Naturwissenschaften in der Neuzeit.

Die vorliegende Arbeit ist ein Auszug aus dem Buch "Die Geschichte der Naturwissenschaften in Deutschland" von Dr. W. F. Schlegel, Berlin 1858. Die Arbeit ist in drei Teile gegliedert: I. Die Naturwissenschaften im Mittelalter, II. Die Naturwissenschaften in der Renaissance, III. Die Naturwissenschaften in der Neuzeit. Die Arbeit ist in drei Bänden erschienen. Der erste Band enthält die Geschichte der Naturwissenschaften im Mittelalter, der zweite Band die Geschichte der Naturwissenschaften in der Renaissance, der dritte Band die Geschichte der Naturwissenschaften in der Neuzeit.

## STELLINGEN

### I

Ten onrechte noemt LOUIS DE BROGLIE de massa een karakteristiek van de stof.

Ondes et Mouvements, pag. 2.

### II

LEWIS en TOLMAN komen slechts tot een schijnbare overeenstemming van hun onjuiste krachtstransformatie met de uitkomsten der electronentheorie.

Phil Mag XVIII (1909), pag. 521.

### III

In bovenstaande verhandeling nemen LEWIS en TOLMAN ten onrechte onbewezen aan, dat twee waarnemers, die zich ten opzichte van elkaar bewegen, aan een afstand, loodrecht op de snelheid, de zelfde lengte toekennen.

### IV

De stelling van LARMOR is geen integratie, maar een transformatie van de bewegingsvergelijkingen.

### V

De bewegingsvergelijkingen voor een stelsel geladen deeltjes, in dit proefschrift afgeleid, kunnen worden beschreven door

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \iiint \frac{1}{8\pi} (\mathfrak{d}^2 - \mathfrak{h}^2) d\tau dt = 0,$$

indien men de coördinaten der deeltjes als onafhankelijke veranderlijken neemt, en de variaties van coördinaten en snelheden aan de grenzen van het tijdsinterval nul stelt.

Vgl. dit proefschrift, pag. 7.

## VI

RICHARDSON beschouwt ten onrechte de beweging van een deeltje, dat onder invloed van een centrale kracht, die omgekeerd evenredig is met de derde macht van den afstand, in een cirkel rondloopt, als uitzondering op den regel, dat het aanbrengen van een magneetveld het baanoppervlak niet verandert.

Electron Theory of Matter 1916. pag. 370.

## VII

Bij de afleiding van de energie van een golf in een dispergeerend medium, formuleert LÉON BRILLOUIN het verband tusschen de gemiddelden van de kwadraten van de elektrische en magnetische veldsterkten onjuist.

La Theorie des Quanta et l'Atome  
de Bohr 1922, pag. 175.

## VIII

Ten onrechte citeert W. HEISENBERG bij de opgave van de wederzijdsche energie van twee roteerende electronen en een kern de verhandeling van THOMAS over de praecessie van die electronen.

HEISENBERG, Ztschr. f. Physik 39, pag. 192.

THOMAS, Nature 117 (1926), pag. 514.

## IX

Een cirkelvormige schijf met symmetrische massaverdeeling wordt aan den omtrek in haar symmetrielijne zoo opgehangen, dat zij in haar eigen vlak draaibaar is. Haar slingertijd hangt niet af van de massaverdeeling, wanneer deze op elken voerstraal van uit het ophangpunt constant is.

## 3

## X

Het verdient dikwijls aanbeveling, bij berekeningen over kristallen de methoden der absolute tensorrekening toe te passen, bijvoorbeeld bij de transformatie der drievoudige  $\theta$ -functies.

M. BORN. Enc. der Math. Wiss. V, 25, pag. 725.

## XI

J. H. DE BOER verwaarloost ten onrechte den invloed van de onder de eerste atoomlaag gelegen deeltjes bij de berekening van de adsorbtie van jodiumatomen op fluorietkristallen.

Physica 1928, pag. 145.

## XII

Het verdient aanbeveling, bijv. door etsproeven, te toetsen, of kristallen van  $FeO$ ,  $NiO$ ,  $CoO$ , welke haliestructuur hebben, lagere dan holoedrische symmetrie bezitten.

Vgl. dit proefschrift, pag. 47 (noot).

## XIII

Hoewel nadere bevestiging door waarnemingen van dichter bij den zonsrand staande sterren gewenscht blijft, mag men door de resultaten van de zoneclips-expedities van PRINCIPE en SOBRAL (29 Mei 1919) en van WALLAL (21 Sept. 1922) EINSTEINS formule voor de buiging van lichtstralen in een gravitatieveld bevestigd achten.

## XIV

De praktijk van vele elementaire leerboeken, die de omkeering der natriumlijn als gevolg van de wet van KIRCHHOFF voorstellen, verdient geen aanbeveling.

## XV

Het is gewenscht, het natuurkunde-onderwijs in de 5de klas van het gymnasium voor A- en B-leerlingen te splitsen.

the first of these is the fact that the  
the second is the fact that the  
the third is the fact that the  
the fourth is the fact that the

VI

the fifth is the fact that the  
the sixth is the fact that the  
the seventh is the fact that the  
the eighth is the fact that the

VII

the ninth is the fact that the  
the tenth is the fact that the  
the eleventh is the fact that the  
the twelfth is the fact that the

VIII

the thirteenth is the fact that the  
the fourteenth is the fact that the  
the fifteenth is the fact that the  
the sixteenth is the fact that the  
the seventeenth is the fact that the  
the eighteenth is the fact that the

IX

the nineteenth is the fact that the  
the twentieth is the fact that the  
the twenty-first is the fact that the  
the twenty-second is the fact that the

the twenty-third is the fact that the  
the twenty-fourth is the fact that the  
the twenty-fifth is the fact that the  
the twenty-sixth is the fact that the  
the twenty-seventh is the fact that the  
the twenty-eighth is the fact that the  
the twenty-ninth is the fact that the  
the thirtieth is the fact that the

## INHOUD

	Blz.
INLEIDING . . . . .	I
I — MAGNETISCHE EIGENSCHAPPEN VAN ATOMEN . . . . .	3
§ 1. De bewegingsvergelijkingen voor electronen — § 2. Bewe- gingsvergelijkingen voor een stelsel electronen — § 3. Algemeene stellingen — § 4. Beschouwing van een atoom — § 5. Wisselwer- king van twee atomen. Onderstellingen — § 6. Kracht en koppel, op een atoom werkende — § 7. Gemiddelde waarden voor kracht en koppel — § 8. De stelling van Larmor — § 9. De momenten- stelling voor twee atomen — § 10. De energiestelling voor twee atomen — § 11. Slotbeschouwingen.	
II — DE SYMMETRIE VAN HET KRISTALROOSTER. . . . .	38
§ 1. Het klipzout rooster — § 2. Translaties van het rooster. — § 3. Drietallige assen van het rooster — § 4. Symmetrievlakken en symmetriecentrum — § 5. De magnetische veldsterkte — § 6. Het invoegen van het chloorrooster — § 7. Uitbreiding.	
III — DE BEREKENING VAN DE MAGNETISCHE VELDSTERKTE	49
§ 1. De algemeene formules — § 2. Symmetrie-beschouwingen — § 3. De formeele uitdrukkingen voor de veldsterkten — § 4. Conver- gentie-beschouwingen — § 5. De methode van Ewald — § 6. Uitdrukkingen voor de functie $\Pi$ en haar afgeleiden — § 7. De uitdrukkingen voor de veldsterkten — § 8. Eigenschappen van de veldsterkten — § 9. De numerieke uitkomsten.	
III A — AANHANGSEL . . . . .	73
§ 1. De stelling van Riemann — § 2. Toepassingen — § 3. De functie $\Pi$ — § 4. Andere uitdrukkingen voor $\Pi$ — § 5. De uitdruk- kingen $A_0, B_0 \dots F_0$ — § 6. Conclusies.	
IV — DE MOGELIJKE RANGSCHIKKINGEN VAN DE MAGNETI- SCHE DIPOLEN . . . . .	91
§ 1. Het statisch model — § 2. Het dynamisch model — § 3. De beweging van een atoom in een roteerend magnetisch veld — § 4. De mogelijke dynamische modellen — § 5. Resumé en slotbe- schouwing.	

# INHOUD

14	<p style="text-align: center;">I. — <b>MECHANISME ENDRINGSKUNDE VAN STROOMEN</b></p> <p>§ 1. De begripsproblemen van stroomen — § 2. Het mechanisme van de geluidskanalen — § 3. Het mechanisme van de vloeistofkanalen — § 4. Het mechanisme van de gaskanalen — § 5. Het mechanisme van de bloedkanalen — § 6. Het mechanisme van de zenuwkanalen — § 7. Het mechanisme van de vaatkanalen — § 8. Het mechanisme van de ademhalingskanalen — § 9. Het mechanisme van de spijsverteringskanalen — § 10. Het mechanisme van de urinewegkanalen — § 11. Het mechanisme van de afvoerkanaalen.</p>
15	<p style="text-align: center;">II. — <b>DE WERKWIJZE VAN HET KUNSTWERK</b></p> <p>§ 1. Het kunstwerk — § 2. De werkwijze van het kunstwerk — § 3. Het kunstwerk van het kunstwerk — § 4. Het kunstwerk van het kunstwerk — § 5. Het kunstwerk van het kunstwerk.</p>
16	<p style="text-align: center;">III. — <b>DE WERKWIJZE VAN DE KUNSTWERK ENDRINGSKUNDE</b></p> <p>§ 1. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 2. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 3. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 4. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 5. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 6. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 7. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 8. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 9. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 10. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 11. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 12. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde.</p>
17	<p style="text-align: center;">IV. — <b>ADRESSEN</b></p> <p>§ 1. De adressen van de kunstwerkdrengkunde — § 2. De adressen van de kunstwerkdrengkunde — § 3. De adressen van de kunstwerkdrengkunde — § 4. De adressen van de kunstwerkdrengkunde — § 5. De adressen van de kunstwerkdrengkunde — § 6. De adressen van de kunstwerkdrengkunde — § 7. De adressen van de kunstwerkdrengkunde — § 8. De adressen van de kunstwerkdrengkunde — § 9. De adressen van de kunstwerkdrengkunde — § 10. De adressen van de kunstwerkdrengkunde — § 11. De adressen van de kunstwerkdrengkunde — § 12. De adressen van de kunstwerkdrengkunde.</p>
18	<p style="text-align: center;">V. — <b>DE WERKWIJZE VAN DE KUNSTWERK ENDRINGSKUNDE VAN DE ZIEKTE</b></p> <p>§ 1. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 2. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 3. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 4. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 5. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 6. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 7. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 8. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 9. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 10. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 11. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde — § 12. De werkwijze van de kunstwerkdrengkunde.</p>



## INLEIDING

De ontwikkeling der electronentheorie en het bekend worden der structuur der kristallen hebben er toe geleid, dat men de verschillende eigenschappen van kristallen met behulp van deze theorieën heeft trachten af te leiden. Inderdaad hebben BORN, EWALD<sup>1)</sup> e.a. vele eigenschappen, elastische, thermische, optische verschijnselen op deze wijze verklaard. Hierbij werd echter aangenomen, dat de verschillende partikels: electronen, atomen, elkaar met een kracht, die slechts een functie van hun afstand is, en langs hun verbindingslijn gericht is, aantrekken.

De aard van deze kracht wordt in dit verband niet nader bepaald. Of, men schematiseert nog verder, en laat elk deeltje door een quasi-elastische kracht aan zijn evenwichtsstand gebonden zijn.

Van het electromagnetische veld, dat deze deeltjes veroorzaken, wordt slechts dan gesproken, wanneer ze, door uitwendige krachten, gedwongen trillingen uitvoeren, en dit veld wordt alleen op grooten afstand van het electron beschouwd, d.i. men beziet slechts het stralingsveld.<sup>2)</sup>

Aan den anderen kant is de electromagnetische verklaring van deze „quasi-elastische” bindingskrachten, om ze zoo maar in het kort te noemen, veel minder ver gevorderd. Hiervoor zou dan noodig zijn een juiste kennis van den bouw der atomen, die het kristal samenstellen, en van de wetten, die de beweging der deeltjes in het atoom regelen. Zooals echter bekend is, schieten juist hier de wetten der klassieke electronentheorie te kort. Men is in elk geval gedwongen van het stralingsveld, dat de zich in het atoom vrij bewegende electronen veroorzaken, af te zien, omdat anders de banen niet stationnair zijn. Men past dus de klassieke electronentheorie op twee manieren toe: Bij de inwerking van een uitwendig periodiek veld kan men de verschijnselen electromagnetisch verklaren door het stralingsveld van trillende electronen te beschouwen, bij de (in ruimeren zin) periodieke bewegingen, die in het atoom plaats vinden, moet men van het stralingsveld afzien.

Een andere moeilijkheid ligt hierin. De krachten, die de verschillende deelen op elkaar uitoefenen, zijn in hoofdzaak electrostatisch. De invloed van de beweging der electronen op de kracht waarmee ze elkaar aantrekken, is te verwaarloozen. Nu kan echter een systeem van lichamen, waartusschen slechts electro-

statische krachten werken, nooit in stabiel evenwicht zijn (Theorema van EARNSHAW). Een rooster, als dat van het klip- of keukenzout, dat uit geladen ionen is opgebouwd, is dus niet stabiel.

Met het oog hierop kan het van belang zijn, iets te weten te komen van de krachten tusschen de atomen, die wél van de beweging der electronen afhangen, aangenomen, dat de atomen een resulterend magnetisch moment bezitten. Hierbij aansluitend doet zich dan de vraag voor, welke configuraties van deze magnetische momenten dan wel in het kristal mogelijk zijn.

Het is nu juist dit laatste probleem, dat in de volgende bladzijden voor een zeer eenvoudig geval is beschouwd. Ik heb daartoe het reeds genoemde klipzoutrooster gekozen.

Zooals bekend is, bestaat de cel van dit rooster uit een cubus, waarvan de hoekpunten en de middens der vlakken door natriumionen zijn ingenomen, de middens der ribben en het middelpunt van den cubus door chloorionen. Wij hebben beiden ionensoorten hetzelfde magnetische moment  $\mu$  toegeschreven. Het staat niet vast, of de natrium- en chloorionen werkelijk een magnetisch moment bezitten; met de namen chloor- en natriumionen wil ik slechts de twee ionen- of atoomsoorten onderscheiden, zonder speciaal aan het keukenzout te denken.

De gang van het onderzoek is nu als volgt: In het *eerste hoofdstuk* heb ik getracht, mij rekenschap te geven van de verschillende eigenschappen van atomen met magnetische momenten, en deze in een zooveel mogelijk geordend verband samen te voegen. Daarbij heb ik mij op het standpunt gesteld van het atoommodel van BOHR-RUTHERFORD en van de klassieke electronentheorie, met de hierboven reeds vermelde restrictie, dat van het stralingsveld wordt afgezien.

Vervolgens is in het *tweede hoofdstuk* onderzocht welke configuraties van de magnetische momenten door de symmetrie van het rooster worden toegestaan.

Het *derde hoofdstuk* bevat de berekening van de veldsterkte, door het rooster van magnetische atomen veroorzaakt.

In het *vierde hoofdstuk* vloeien de drie genoemde onderzoekingen samen in de opstelling van de configuraties, die bij de gegeven magnetische krachten, in het kristal werkelijk bestaanbaar zijn.

## HOOFDSTUK I

### MAGNETISCHE EIGENSCHAPPEN VAN ATOMEN

Wij willen beginnen, de eigenschappen na te gaan, die een atoom bezit, wanneer het een magnetisch veld veroorzaakt, en deze eigenschappen in een geordend verband brengen. Met het oog op ons eigenlijk onderwerp interesseert ons voornamelijk de invloed, die een magnetisch atoom van een veld ondervindt, door andere atomen teweeggebracht, in het bijzonder de stelling van LARMOR. Ons bewijs zal afwijken van de gebruikelijke <sup>3)</sup>, <sup>4)</sup>, daarbij zullen wij speciale aandacht wijden aan de vraag, in welke gevallen de toepassing van het theorema geoorloofd is. Wij zullen echter ons onderzoek verder uitstrekken, dan voor het volgende strikt noodig is.

Als uitgangspunt kiezen wij de grondvergelijkingen van de electronentheorie. Voor het atoom nemen wij het model van RUTHERFORD-BOHR aan, waarin een positief geladen kern in hoofdzaak de massa van het atoom draagt, en zich een of meer negatieve electronen om de kern bewegen. Tijdens de gang van de berekening zullen wij nog eenige eenvoudige hypothesen over het atoom maken.

Eerst zullen echter eenige algemeene formules worden afgeleid, die voor een systeem van electriche ladingen gelden. Daarna zullen wij deze uitkomsten specialiseeren voor één atoom, voor een atoom onder invloed van een uitwendig veld, en voor twee atomen.

§ 1 — *De bewegingsvergelijkingen voor electronen.* Wanneer een electron zich in een electromagnetisch veld bevindt, dat bepaald

wordt door de potentialen  $\phi$  en  $\mathbf{a}$ , dan is de kracht, die dat veld op het electron uitoefent

$$\mathbf{k} = e \left( \mathbf{d} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{h}] \right).$$

De veldsterkten  $\mathbf{d}$  en  $\mathbf{h}$  worden gevonden uit de potentialen.

$$\mathbf{d} = -\text{grad } \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t},$$

$$\mathbf{h} = \text{curl } \mathbf{a}.$$

Voert men dit in de formule voor  $\mathbf{k}$  in, en bovendien, met behulp van

$$\frac{d\mathbf{a}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} + v_x \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x} + v_y \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial y} + v_z \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial z},$$

$d\mathbf{a}/dt$ , de verandering van  $\mathbf{a}$ , van uit het bewegende electron beoordeeld, dan volgt, na een korte berekening;

$$\mathbf{k} = e \left( -\frac{1}{c} \frac{d\mathbf{a}}{dt} + \text{grad } \frac{1}{c} (\mathbf{v} \mathbf{a}) - \text{grad } \phi \right), \quad (1)$$

Aan den anderen kant wordt de beweging van het electron bepaald door:

$$\mathbf{k} = \frac{d}{dt} \left\{ \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right\},$$

zoodat de vergelijking (nu in componenten geschreven) is

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{mv_x}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} + \frac{e}{c} a_x \right\} - \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{e}{c} (v_x a_x + v_y a_y + v_z a_z) \right\} + e \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0. \quad (2)$$

Men ziet gemakkelijk in, dat deze vergelijking den vorm van de vergelijking van LAGRANGE heeft:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial v_x} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0,$$

indien men stelt

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + \frac{e}{c} (v_x a_x + v_y a_y + v_z a_z) - e\phi.$$

*In de uitdrukking voor L komen de snelheidscomponenten ook lineair voor, dit geeft een mathematische uitdrukking aan het feit, dat uitwendige magnetische krachten dezelfde werking hebben als gyroscopische krachten in de mechanica.*

Wij zullen ons nu het veld denken te zijn voortgebracht door andere geladen deeltjes. Daarnaast zullen wij een uitwendig veld aannemen, d.w.z. een veld, waarvan we de herkomst niet nader specificieeren.

Nu kan het veld, door een geladen deeltje teweeggebracht, in bepaalde gevallen door een reeks worden uitgedrukt. <sup>5)</sup>

De potentialen  $\mathbf{a}$  en  $\phi$  hangen niet af van den gelijktijdigen stand der lading, maar van den effectieven stand. Deze is bereikt op een tijdstip, een tijd  $\tau$  voor het beschouwde tijdstip, zóó, dat  $\tau$  de tijd is, waarin het licht den afstand van den effectieven stand der lading naar het stelpunt doorloopt. Wanneer nu  $\tau$  zoo klein is, dat de afstand van den effectieven stand naar den gelijktijdigen in een reeks van TAYLOR kan worden ontwikkeld en bovendien  $\mathbf{v}$ ,  $\dot{\mathbf{v}}\tau$ ,  $\ddot{\mathbf{v}}\tau^2 \dots$  klein zijn t.o.v. de snelheid van het licht, dan vinden we voor de eerste termen van die reeksen

$$\mathbf{a} = \frac{e\mathbf{v}}{cr}, \quad (3a)$$

$$\phi = \frac{e}{r} \left\{ 1 + \frac{1}{2c^2} \left( \mathbf{v}^2 - (\mathbf{r}\dot{\mathbf{v}}) - \frac{(\mathbf{r}\mathbf{v})^2}{r^2} \right) \right\}$$

wanneer  $\mathbf{r}$  de vector van electron naar stelpunt voorstelt, en de straal van het electron t.o.v.  $r$  wordt verwaarloosd. De reden, dat wij ons bij  $\phi$  niet tot den eersten term bepalen, ligt hierin:

De kracht, door het magnetisch veld van één electron op een ander electron uitgeoefend,  $e/c [\mathbf{v}\mathbf{h}]$  is van dezelfde orde van grootte als de termen met  $1/c^2$  in de electriche veldsterkte, door het differentieeren van  $\phi$  naar  $x, y, z$  verkregen.

Verder willen we opmerken, dat  $\phi$  kan worden geschreven

$$\phi = \frac{e}{r} - \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{e}{2c^2 r} (\mathbf{r}\mathbf{v}) \right\} \quad (3b)$$

De differentiatie naar den tijd is hier voor een vast stelpunt gedacht.

§ 2 — *Bewegingsvergelijkingen voor een stelsel electronen.* We denken ons nu een stelsel electronen, die we 1 . . . k nummeren, en die slechts krachten van elkaar ondervinden, welke bepaald worden door de uitdrukkingen (3a) en (3b) voor de potentialen van de vorige paragraaf. De coördinaten van het stelsel zijn dus  $x_i, y_i, z_i$ ; als  $i$  van 1 . . . k loopt. De potentialen, op de plaats van electron  $i$ , veroorzaakt door de andere electronen en het uitwendige veld, noemen we  $a_i$  en  $\varphi_i$ , terwijl wij door  $a$  en  $\varphi$  het uitwendige veld alleen aangeven.

Hun waarde is

$$a_i = \sum_j \frac{e_j v_j}{cr_{ij}} + a, \quad j \neq i$$

$$\varphi_i = \sum_j \left\{ \frac{e_j}{r_{ij}} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{e_j}{2c^2 r_{ij}} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j) \right\} + \varphi, \quad j \neq i$$

terwijl  $r_{ij}$  de vector is met componenten

$$x_i - x_j, \quad y_i - y_j, \quad z_i - z_j,$$

en  $r_{ij}$  de absolute waarde van  $r_{ij}$  is.

Het biedt nu voordeel, in de laatste uitdrukking de verandering met den tijd in te voeren vanuit het bewegende  $i^{\text{de}}$  electron beschouwd, dus te schrijven

$$\varphi_i = \sum_j \frac{e_j}{r_{ij}} - \frac{d}{dt} \sum_j \frac{e_j}{2c^2 r_{ij}} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j) + v_{xi} \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j \frac{e_j}{2c^2 r_{ij}} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j) + \dots +$$

$$+ \dots + \varphi.$$

Voert men nu de differentiatie naar  $x_i, y_i, z_i$  uit, dan krijgt men

$$\varphi_i = \sum_j \frac{e_j}{r_{ij}} - \frac{d}{dt} \sum_j \frac{e_j}{2c^2 r_{ij}} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j) + \sum_j \frac{e_j (\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j)}{2c^2 r_{ij}} - \sum_j \frac{e_j (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_i) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{2c^2 r_{ij}^3} + \varphi$$

Nu geldt voor het  $i^{\text{de}}$  electron

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{m_i v_{xi}}{\sqrt{1 - \frac{v_i^2}{c^2}}} + \frac{e_i}{c} a_{ix} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{e_i}{c} (\mathbf{v}_i \mathbf{a}_i) + e_i \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_i} = 0.$$

Het resultaat van de differentiatie van den tweeden term van  $\varphi_i$  naar  $x_i$  zullen wij voegen bij

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{m_i v_{xi}}{\sqrt{1 - \frac{v_i^2}{c^2}}} + \frac{e_i}{c} a_{xi} \right\}.$$

Dan vinden wij, wanneer wij

$$\frac{m_i}{\sqrt{1 - \frac{v_i^2}{c^2}}} = \mu_i$$

schrijven:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left\{ \mu_i v_{xi} + \frac{e_i}{c} \sum_j \frac{e_j v_{xj}}{r_{ij}} - e_i \sum_j \frac{e_j v_{xj}}{2c^2 r_{ij}} + e_i \sum_j \frac{e_j (x_i - x_j) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{2c^2 r_{ij}^3} + \right. \\ \left. + \frac{e_i}{c} a_x \right\} - \\ - \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \frac{e_i}{c} \sum_j \frac{e_j (\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j)}{r_{ij}} - e_i \sum_j \frac{e_j (\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j)}{2c^2 r_{ij}} + e_i \sum_j \frac{e_j (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_i) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{2c^2 r_{ij}^3} - \right. \\ \left. - e_i \sum_j \frac{e_j}{r_{ij}} \right\} - \\ - \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \frac{e_i}{c} (\mathbf{v}_i \mathbf{a}) - e_i \varphi \right\} = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

Deze formule biedt veel merkwaardigs.

In de eerste plaats kan ze worden geschreven:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial v_{xi}} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} L = 0 \quad (5a)$$

wanneer

$$\begin{aligned} L = -c^2 \sum_i m_i \sqrt{1 - \frac{v_i^2}{c^2}} + \sum_{ij} \frac{e_i e_j (\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j)}{2c^2 r_{ij}} + \\ + \sum_{ij} \frac{e_i e_j (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_i) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{2c^2 r_{ij}^3} - \sum_{ij} \frac{e_i e_j}{r_{ij}} + \sum_i \left\{ \frac{e_i}{c} (\mathbf{a} \mathbf{v}_i) - e_i \varphi \right\} \end{aligned} \quad (5b)$$

Het teeken  $\sum_{ij}$  beteekent, dat elke combinatie  $ij$  ( $i \neq j$ ) slechts éénmaal wordt geteld.

Laat men het uitwendige veld weg, dan ziet men, dat de beweging van een stelsel electronen, waarvan de afstanden, snelheden enz. aan zekere voorwaarden voldoen, door de vergelijkingen van LAGRANGE worden bepaald, waarbij  $L$  in dit geval een kwadratische functie van de snelheden van het systeem is. Men kan zich  $L$  gesplitst denken in

$$L = T - U,$$

wanneer  $U$  is

$$U = \sum_{ij} \frac{e_i e_j}{r_{ij}},$$

en wij  $T$  en  $U$  de kinetische en potentieele energie van het systeem noemen. Deze onderscheiding is niet dezelfde als die tusschen magnetische en elektrische energie. *Wil men al onderscheid maken tusschen elektrische en magnetische krachten, dan moet men toch zeggen, dat ook elektrische krachten voortvloeien uit de kinetische energie, en dat de vermindering van de potentieele energie slechts gelijk is aan den arbeid, dien de electrostatische krachten verrichten.*

§ 3 — *Algemeene stellingen.* Uit de vergelijkingen (4) of (5) kunnen we nu eenige stellingen vinden, die geheel analoog zijn aan de wetten der mechanica over totale hoeveelheid van beweging, moment van hoeveelheid van beweging en energie van een stelsel.

Wanneer we de vergelijking (4) voor alle electronen sommeeren, vinden we:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left\{ \sum_i m_i v_{xi} + \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2 r_{ij}} v_{xj} + \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j (x_i - x_j) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{2c^2 r_{ij}^3} + \sum_i \frac{e_i}{c} a_x \right\} - \\ - \sum_i e_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \sum_j \frac{e_j (\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j)}{2c^2 r_{ij}} + \sum_j e_j \frac{(\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_i) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{2c^2 r_{ij}^3} - \sum_j \frac{e_j}{r_{ij}} \right\} - \\ - \sum_i e_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \frac{(\mathbf{v}_i \mathbf{a})}{c} - \Phi \right\} = 0 \end{aligned}$$

Wanneer men in de tweede regel de differentiaties naar  $r_{ij}$  en  $r_{ij}^3$  uitvoert, overtuigt men zich gemakkelijk, dat de sommatie naar  $i$  nul oplevert. De differentiatie naar den teller levert op:

$$\sum_i \sum_j \frac{e_i e_j v_{ix} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{2c^2 r_{ij}^3} + \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j v_{ix} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_i)}{2c^2 r_{ij}^3}.$$



Het teeken  $\sum_i \sum_j$  beteekent, dat elke combinatie dubbel wordt geteld.

Verwisselt men in de tweede som  $i$  en  $j$ , en bedenkt men, dat

$$r_{ij} = r_{ji}, \quad \mathbf{r}_{ij} = -\mathbf{r}_{ji},$$

dan vindt men, dat deze twee sommaties elkaar opheffen. Het resultaat is:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[ \sum_i \mu_i v_{xi} + \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \left\{ \frac{v_{jx}}{r_{ij}} + \frac{(x_i - x_j) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right\} \right] + \frac{d}{dt} \left\{ \sum_i \frac{e_i}{c} a_x \right\} - \\ - \sum_i \frac{e_i}{c} \left\{ v_{xi} \frac{\partial a_x}{\partial x} + v_{yi} \frac{\partial a_y}{\partial x} + v_{zi} \frac{\partial a_z}{\partial x} \right\} + \sum_i e_i \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0 \dots \quad (6) \end{aligned}$$

Bij afwezigheid van een uitwendig veld is onze stelling een integraal van de bewegingsvergelijkingen (in vectorschrijfwijze)

$$\mathbf{G} = \sum_i \mu_i \mathbf{v}_i + \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \left\{ \frac{\mathbf{v}_j}{r_{ij}} + \frac{\mathbf{r}_{ij} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right\} = \text{Const.} \dots \quad (7)$$

en men kan (6) schrijven:

$$\mathbf{K} = \frac{d}{dt} \mathbf{G}.$$

$\mathbf{K}$  is de totale kracht, die het uitwendige veld op het systeem uitoefent en  $\mathbf{G}$  is de totale hoeveelheid van beweging. Wanneer men aanneemt, dat de massa van de electronen geheel electromagnetisch is, is  $\mathbf{G}$  niets anders dan

$$\mathbf{G} = \iiint \frac{\mathbf{I}}{4\pi c} [\mathbf{dh}] d\tau,$$

over de geheele ruimte geïntegreerd. Bij afwezigheid van een uitwendig veld is inderdaad  $\mathbf{G}$  een constante. In ons geval is het mogelijk,  $\mathbf{G}$  op eenvoudige wijze in de coördinaten en snelheden van de electronen uit te drukken.

Schrijft men:

$$\mathbf{d} = \sum \mathbf{d}_i, \quad \mathbf{h} = \sum \mathbf{h}_i,$$

waarin  $\mathbf{d}_i$  en  $\mathbf{h}_i$  de veldsterkten zijn, door het  $i^{\text{de}}$  atoom teweeggebracht, dan is

$$\sum_i \iiint \frac{1}{4\pi c} [\mathbf{d}_i \mathbf{h}_i] d\tau = \sum_i \mu_i \mathbf{v}_i,$$

en

$$\sum_i \sum_j \iiint \frac{1}{4\pi c} [\mathbf{d}_i \mathbf{h}_j] d\tau = \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \left\{ \frac{\mathbf{v}_j}{r_{ij}} + \frac{\mathbf{r}_{ij}(\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right\}.$$

Een tweede integraal vinden we, wanneer we voor alle electronen sommeeren:

$$\begin{aligned} & y_i \left[ \frac{d}{dt} \left\{ \mu_i v_{zi} + \frac{e_i}{2c^2} \sum_j e_j \left( \frac{v_{zj}}{r_{ij}} + \frac{(z_i - z_j)(\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right) + \frac{e_i a_x}{c} \right\} - \right. \\ & - \frac{\partial}{\partial z_i} \left\{ \frac{e_i}{2c^2} \sum_j \left( e_j \frac{(\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j)}{r_{ij}} + \frac{e_j (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_i)(\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right) - e_i \sum_j \frac{e_j}{r_{ij}} \right\} - \\ & \quad \left. - \frac{\partial}{\partial z_i} \left( \frac{e_i}{c} (\mathbf{v}_i \mathbf{a}) - e_i \Phi \right) \right] - \\ & - z_i \left[ \frac{d}{dt} \left\{ \mu_i v_{yi} + \frac{e_i}{2c^2} \sum_j e_j \left( \frac{v_{yj}}{r_{ij}} + \frac{(y_i - y_j)(\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right) + \frac{e_i a_y}{c} \right\} - \right. \\ & - \frac{\partial}{\partial y_i} \left\{ \frac{e_i}{2c^2} \sum_j \left( e_j \frac{(\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j)}{r_{ij}} + \frac{e_j (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_i)(\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right) - e_i \sum_j \frac{e_j}{r_{ij}} \right\} - \\ & \quad \left. - \frac{\partial}{\partial y_i} \left( \frac{e_i}{c} (\mathbf{v}_i \mathbf{a}) - e_i \Phi \right) \right] = 0 \end{aligned}$$

Wanneer we de sommaties uitvoeren, brengen we  $y_i$  en  $z_i$  onder het differentiaalteken  $d/dt$ . De sommatie van den eersten en den vierden regel levert dan:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left[ \sum_i \mu_i (y_i v_{zi} - z_i v_{yi}) + \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \frac{(y_i v_{zj} - z_i v_{yj})}{r_{ij}} + \right. \\ & + \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \frac{\{y_i(z_i - z_j) - z_i(y_i - y_j)\} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} + \\ & \quad \left. + \sum_i \frac{e_i}{c} (y_i a_x - z_i a_y) \right] - \\ & - \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \frac{\{v_{yi}(z_i - z_j) - v_{zi}(y_i - y_j)\} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} - \\ & \quad - \sum_i \frac{e_i}{c} (v_{yi} a_x - v_{zi} a_y). \end{aligned}$$

Bij de sommatie van den tweeden en vijfden regel behoeven we slechts naar de tellers te differentieeren, de differentiaties naar  $r_{ij}$  en  $r_{ij}^3$  leveren in de som nul.

Wij krijgen bij de sommatie

$$\sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \frac{(z_i v_{yi} - y_i v_{zi}) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} + \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \frac{(z_i v_{yj} - y_i v_{zj}) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_i)}{r_{ij}^3}.$$

Wanneer we in de tweede sommatie  $i$  en  $j$  verwisselen, dan wordt zij

$$-\sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \frac{(z_j v_{yi} - y_j v_{zi}) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3}$$

zoodat het resultaat van de sommatie van den tweeden en vijfden regel is

$$\sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \frac{\{(z_i - z_j) v_{yi} - (y_i - y_j) v_{zi}\} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3}$$

een uitdrukking, die het tegengestelde is van een uitdrukking in de sommatie van den eersten en vierden regel.

Ons resultaat is nu, na een kleine vereenvoudiging:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left[ \sum_i \mu_i (y v_z - z v_y)_i + \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \frac{y_i v_{zj} - z_i v_{yj}}{r_{ij}} + \right. \\ & \quad \left. + \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \frac{(z_i y_j - y_i z_j) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right] + \\ & + \frac{d}{dt} \sum_i \frac{e_i}{c} (y_i a_z - z_i a_y) - \sum_i \frac{e_i}{c} (v_{yi} a_z - v_{zi} a_y) - \\ & - \sum_i e_i \left\{ y_i \frac{\partial}{\partial z_i} \left( \frac{(\mathbf{v}_i \mathbf{a})}{c} - \phi \right) - z_i \frac{\partial}{\partial y_i} \left( \frac{(\mathbf{v}_i \mathbf{a})}{c} - \phi \right) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (8)$$

Bij afwezigheid van het uitwendige veld vinden we hier weer een integraal van de bewegingsvergelijkingen (in vectorschrijfwijze)

$$\mathbf{J} = \sum_i \mu_i [\mathbf{r}_i \mathbf{v}_i] + \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \left\{ \frac{[\mathbf{r}_i \mathbf{v}_j]}{r_{ij}} + \frac{[\mathbf{r}_j \mathbf{r}_i] (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right\} = \text{Const.} \quad (9)$$

en men kan (8) schrijven:

$$\mathbf{M} = \frac{d}{dt} \mathbf{J}.$$

$\mathbf{M}$  is nu het totale koppel, dat het uitwendige veld op het systeem uitoefent en  $\mathbf{J}$  het moment van hoeveelheid van beweging van het stelsel electronen, of, van het totale veld, dat ze teweegbrengen.

Men kan naar aanleiding van  $\mathbf{J}$  dezelfde opmerking maken als over  $\mathbf{G}$ ,  $\mathbf{J}$  is nl.

$$\mathbf{J} = \iiint \frac{1}{4\pi c} [\mathbf{r}[\mathbf{dh}]] d\tau.$$

Wanneer we tenslotte de energie afleiden, zullen we van het begin af het uitwendige veld nul stellen, en van den vorm (5) uitgaan. Wanneer men de  $x_i$ -componente van de vergelijking (5) met  $v_{xi}$  vermenigvuldigt, en dan over alle coördinaten sommeert, vindt men

$$\frac{d}{dt} \left( \sum_i v_{xi} \frac{\partial L}{\partial v_{xi}} - L \right) = 0.$$

Werkt men dit uit, dan vindt men

$$E = \sum_i \frac{m_i c^2}{\sqrt{1 - v_i^2/c^2}} + \sum_{ij} \frac{e_i e_j}{2c^2} \left\{ \frac{(\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j)}{r_{ij}} + \frac{(\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_i)(\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right\} + \sum_{ij} \frac{e_i e_j}{r_{ij}} = \text{Const.} \quad (10)$$

welke uitdrukking de energie van het systeem voorstelt, en een speciale uitdrukking is voor

$$\iiint \frac{1}{8\pi} (\mathbf{d}^2 + \mathbf{h}^2) d\tau.$$

§ 4 — *Beschouwing van een atoom.* De uitkomsten van de vorige paragraaf kunnen we nu direct toepassen op een atoom. Een atoom, buiten invloed van een uitwendig veld, heeft dus een con-

stante hoeveelheid van beweging (7), een constant moment van hoeveelheid van beweging (9) en een constante energie (10). Zonder nader op de structuur van het atoom in te gaan, kan men van de vormen niet veel zeggen, het is echter mogelijk, de orde van grootte van de verschillende deelen aan te geven. De deelen.

$$\begin{aligned} & \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \left\{ \frac{\mathbf{v}_j}{r_{ij}} + \frac{\mathbf{r}_{ij} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right\}, \\ & \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \left\{ \frac{[\mathbf{r}_i \mathbf{v}_j]}{r_{ij}} + \frac{[\mathbf{r}_j \mathbf{r}_i] (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right\}, \\ & \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \left\{ \frac{(\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j)}{r_{ij}} + \frac{(\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_i) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right\}, \end{aligned}$$

van (7), (9) en (10), zijn als  $r$  de gemiddelde afstand van de electronen voorstelt, van de orde van grootte,

$$\frac{e^2}{c^2} \cdot \frac{v}{r}, \quad \frac{e^2}{c^2} \cdot v, \quad \frac{e^2}{c^2} \cdot \frac{v^2}{r}.$$

De massa  $m$  van een electron met oppervlaktelading kan worden geschreven

$$m = \frac{2}{3} \cdot \frac{e^2}{sc^2}$$

( $s$  = straal electron)

zoodat de eerste termen van (7), (9), (10), de orde van grootte hebben

$$\frac{e^2}{c^2} \cdot \frac{v}{s}, \quad \frac{e^2}{c^2} \cdot \frac{vr}{s}, \quad \frac{e^2}{c^2} \cdot \frac{v^2}{s}.$$

De verhouding is in alle gevallen als de straal van een electron tot den gemiddelden afstand van twee electronen. Stellen we dezen afstand  $10^{-8}$  cm, dan is die verhouding, daar  $s = 10^{-13}$  cm, gelijk aan  $10^{-5}$ .

Wij kunnen dus in eerste benadering van den invloed van deze termen afzien, zoodat voor een atoom mag worden gesteld:

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= \sum_i \mu_i \mathbf{v}_i = \text{Const.} \\ \mathbf{J} &= \sum_i \mu_i [\mathbf{r}_i \mathbf{v}_i] = \text{Const.} \end{aligned}$$

$$E = \sum_i \frac{m_i c^2}{\sqrt{1 - \frac{v_i^2}{c^2}}} + \sum_{ij} \frac{e_i e_j}{r_{ij}} = \text{Const.}$$

Dit komt er op neer, dat men slechts de electrostatische krachten tusschen de electronen van een atoom in rekening brengt. Wij zullen in het volgende ook van de relativiteitscorrectie voor de massa afzien. Wij kunnen dit des te eerder doen, daar het zwaartepunt van ons onderzoek valt op de wisselwerking van twee atomen, en de beteekenis, die de integraal (9) in haar volledigen vorm daarvoor heeft. Voor een atoom stellen we dus:

$$J_x = \sum_i m_i (y_i v_{zi} - z_i v_{yi}) = \text{Const.} \quad 9a)$$

enz.

waarbij we **J** nog nader vastleggen, door den oorsprong van het coördinatenstelsel in het zwaartepunt van het atoom te leggen.

§ 5 — *Wisselwerking tusschen twee atomen.* Men zou de eigenschappen, die een stelsel van twee atomen bezit, kunnen afleiden uit onze bewegingsvergelijkingen (4), zonder uitwendig veld, en de stellingen (7), (9) en (10). Het is echter practischer, een andere weg in te slaan. We zullen één atoom beschouwen in een uitwendig veld, en dit uitwendig veld later specificieeren als te zijn voortgebracht door een ander atoom. Daarbij is het voldoende, zich te bedienen van de afgeleide stellingen (6) en (8).

$$\mathbf{K} = \frac{d\mathbf{G}}{dt}, \quad \mathbf{M} = \frac{d\mathbf{J}}{dt},$$

en **K** en **M** nader te bepalen. We zullen eenige sommaties, op een atoom betrekking hebbende, vooraf laten gaan. Wij nemen nu de volgende hypothesen over den bouw van het atoom aan:

1°. Daar de massa van de kern veel grooter is dan die der omringende electronen (de massa van een waterstofkern is 1850 maal zoo groot als die van een negatief electron) en zij bovendien gelijkmatig door electronen is omgeven, zijn de coördinaten van de kern t.o.v. het zwaartepunt veel kleiner dan die van de electronen. Voor de snelheden geldt dezelfde verhouding, wanneer het atoom als geheel in rust is.

Nu zullen we bij de sommaties

$$\sum e_i x_i, \sum e_i y_i, \sum e_i z_i,$$

waarbij  $x_i, y_i, z_i$  de coördinaten van het  $i^{\text{de}}$  deeltje t.o.v. het zwaartepunt zijn, de term, die op de kern betrekking heeft, verwaarloozen t.o.v. de andere. Immers is, in tegenstelling met de massa, de lading van de kern van dezelfde orde van grootte als die der electronen.

Ook laten we deze verwaarloozing gelden voor:

$$\sum m_i x_i^2, \sum m_i x_i v_{yi}, \sum e_i x_i^2, \sum e_i x_i v_{yi} \text{ enz.}$$

Bij al deze sommaties zullen we voortaan de bijdrage van de kern weglaten.

2° Wij nemen verder aan, dat het atoom niet gepolariseerd is:

$$\sum e x_i = \sum e y_i = \sum e z_i = 0 \quad (11)$$

Het zal uit het vervolg blijken, dat het voldoende is voor ons betoog, aan te nemen, dat de gemiddelde polarisatie nul is. Wij zullen ons echter aan (11) houden om de formules niet te lang te maken.

3° De grootheden

$$\sum m x_i^2, \sum m y_i^2, \sum m z_i^2.$$

worden aan elkaar gelijk, als men de gemiddelden neemt over een tijd, groot t.o.v. den tijd, waarin de electronen hun omloop in het atoom volvoeren. De grootheden

$$\sum m y_i z_i, \sum m z_i x_i, \sum m x_i y_i,$$

worden in dien tijd gemiddeld nul. In verband met de constante waarden van  $m$  en  $e$  voor de electronen kunnen we dus schrijven:

$$\overline{\sum \frac{e}{c} x_i^2} = \overline{\sum \frac{e}{c} y_i^2} = \overline{\sum \frac{e}{c} z_i^2} = P \quad (12)$$

$$\overline{\sum \frac{e}{c} y_i z_i} = \overline{\sum \frac{e}{c} z_i x_i} = \overline{\sum \frac{e}{c} x_i y_i} = 0 \quad (13)$$

Uit deze drie onderstellingen kunnen we eenige andere uitdrukkingen afleiden.

Daartoe merken we eerst op, dat voor het atoom geldt

$$J_x = \sum m (y_i v_{zi} - z_i v_{yi}) = \text{Const.}, \dots \quad (9a)$$

indien op het atoom geen uitwendig veld werkt. Volgens 1° behoeft de sommatie slechts over de electronen worden uitgestrekt. Dan is ook de grootheid  $\mu$ , die we nu invoeren, en die wij het magnetisch moment zullen noemen:

$$\mu_x = \sum \frac{e}{2c} (y_i v_{zi} - z_i v_{yi}),$$

een constante.

Wanneer wij nu de uitdrukkingen (11), (12), (13) naar den tijd differentieeren, vinden wij:

$$\overline{\sum e v_{xj}} = \overline{\sum e v_{yi}} = \overline{\sum e v_{zi}} = 0 \quad (11a)$$

$$\overline{\sum \frac{e}{c} x_i v_{xi}} = \overline{\sum \frac{e}{c} y_i v_{yi}} = \overline{\sum \frac{e}{c} z_i v_{zi}} = 0 \quad (12a)$$

$$\overline{\sum \frac{e}{c} y_i v_{zi}} = -\overline{\sum \frac{e}{c} z_i v_{yi}} \quad \text{enz.}$$

Uit de definitie van  $\mu$  volgt dan

$$\overline{\sum \frac{e}{c} y_i v_{zi}} = -\overline{\sum \frac{e}{c} z_i v_{yi}} = \mu_x \quad (13a)$$

enz.

In een uitwendig veld zijn  $\mathbf{J}$  en  $\mu$ , in het algemeen niet constant. De uitdrukking (13a) behoudt haar zin, wanneer  $\mathbf{J}$  in den tijd, waarin de electronen hun omloop volbrengen niet noemenswaard verandert.

Wanneer de uitdrukkingen (12) en (13) niet alleen voor de gemiddelde waarden gelden, maar op elk oogenblik, zullen we zeggen, dat het atoom bolsymmetrie bezit.

Wij willen verder het magnetisch veld bepalen, dat een atoom, dat de hierboven genoemde eigenschappen bezit, teweegbrengt. Wanneer wij twee atomen zullen beschouwen, zullen wij het atoom, dat het veld veroorzaakt het tweede noemen, en zijn electronen door den index  $j$  onderscheiden. Het atoom, waarvan wij het gedrag in een magnetisch veld willen nagaan, noemen wij het eerste atoom. Aan de electronen van dit atoom geven wij den index  $i$ . Met het oog hierop noemen wij de coördinaten van het zwaartepunt van het veldverwekkende atoom  $X_2, Y_2, Z_2$ , en die



van het punt waarvoor wij het veld willen bepalen en waar wij ons later het zwaartepunt van het eerste atoom zullen denken,  $X_1, Y_1, Z_1$ . Wij stellen:

$$R^2 = (X_2 - X_1)^2 + (Y_2 - Y_1)^2 + (Z_2 - Z_1)^2,$$

terwijl wij  $r_j$  den afstand noemen van een electron met coördinaten

$$X_2 + x_j, Y_2 + y_j, Z_2 + z_j,$$

tot het stelpunt  $X_1, Y_1, Z_1$ .

Verder willen wij stellen:

$$\frac{\partial}{\partial X_2} \left( \frac{1}{R} \right) = - \frac{\partial}{\partial X_1} \left( \frac{1}{R} \right) = A_1,$$

$$\frac{\partial}{\partial Y_2} \left( \frac{1}{R} \right) = - \frac{\partial}{\partial Y_1} \left( \frac{1}{R} \right) = A_2,$$

$$\frac{\partial}{\partial Z_2} \left( \frac{1}{R} \right) = - \frac{\partial}{\partial Z_1} \left( \frac{1}{R} \right) = A_3,$$

$$\frac{\partial^2}{\partial X_2^2} \left( \frac{1}{R} \right) = A_{11}, \quad \frac{\partial^2}{\partial X_2 \partial Y_2} \left( \frac{1}{R} \right) = A_{12} \quad \text{enz.}$$

Dan is voor afstanden, groot t.o.v. de dimensies van het atoom

$$\frac{1}{r_j} = \frac{1}{R} + A_1 x_j + A_2 y_j + A_3 z_j + \dots$$

De vectorpotential  $\mathbf{a}$ , door het atoom veroorzaakt is

$$a_x = \sum \frac{ev_{xj}}{cr_j} = \frac{1}{cR} \sum ev_{xj} + A_1 \sum \frac{e}{c} x_j v_{xj} + A_2 \sum \frac{e}{c} y_j v_{xj} + A_3 \sum \frac{e}{c} z_j v_{xj}$$

en, uit hoofde van (11a)

$$a_x = A_1 \sum \frac{e}{c} x_j v_{xj} + A_2 \sum \frac{e}{c} y_j v_{xj} + A_3 \sum \frac{e}{c} z_j v_{xj} \quad \text{enz.} \quad (14)$$

Neemt men nu de gemiddelde waarde van  $\mathbf{a}$ , dan vindt men met behulp van (12a) en (13a):

$$\bar{a}_x = -A_2 \mu_x + A_3 \mu_y,$$

en op de zelfde manier:

$$\bar{a}_y = -A_3 \mu_x + A_1 \mu_z,$$

$$\bar{a}_z = -A_1 \mu_y + A_2 \mu_x,$$

(14a)

De magnetische veldsterkte is

$$H_x = \frac{\partial}{\partial Y_1} \bar{a}_z - \frac{\partial}{\partial Z_1} \bar{a}_y,$$

$$= A_{12} \mu_y - A_{22} \mu_x - A_{33} \mu_x + A_{13} \mu_x,$$

en daar

$$A_{11} + A_{22} + A_{33} = 0,$$

$$H_x = A_{11} \mu_x + A_{12} \mu_y + A_{13} \mu_x. \quad \text{enz.} \quad (15)$$

Dit beteekent, dat het gemiddelde magnetische veld van een atoom hetzelfde is als dat van een magnetische dipool met moment  $\mu$ .

Uit de definitie van  $\mu$  volgt verder, dat  $\mu$  evenredig is met het moment van hoeveelheid van beweging  $\mathbf{J}$  van het atoom, en wel

$$\mu = \frac{e}{2mc} \mathbf{J}. \quad (16)$$

*Voor zoover het teweeggebrachte magnetische veld betreft, kunnen we het atoom vervangen denken door een magnetische dipool of door een elektrisch kringstroompje.*

§ 6 — *Kracht en koppel, op een atoom werkende.* We willen nu de kracht en het koppelmoment berekenen, die een uitwendig veld op een atoom uitoefent, en daarbij nog geen onderstellingen maken over den oorsprong van dat veld. Later zullen we aannemen, dat dat veld door een tweede atoom wordt teweeggebracht.

Men kan de totale kracht en het totale koppel vinden, door de kracht op een electron op te schrijven:

$$\mathbf{k} = e \left( -\frac{1}{c} \frac{d\mathbf{a}}{dt} + \text{grad} \frac{1}{c} (\mathbf{v}\mathbf{a}) - \text{grad} \phi \right) \quad (1)$$

en haar moment t.o.v. het zwaartepunt, en dit voor alle electronen te sommeeren. Men overtuigt zich gemakkelijk, dat deze sommaties in § 3 bij de afleiding van de formules (6) en (8) reeds zijn uitgevoerd, en dat de gevraagde uitdrukkingen de termen met  $\mathbf{a}$  en  $\phi$  in de twee formules zijn, met het tegengestelde teeken. Zij zijn:

$$K_x = -\frac{d}{dt} \sum \frac{e}{c} a_x + \sum \frac{e}{c} \left\{ v_{xi} \frac{\partial a_x}{\partial x} + v_{yi} \frac{\partial a_y}{\partial x} + v_{zi} \frac{\partial a_z}{\partial x} \right\} - \sum e \frac{\partial \Phi}{\partial x}$$

$$M_x = -\frac{d}{dt} \sum \frac{e}{c} (y_i a_z - z_i a_y) + \sum \frac{e}{c} (v_{yi} a_z - v_{zi} a_y) \\ + \sum e y_i \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{(\mathbf{v}_i \mathbf{a})}{c} - \Phi \right\} - \sum e z_i \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{(\mathbf{v}_i \mathbf{a})}{c} - \Phi \right\}.$$

De uitdrukking voor  $K_x$  is trouwens direct uit (I) afte leiden.

Wij willen nu aannemen, dat  $\Phi$ ,  $\mathbf{a}$ ,  $\partial\Phi/\partial x$ ,  $\partial\mathbf{a}/\partial x$  enz. in de omgeving van de kern in TAYLORreeksen kunnen worden ontwikkeld. Geven wij door den index  $o$  de veldgrootheden op de plaats van het zwaartepunt aan, dan is bijv.

$$a_x = a_{x0} + x_i \left( \frac{\partial a_x}{\partial x} \right)_o + y_i \left( \frac{\partial a_x}{\partial y} \right)_o + z_i \left( \frac{\partial a_x}{\partial z} \right)_o.$$

In eerste benadering zullen we in een uitdrukking  $a$  door  $a_o$ , enz. vervangen. Indien de uitdrukking hierdoor nul wordt, zetten wij de benadering een stap verder voort, en gebruiken we de termen met  $x$ ,  $y$ ,  $z$ .

Wanneer we aldus de uitdrukkingen voor  $K$  en  $M$  behandelen, en er gebruik van maken, dat

$$\begin{aligned} \sum e_i &= 0 \\ \sum e_i x_i &= \sum e_i y_i = \sum e_i z_i = 0 & \text{(II)} \\ \sum e_i v_{xi} &= \sum e_i v_{yi} = \sum e_i v_{zi} = 0 & \text{(IIa)}, \end{aligned}$$

dan vinden we, dat de eerste en de derde term van  $\mathbf{K}$  niets opleveren. In den tweeden term voeren we in

$$\frac{\partial a_x}{\partial x} = \left( \frac{\partial a_x}{\partial x} \right)_o + x_i \left( \frac{\partial^2 a_x}{\partial x^2} \right)_o + \dots + \dots$$

In de uitkomst zullen we den index  $o$  weglaten, en verder onder de veldgrootheden steeds die op de plaats van het zwaartepunt verstaan. Wij vinden dan:

$$K_x = \sum \frac{e}{c} \left[ v_{xi} x_i \frac{\partial^2 a_x}{\partial x^2} + v_{xi} y_i \frac{\partial^2 a_x}{\partial x \partial y} + v_{xi} z_i \frac{\partial^2 a_x}{\partial x \partial z} + v_{yi} x_i \frac{\partial^2 a_y}{\partial x^2} + \right. \\ \left. + v_{yi} y_i \frac{\partial^2 a_y}{\partial x \partial y} + v_{yi} z_i \frac{\partial^2 a_y}{\partial x \partial z} + v_{zi} x_i \frac{\partial^2 a_z}{\partial x^2} + v_{zi} y_i \frac{\partial^2 a_z}{\partial x \partial y} + v_{zi} z_i \frac{\partial^2 a_z}{\partial x \partial z} \right] \quad (17)$$

In de twee eerste deelen van  $M$  moeten we  $\mathbf{a}$  ook in Taylorontwikkelingen uitdrukken, in de laatste twee kunnen we  $\partial a/\partial x$  enz. in-eens door hun waarde op de plaats van het zwaartepunt ver-vangen. De uitkomst is:

$$\begin{aligned}
 M_x = & -\frac{d}{dt} \left[ \sum \frac{e}{c} \left( y_i x_i \frac{\partial a_x}{\partial x} + y_i^2 \frac{\partial a_x}{\partial y} + y_i z_i \frac{\partial a_x}{\partial z} \right) - \right. \\
 & - \sum \frac{e}{c} \left( z_i x_i \frac{\partial a_y}{\partial x} + z_i y_i \frac{\partial a_y}{\partial y} + z_i^2 \frac{\partial a_y}{\partial z} \right) \left. \right] + \sum \frac{e}{c} \left( v_{yi} x_i \frac{\partial a_x}{\partial x} + \right. \\
 & + v_{yi} y_i \frac{\partial a_x}{\partial y} + v_{yi} z_i \frac{\partial a_x}{\partial z} \left. \right) - \sum \frac{e}{c} \left( v_{zi} x_i \frac{\partial a_y}{\partial x} + v_{zi} y_i \frac{\partial a_y}{\partial y} + \right. \\
 & + v_{zi} z_i \frac{\partial a_y}{\partial z} \left. \right) + \sum \frac{e}{c} \left( v_{xi} y_i \frac{\partial a_x}{\partial z} + v_{yi} y_i \frac{\partial a_y}{\partial z} + v_{zi} y_i \frac{\partial a_z}{\partial z} \right) - \\
 & - \sum \frac{e}{c} \left( v_{xi} z_i \frac{\partial a_x}{\partial y} + v_{yi} z_i \frac{\partial a_y}{\partial y} + v_{zi} z_i \frac{\partial a_z}{\partial z} \right) - \sum e \left[ y_i x_i \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial z} + \right. \\
 & \left. + (y_i^2 - z_i^2) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y \partial z} - x_i z_i \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} + y_i z_i \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \right) \right] \quad (18)
 \end{aligned}$$

De nadere discussie van (17) en (18) zullen we tot de volgende para-graaf uitstellen. Wij merken slechts op, dat de formules ook het geval van twee atomen omvatten. We drukken dan  $\Phi$  en  $\mathbf{a}$  uit in de gegevens van het tweede atoom. In het vervolg hebben we alleen de uitdrukking van  $\mathbf{a}$  noodig, die we in de vorige paragraaf afleidden.

$$a_x = A_1 \sum \frac{e}{c} x_j v_{xj} + A_2 \sum \frac{e}{c} y_j v_{xj} + A_3 \sum \frac{e}{c} z_j v_{xj} \quad (14)$$

waarbij:

$$A_1 = \frac{\partial}{\partial X_2} \left( \frac{1}{R} \right),$$

$$A_2 = \frac{\partial}{\partial Y_2} \left( \frac{1}{R} \right),$$

$$A_3 = \frac{\partial}{\partial Z_2} \left( \frac{1}{R} \right),$$

$$R^2 = (X_2 - X_1)^2 + (Y_2 - Y_1)^2 + (Z_2 - Z_1)^2,$$

$X_2, Y_2, Z_2$  de coördinaten van het zwaartepunt van het tweede atoom zijn en  $X_1, Y_1, Z_1$  de coördinaten van het punt, waarvoor  $\mathbf{a}$  berekend wordt, in ons geval, het zwaartepunt van het eerste atoom. Wij zullen, in verband hiermede, de afgeleiden van  $\mathbf{a}$  naar  $x, y, z$  in (17) en (18) liever

$$\frac{\partial a}{\partial X_1}, \quad \frac{\partial a}{\partial Y_1}, \quad \frac{\partial a}{\partial Z_1},$$

schrijven, en de uitdrukkingen (17) en (18)  $K_{1x}$  en  $M_{1x}$  noemen.

§ 7 — *De gemiddelde waarden.* Onze uitdrukkingen krijgen een bruikbaarere vorm, wanneer we de tijdsgemiddelden nemen. Wanneer het veld constant is, of slechts zoo langzaam met den tijd verandert dat  $\mathbf{a}$  en  $\phi$  in den tijd, dat de electronen een omloop volbrengen niet noemenswaard veranderd zijn, kunnen we direct (12), (12a) en (13a) toepassen. Het vereischt echter nog een nader onderzoek, wanneer het veld door een ander atoom wordt teweeggebracht, en dus snel veranderlijk is.

Wanneer we nu (14) werkelijk in (17) en (18) invullen, krijgen we een reeks van producten, die den volgenden vorm kunnen hebben:

$$\sum_i \left( \frac{e_i}{c} y_i x_i \right) \cdot \frac{\partial}{\partial X_1} \left[ \sum_j \frac{e_j}{c} (x_j v_{xj}) A_1 \right]$$

of

$$\sum_i \left( \frac{e_i}{c} v_{xi} y_i \right) \cdot \frac{\partial}{\partial Z_1} \left[ \sum_j \frac{e_j}{c} (y_j v_{xj}) A_2 \right], \text{ enz.}$$

We zullen een dergelijk product door

$$B \cdot C$$

voorstellen.

Men ziet nu in, dat alleen dan de gemiddelde waarden van  $\mathbf{M}_1$  en  $\mathbf{K}_1$  een eenvoudige vorm aannemen, wanneer we mogen stellen

$$\overline{B \cdot C} = \overline{B} \cdot \overline{C}$$

Wanneer zal dit geoorloofd zijn?

Om die vraag te beantwoorden, stellen we:

$$B = \overline{B} + \Delta B, \quad C = \overline{C} + \Delta C.$$

Dan is

$$B \cdot C = \bar{B} \cdot \bar{C} + \bar{B} \cdot \Delta C + \bar{C} \cdot \Delta B + \Delta B \cdot \Delta C,$$

en

$$\overline{B \cdot C} = \bar{B} \cdot \bar{C} + \overline{\Delta B \cdot \Delta C}$$

In twee gevallen nu mag de laatste term worden verwaarloosd  
1°.  $\Delta B$  of  $\Delta C$  is nul, of

$B$  of  $C$  is constant.

In aansluiting met de vroeger gebruikte terminologie kunnen we zeggen:

*Een der atomen moet bolsymmetrie bezitten.*

2°.  $\Delta B$  en  $\Delta C$  zijn beide zeer klein, zoodat  $\Delta B \cdot \Delta C$  t.o.v.  $B \cdot C$  te verwaarloozen is. Dit zal zich voor kunnen doen, als beide atomen een groot aantal electronen bezitten.

We zullen nu aannemen, dat aan een dezer twee voorwaarden is voldaan en dat  $\mathbf{J}$  en  $\boldsymbol{\mu}$  in den tijd, waarin de electronen rondloopen, niet merkbaar veranderen. Dan mogen we, wanneer we van (17) en (18) het tijdsgemiddelde nemen, de gemiddelden voor het eerste en voor het tweede atoom apart nemen.

Van de boven genoemde voorbeelden wordt het eerste product nul, daar

$$\sum_i \frac{e_i}{c} y_i x_i = 0,$$

en het tweede product

$$-\mu_{x1} \frac{\partial}{\partial Z_1} \left( -\mu_{x2} A_2 \right).$$

Wanneer we ons bij de formules (17) en (18) houden, zooals we die hebben opgeschreven, beteekent dit, dat we  $a_x$  door  $\bar{a}_x$  mogen vervangen, en apart daarvan de gemiddelden van de sommeeringen van het eerste atoom mogen nemen.

Dus:

$$\bar{K}_{x1} = \mu_{x1} \frac{\partial}{\partial X_1} \left( \frac{\partial}{\partial Y_1} \bar{a}_z - \frac{\partial}{\partial Z_1} \bar{a}_y \right) + \mu_{y1} \frac{\partial}{\partial X_1} \left( \frac{\partial}{\partial Z_1} \bar{a}_x - \frac{\partial}{\partial X_1} \bar{a}_z \right) +$$

$$+ \mu_{x1} \frac{\partial}{\partial X_1} \left( \frac{\partial}{\partial X_1} a_y - \frac{\partial}{\partial Y_1} a_x \right) \quad (17a),$$

$$\begin{aligned} \bar{M}_{x1} = & - \frac{d}{dt} \left[ P_1 \left( \frac{\partial}{\partial Y_1} \bar{a}_z - \frac{\partial}{\partial Z_1} \bar{a}_y \right) \right] + \\ & + \mu_{y1} \left( \frac{\partial}{\partial X_1} \bar{a}_y - \frac{\partial}{\partial Y_1} \bar{a}_x \right) - \mu_{z1} \left( \frac{\partial}{\partial Z_1} \bar{a}_x - \frac{\partial}{\partial X_1} \bar{a}_z \right) \end{aligned} \quad (18a)$$

$$a_x = -A_2 \mu_{x2} + A_3 \mu_{y2} \text{ enz.} \quad (14a)$$

$$P_1 = \sum \frac{e}{c} x_i^2 = \sum \frac{e}{c} y_i^2 = \sum \frac{e}{c} z_i^2 \quad (12)$$

De afgeleiden van den tijd hebben nu slechts betrekking op de gemiddelde waarden.

We kunnen nu in de formules het gemiddelde magnetische veld  $H_1$  op de plaats van den kern invullen,

$$H_{x1} = \frac{\partial}{\partial Y_1} \bar{a}_z - \frac{\partial}{\partial Z_1} \bar{a}_y:$$

$$\bar{K}_{x1} = \mu_{x1} \frac{\partial}{\partial X_1} H_{x1} + \mu_{y1} \frac{\partial}{\partial X_1} H_{y1} + \mu_{z1} \frac{\partial}{\partial X_1} H_{z1} \quad (19)$$

$$\bar{M}_{x1} = - \frac{d}{dt} (P_1 H_{x1}) + \mu_{y1} H_{z1} - \mu_{z1} H_{y1} \quad (20)$$

en als

$$\frac{\partial^2}{\partial X_2^2} \left( \frac{1}{R} \right) = A_{11}$$

enz.:

$$H_{x1} = A_{11} \mu_{x2} + A_{12} \mu_{y2} + A_{13} \mu_{z2} \text{ enz.} \quad (15)$$

We bezien nu eerst de formule (19). Zij zegt, dat de gemiddelde kracht, die een atoom van een constant of langzaam veranderlijk electro-magnetisch veld ondervindt, dezelfde is als die, welke de aequivalente magnetische dipool zou ondervinden. Deze stelling geldt ook nog onder zekere voorwaarden, wanneer we twee atomen beschouwen. Zij oefenen gemiddeld krachten op elkaar uit als twee magnetische dipolen, indien een van beide bolsymmetrie, of beide veel electronen bezitten.

We zullen de uitdrukking (20) in de volgende paragraaf discutiëren.

§ 8 — *De stelling van Larmor.* De momentenstelling (8)

$$\mathbf{M} = \frac{d}{dt} \mathbf{J},$$

kunnen we nu vervangen door

$$\overline{\mathbf{M}} = \overline{\frac{d}{dt} \mathbf{J}}.$$

We hebben reeds aangenomen, dat in den tijd, waarin het gemiddelde genomen wordt,  $\mathbf{J}$  niet merkbaar verandert, zoodat we rechts het gemiddelde door  $d/dt \mathbf{J}$  kunnen vervangen. Links kunnen we voor  $\mathbf{M}$  de uitdrukking (20) in vectorschrijfwijze nemen.

$$-\frac{d}{dt} (P\mathbf{H}) + [\boldsymbol{\mu}\mathbf{H}] = \frac{d}{dt} \mathbf{J} \quad (21)$$

Door deze formule beschrijft men dus het gedrag van het moment van het atoom. Is het veld door een ander atoom teweeggebracht, dan kunnen we  $\mathbf{H}$  door (15) in de constanten van het tweede atoom uitdrukken, en deze vergelijkingen ook op het tweede atoom toepassen:

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dt} (P_1\mathbf{H}_1) + [\boldsymbol{\mu}_1\mathbf{H}_1] &= \frac{d}{dt} \mathbf{J}_1 \\ H_{1x} &= A_{11}\mu_{x2} + A_{12}\mu_{y2} + A_{13}\mu_{z2} \text{ enz.} \\ -\frac{d}{dt} (P_2\mathbf{H}_2) + [\boldsymbol{\mu}_2\mathbf{H}_2] &= \frac{d}{dt} \mathbf{J}_2 \\ H_{2x} &= A_{11}\mu_{x1} + A_{12}\mu_{y1} + A_{13}\mu_{z1} \text{ enz.} \end{aligned} \quad (21a)$$

Voegen we daarbij nog de gemiddelde stelling (6) voor elk atoom

$$\begin{aligned} \overline{K}_{x1} &= \mu_{x1} \frac{\partial H_{x1}}{\partial X_1} + \mu_{y1} \frac{\partial H_{y1}}{\partial X_1} + \mu_{z1} \frac{\partial H_{z1}}{\partial X_1} = \frac{d}{dt} \overline{G}_1 \\ \overline{K}_{x2} &= \mu_{x2} \frac{\partial H_{x2}}{\partial X_2} + \mu_{y2} \frac{\partial H_{y2}}{\partial X_2} + \mu_{z2} \frac{\partial H_{z2}}{\partial X_2} = \frac{d}{dt} \overline{G}_2 \text{ enz.,} \end{aligned}$$

dan is de gemiddelde beweging van een systeem van twee atomen geheel bepaald.



Daar we overal de gemiddelden hebben genomen, is als 't ware met de individualiteit van de electronen afgedaan. De formules geven geen uitsluitel over de banen van de aparte electronen, noch van de veranderingen, die de verschillende grootheden  $J$ ,  $\mu$ ,  $\sum \frac{e}{c} x^2$  in den tijd ondergaan, waarin wij het gemiddelde nemen.

Wij kunnen nu aan (21) een anderen vorm geven. Daartoe onderzoeken wij, of in een gegeven uitwendig veld de volgende beweging mogelijk is:

Wij denken ons in het atoom een bewegelijk hulpassenstelsel aangebracht  $X_o, Y_o, Z_o$  met den oorsprong in de kern, ten opzichte waarvan de electronen bewegingen mogen beschrijven, die in een rustend assenstelsel bij afwezigheid van een uitwendig veld mogelijk zijn. Indien nu dat assenstelsel, met vasten oorsprong, zich verder willekeurig beweegt, kunnen we die beweging elk oogenblik beschouwen als een rotatie  $\mathbf{o}$ , een in richting en grootte veranderlijk vector. De vraag is nu: is een dergelijke beweging van het atoom mogelijk en aan welke voorwaarde moet dan  $\mathbf{o}$  voldoen?

Het verband tusschen de snelheid van een electron  $\mathbf{v}_i$  en de snelheid in het hulpstelsel  $\mathbf{v}_{oi}$  is dus

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_{oi} + [\mathbf{or}_i] \quad (22)$$

waarbij  $r_i$  de vector van den oorsprong naar het electron is. Wij voeren verder de hulpgrootheid  $\mathbf{J}_o$  in.

$$\mathbf{J}_o = \sum m [\mathbf{r}_i \mathbf{v}_{oi}].$$

$\mathbf{J}_o$  is een vector, die in het assenstelsel  $X_o Y_o Z_o$  constant is.

Wij kunnen nu  $\mathbf{J}$ , het moment van hoeveelheid van beweging, en  $d/dt \mathbf{J}$  met behulp van  $\mathbf{J}_o$  uitdrukken, en dan  $\mathbf{J}_o$  elimineeren. Immers is

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \sum m [\mathbf{r}_i \mathbf{v}_i] \\ &= \mathbf{J}_o + \sum m [\mathbf{r}_i [\mathbf{or}_i]] \\ &= \mathbf{J}_o + \sum m \mathbf{or}_i^2 - \sum m \mathbf{r}_i (\mathbf{or}_i). \end{aligned}$$

Nemen we nu weer het gemiddelde, dan worden ( $\mathbf{o}$  langzaam veranderend)

$$\begin{aligned} \overline{\sum m \mathbf{or}_i^2} &= 3\mathbf{o} \overline{\sum m x_i^2} \\ \overline{\sum m \mathbf{r}_i (\mathbf{or}_i)} &= \mathbf{o} \overline{\sum m x_i^2} \end{aligned}$$

zoodat, na nog  $P$  te hebben ingevoerd, we voor  $\mathbf{J}$  vinden:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_0 + \frac{2mc}{e} P\mathbf{o} \quad (23)$$

Om nu de tijdsafgeleide van  $\mathbf{J}$  te berekenen, bedenken we, dat  $\mathbf{J}_0$  alleen verandert door de beweging van  $X_0, Y_0, Z_0$ , dus

$$\frac{d\mathbf{J}_0}{dt} = [\mathbf{o}\mathbf{J}_0].$$

We vinden dan

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = [\mathbf{o}\mathbf{J}_0] + \frac{2mc}{e} \frac{d}{dt} (P\mathbf{o})$$

Elimineeren we  $\mathbf{J}_0$  met behulp van (23), dan

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = [\mathbf{o}\mathbf{J}] + \frac{2mc}{e} \frac{d}{dt} (P\mathbf{o}) \quad (24)$$

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = \frac{2mc}{e} [\mathbf{o}\boldsymbol{\mu}] + \frac{2mc}{e} \frac{d}{dt} (P\mathbf{o}) \quad (24a)$$

Aan den eisch, die wij gesteld hebben, n.m., dat  $\mathbf{J}$  niet merkbaar verandert in den tijd, die de electronen voor een omloop noodig hebben, wordt dus voldaan, door  $\mathbf{o}$  klein genoeg te nemen.

Men ziet nu, dat aan (21)

$$\mathbf{M} = -\frac{d}{dt}(P\mathbf{H}) + [\boldsymbol{\mu}\mathbf{H}] = \frac{d\mathbf{J}}{dt}$$

wordt voldaan door

$$\mathbf{o} = -\frac{e}{2mc} \mathbf{H} \quad (25)$$

te stellen.

Dit is het theorema van LARMOR, dat wij hier in een, van de gewone formulering afwijkenden vorm hebben gevonden:

*Het atoom beweegt zich, gemiddeld genomen, zoo, dat zijn beweging t.o.v. een assenstelsel, waarvan de oogenblikkelijke rotatie door (25) wordt gegeven, die is van een atoom buiten invloed van een electromagnetisch veld. De stelling geldt, wanneer  $\mathbf{H}$  constant of langzaam veranderlijk is. Wordt het veld door een ander atoom te weeggebracht, dan mag de stelling voor het gemiddelde veld worden toegepast, indien een der atomen bolsymmetrie bezit of beide*

atomen veel electronen hebben. Bovendien is voor de afleiding noodzakelijk, dat  $\mathbf{J}$  niet merkbaar verandert in den tijd, dat de electronen hun omloop volbrengen. Daar deze verandering door de rotatie  $\mathbf{o}$  wordt veroorzaakt, komt deze voorwaarde neer op  $\mathbf{o} \ll \omega$ , als  $\omega$  de gemiddelde hoeksnelheid is, waarmee de electronen zich om de kern bewegen. Deze voorwaarde legt dus een bovenste grens op aan  $H$ . Het is interessant, onze afleiding te vergelijken met de gewone <sup>3)</sup>. Deze geldt alleen voor een constant magneetveld, maar dan ook voor de oogenblikkelijke beweging van het atoom, niet alleen voor de gemiddelde. Men moet dan echter de middelpuntvliedende krachten door de rotatie veroorzaakt, verwaarloozen. Bij onze afleiding, waar wij met de gemiddelde waarden werken, is dit niet noodig.

*Opmerking.* Wij spreken voortdurend van een magnetisch veld, omdat  $\mathbf{H}$  alleen in de formules voorkomt; het electriche veld treedt niet op in de einduitkomst, al bestaat dit steeds bij een veranderlijk magnetisch veld.

Wij hebben hier niet speciaal rekening mee behoeven te houden, omdat wij van het begin af het electromagnetisch veld als een geheel hebben beschouwd. In de formule (1), ons uitgangspunt, zijn de electriche en magnetische veldsterkten niet meer te herkennen. Ons resultaat hangt hiermede samen, dat  $\phi$  uit de formules weg valt, en  $\mathbf{h}$  alleen van  $\mathbf{a}$ , niet van  $\phi$  afhangt.

De toepassingen van het theorema zijn bekend, wij willen ze even opnoemen, voor zoo ver we ze later noodig zullen hebben.

Bij een constant veld (of het constante, gemiddelde veld van een ander atoom) is dus  $\mathbf{o}$  ook constant. Het moment  $\mu$  stelt zich niet in, zooals een magnetische dipool of een kringstroompje zou doen, maar beschrijft een cirkelkegel om  $\mathbf{o}$ . Men kan het verschil ook zoo aangeven: Een magnetisch atoom is een roteerend mechanisch systeem, dit volvoert onder de werking van een koppel een praecessiebeweging; bij een kringstroompje in een materieelen draad werken de krachten op een stilstaande groote massa.

De uitdrukking (23) kunnen wij ook schrijven

$$\mu = \mu_0 - \frac{e}{2mc} PH$$

$$= \mu_0 - \frac{e^2}{2c^2m} \mathbf{H} \overline{\sum x_i^2}.$$

Dit is de bekende uitdrukking voor de diamagnetische vermindering van het magnetisch moment. De formule geldt, zooals we zagen, ook voor een veranderlijk veld. Laten we dus  $\mathbf{H}$  tot nul naderen, dan wordt  $\mu = \mu_0$  en  $\mathbf{J} = \mathbf{J}_0$ . Deze hulpgrootheden zijn de momenten van het atoom bij afwezigheid van het uitwendig veld.

§ 9 — *De momentenstelling voor twee atomen.* Zooals we in § 5 uiteenzetten, zijn wij uitgegaan van

$$\mathbf{K} = \frac{d}{dt} \mathbf{G}, \quad \mathbf{M} = \frac{d}{dt} \mathbf{J},$$

voor een atoom, waarna wij  $\mathbf{K}$  en  $\mathbf{M}$  in de constanten van het andere atoom uitdrukten. De tweede vergelijking bleek identiek te zijn met de stelling van Larmor. Wij zullen nu nog eens terugkeeren tot de uitkomsten in § 3 verkregen.

Hoewel wij het niet uitdrukkelijk gezegd hebben, is de beweging van de kernen zelf op den achtergrond gebleven. In wat nu volgt, zullen we ons de kernen in rust denken. Deze vereenvoudiging is niet noodzakelijk, zij vermindert echter het rekenwerk, terwijl, dat, wat we hier willen zeggen, toch even duidelijk voor den dag komt.

Wanneer wij dus nu de twee atomen als een geheel beschouwen, moet voor dit systeem de momentenstelling gelden:

$$\mathbf{J} = \sum_i \mu_i [\mathbf{r}_i \mathbf{v}_i] + \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \left\{ \frac{[\mathbf{r}_i \mathbf{v}_j]}{r_{ij}} + \frac{[\mathbf{r}_j \mathbf{r}_i] (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right\} = \text{Const.} \quad (9)$$

Wij kunnen deze uitdrukking in drie deelen splitsen, n.m. een, waarin  $i$  en  $j$  op de electronen van het eerste atoom betrekking hebben,  $\mathbf{J}_1$ , een, waarin  $i$  en  $j$  op de electronen van het tweede atoom betrekking hebben,  $\mathbf{J}_2$  en de rest, die wij  $\mathbf{J}_{12}$  zullen noemen.

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 + \mathbf{J}_{12} = \text{Const.}$$

Nu zijn  $\mathbf{J}_1$  en  $\mathbf{J}_2$  met groote benadering de gewone mechanische momenten van hoeveelheid van beweging van de atomen:

$$\mathbf{J} = \sum m_i [\mathbf{r}_i \mathbf{v}_i],$$

en, daar we de kernen in rust denken, is deze vorm onafhankelijk van de keuze van den oorsprong, wegens

$$\sum m_i \mathbf{v}_i = 0.$$

$\mathbf{J}_1$  en  $\mathbf{J}_2$  zijn dus dezelfde grootheden, die wij in de vorige paragrafen hebben gebruikt, de momenten voor het zwaartepunt als oorsprong berekend.

Het is nu niet moeilijk in te zien, dat  $J_{12}$  veel kleiner is dan  $J_1$  of  $J_2$ . Wat in § 4 voor een atoom werd beweed, geldt zeker ook voor twee atomen. De waarde van  $J$  zal er weinig door worden beïnvloed, wanneer wij,  $J_{12}$  berekenende, de verschillende eigenschappen van atomen, in de vorige paragraaf gebruikt, toepassen. Deze eigenschappen berusten immers voor een groot gedeelte daarop, dat voor een atoom buiten invloed van een magnetisch veld

$$\mathbf{J} = \sum m_i [\mathbf{r}_i \mathbf{v}_i] = \text{Const.} \quad (9a)$$

werd gesteld, inplaats van de volledige uitdrukking (9). Daar nu  $J_{12}$  juist met de wisselwerking van twee atomen samenhangt, hebben we hier gerechtvaardigd, dat men de magnetische wisselwerking van twee atomen kan onderzoeken, en tegelijkertijd de magnetische wisselwerking tusschen de electronen van een atoom kan verwaarloozen, d.w.z., voor een atoom (9) vervangen door (9a).

Wij zullen nu  $J_{12}$  niet direct berekenen, maar haar waarde uit de uitkomsten van de vorige paragraaf afleiden.

De  $Z$ -as leggen we nu in de richting van de verbindingslijn der kernen. De uitwendige krachten, die op de kernen moeten aangrijpen, om ze op hun plaats te houden, hebben een moment, dat loodrecht op de verbindingslijn staat, en dus geen  $Z$ -component heeft. In dit geval moet dan slechts gelden:

$$J_z = J_{1z} + J_{2z} + J_{12z} = \text{Const.}$$

Wij bezien nu de formules (21a), die de beweging van twee atomen beschrijven. Noemen wij  $R$  de afstand der kernen, dan volgt uit de definitie van de grootheden  $A$

$$A_{11} = -\frac{1}{R^3}, \quad A_{22} = -\frac{1}{R^3}, \quad A_{33} = \frac{2}{R^3}$$

$$A_{12} = A_{23} = A_{31} = 0$$

en

$$H_{x1} = -\frac{I}{R^3} \mu_{x2}$$

$$H_{y1} = -\frac{I}{R^3} \mu_{y2},$$

terwijl de  $Z$ -componenten van de overige vergelijkingen van (21a) worden:

$$-\frac{d}{dt} (P_1 H_{z1}) - \frac{I}{R^3} (\mu_{x1} \mu_{y2} - \mu_{y1} \mu_{x2}) = \frac{dJ_{1z}}{dt}$$

$$-\frac{d}{dt} (P_2 H_{z2}) - \frac{I}{R^3} (\mu_{x2} \mu_{y1} - \mu_{y2} \mu_{x1}) = \frac{dJ_{2z}}{dt}.$$

Door deze vergelijkingen op te tellen, en te integreren, vindt men onmiddellijk:

$$J_{1z} + J_{2z} + P_1 H_{z1} + P_2 H_{z2} = \text{Const.} \quad (26)$$

of

$$J_{1z} = P_1 H_{z1} + P_2 H_{z2}$$

Voert men met behulp van (23) en (25) de hulpgrootheden  $J_o$  in, dan wordt (26)

$$J_{o1z} + J_{o2z} = \text{Const} \quad (26a)$$

Om nu de beteekenis van (26) en (26a) nader in te zien, denken wij ons de twee atomen eerst op oneindig grooten afstand van elkaar. Ze hebben dan de momenten  $J_{o1}$  en  $J_{o2}$  (den index  $z$  laten wij nu weg). Brengen wij ze naar elkaar toe, in de richting van hun verbindingslijn, dan moet het totale moment langs die lijn constant blijven, dus:

$$J_{o1} + J_{o2} = J_1 + J_2 + P_1 H_1 + P_2 H_2.$$

Dit is alleen mogelijk, als de momenten van de twee atomen veranderlijk zijn. *Inderdaad ondergaat elk atoom in het veld van het andere een Larmorpraecessie, die het magnetisch en mechanisch moment verandert (23), en deze veranderingen zijn zoo, dat het electromagnetisch moment van beide atomen het zelfde blijft.* Dit is dus de eigenlijke beteekenis van de diamagnetische vermindering van het magnetisch moment.

§ 10 — *De energiestelling voor twee atomen.* Na de momentenstelling willen we nog de energieintegraal:

$$E = \sum_i \mu_i c^2 + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2} \left\{ \frac{(\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j)}{r_{ij}} + \frac{(\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_i) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^3} \right\} + \\ + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{r_{ij}} = \text{Const} \quad (10)$$

voor twee atomen opschrijven.

Het sommatieteecken  $\sum_{ij}$  is hier door  $\sum_i \sum_j$  vervangen, wat de factor 1/2 tengevolge heeft.

We deelen nu den vorm (10) in vier deelen. Een, waar  $i$  en  $j$  op electronen van het eerste atoom betrekking hebben, een, waar  $i$  en  $j$  op het tweede betrekking hebben, een, waar  $i$  het eerste,  $j$  het tweede doorloopt, en een, waar  $i$  het tweede,  $j$  het eerste doorloopt.

De eerste twee termen, die we  $E_1$  en  $E_2$  noemen, zijn de eigen energieën van de twee atomen.

In het derde gedeelte splitsen we de termen aldus

$$\frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{c^2 r_{ij}} (\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{r_{ij}} \\ - \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j (\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j)}{2c^2 r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{e_i e_j}{2c^2 r_{ij}^3} (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_i) (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j),$$

$i$  duidt de electronen van het eerste atoom aan,  $j$  die van het tweede.

We voeren nu in

$$\mathbf{a}_i = \sum_j \frac{e_j \mathbf{v}_j}{c r_{ij}} \quad \Phi_i = \sum_j \frac{e_j}{r_{ij}} \\ \Psi_i = \sum_j \frac{e_j}{c} r_{ij}$$

Dan is

$$\frac{\partial \Psi_i}{\partial t} = - \sum_j \frac{e_j (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{c r_{ij}}, \\ \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \Psi_i}{\partial t} = - \sum_j \frac{e_j v_{jx}}{c r_{ij}} + \sum_j \frac{e_j (\mathbf{r}_{ij} \mathbf{v}_j)}{c r_{ij}^3} (x_i - x_j),$$

en kan de bedoelde vorm worden geschreven:

$$\frac{1}{2} \sum_i \frac{e_i}{c} (\mathbf{v}_i \mathbf{a}_i) + \frac{1}{2} \sum_i e_i \Phi_i + \\ + \frac{1}{2} \sum_i \frac{e_i}{2c} \left[ v_{xi} \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\Psi}_i + v_{yi} \frac{\partial}{\partial y_i} \bar{\Psi}_i + v_{zi} \frac{\partial}{\partial z_i} \bar{\Psi}_i \right].$$

$\mathbf{a}$  is de vectorpotentiaal, door het tweede atoom voortgebracht,  $\Phi$  de eerste term van  $\phi$ , de scalaire potentiaal. We kunnen nu de drie functies ontwikkelen in den omtrek van de kern, als in § 6.

Wanneer we de indices  $o$  weglaten, en dus

$$\left( \frac{\partial a_x}{\partial x} \right)_o = \frac{\partial a_x}{\partial X_1}$$

schrijven, dan vinden we, inachtnemende, dat

$$\sum e_i = 0 \quad \sum e_i \mathbf{r}_i = 0 \quad \sum e_i \mathbf{v}_i = 0,$$

voor de uitdrukking

$$\frac{1}{2} \left[ \sum_i \frac{e_i}{c} v_{xi} \left\{ x_i \frac{\partial a_x}{\partial X_1} + y_i \frac{\partial a_x}{\partial Y_1} + z_i \frac{\partial a_x}{\partial Z_1} \right\} + \right. \\ + \sum_i \frac{e_i}{c} v_{yi} \left\{ x_i \frac{\partial a_y}{\partial X_1} + y_i \frac{\partial a_y}{\partial Y_1} + z_i \frac{\partial a_y}{\partial Z_1} \right\} + \\ + \sum_i \frac{e_i}{c} v_{zi} \left\{ x_i \frac{\partial a_z}{\partial X_1} + y_i \frac{\partial a_z}{\partial Y_1} + z_i \frac{\partial a_z}{\partial Z_1} \right\} + \\ \left. + 0 + \right. \\ + \frac{1}{2} \left[ \sum_i \frac{e_i}{2c} v_{xi} \left\{ x_i \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial X_1^2} + y_i \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial X_1 \partial Y_1} + z_i \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial X_1 \partial Z_1} \right\} + \right. \\ + \sum_i \frac{e_i}{2c} v_{yi} \left\{ x_i \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial X_1 \partial Y_1} + y_i \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial Y_1^2} + z_i \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial Y_1 \partial Z_1} \right\} + \\ \left. + \sum_i \frac{e_i}{2c} v_{zi} \left\{ x_i \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial X_1 \partial Z_1} + y_i \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial Y_1 \partial Z_1} + z_i \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial Z_1^2} \right\} \right]$$

Ook nu nemen we het gemiddelde over de sommaties van het eerste en het tweede atoom apart, als in § 7. De termen met  $\bar{\Psi}$  worden nul, er blijft over:



$$\frac{1}{2} \left[ \mu_{x1} \left( \frac{\partial \bar{a}_z}{\partial Y_1} - \frac{\partial \bar{a}_y}{\partial Z_1} \right) + \mu_{y1} \left( \frac{\partial \bar{a}_x}{\partial Z_1} - \frac{\partial \bar{a}_z}{\partial X_1} \right) + \right. \\ \left. + \mu_{z1} \left( \frac{\partial \bar{a}_y}{\partial X_1} - \frac{\partial \bar{a}_x}{\partial Y_1} \right) \right] = \\ \frac{1}{2} (\mu_{x1} H_{x1} + \mu_{y1} H_{y1} + \mu_{z1} H_{z1}).$$

Drukken we nu  $\mathbf{H}_1$  uit in de momenten van het tweede atoom:

$$H_{x1} = A_{11} \mu_{x2} + A_{12} \mu_{y2} + A_{13} \mu_{z2},$$

dan krijgen we een vorm, symmetrisch in  $\mu_1$  en  $\mu_2$ , zoodat

$$(\mu_1 \mathbf{H}_1) = (\mu_2 \mathbf{H}_2). \quad (27)$$

Wij kunnen voor deze uitdrukking ( $\mu \mathbf{H}$ ) schrijven.

Het vierde stuk van de wederzijdsche energie, waar  $i$  de electronen van het tweede atoom aanwijst,  $j$  die van het eerste, geeft dus dezelfde uitkomst als de derde.

De energievergelijking wordt dus

$$E_1 + E_2 + (\mu \mathbf{H}) = \text{Const} \quad (28)$$

Wij zullen nu de waarden van  $E_1$  en  $E_2$  nader bezien. Evenals we voor de momenten van een atoom een benaderde vorm hebben gebruikt, zullen we ook hier de uitdrukking (10) voor een atoom vervangen door

$$E = \sum \frac{1}{2} m_i v_i^2 + \sum_{ij} \frac{e_i e_j}{r_{ij}}.$$

De energie voor een atoom in een magnetisch veld is met de stelling van Larmor gemakkelijk uit te drukken in de hulpgrootheid

$$E_o = \sum \frac{1}{2} m_i v_{io}^2 + \sum_{ij} \frac{e_i e_j}{r_{ij}},$$

die de energie van het atoom bij afwezigheid van het uitwendige veld voorstelt. Vervangt men in de uitdrukking van  $E$ ,  $\mathbf{v}_i$  door

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_{io} + [\mathbf{0} \mathbf{r}_i], \quad (22)$$

dan volgt na een korte herleiding:

$$E = E_o + m (\mathbf{0} [\mathbf{r}_i \mathbf{v}_{io}]) + \frac{1}{2} m \omega^2 r_i^2 - \frac{1}{2} m (\mathbf{0} \mathbf{r}_i)^2.$$

Wij nemen het gemiddelde, en vinden

$$\bar{E} = E_o + (\mathbf{o} \mathbf{J}_o) + \frac{mc}{e} P o^2. \quad (29)$$

of, als we met (23)  $\mathbf{J}$  invoeren, verder  $\mathbf{J}$  door  $\boldsymbol{\mu}$  (16),  $\mathbf{o}$  door  $\mathbf{H}$  vervangen (25)

$$\bar{E} = E_o - (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}) - \frac{e}{4mc} P H^2. \quad (29a)$$

De totale energie van het systeem van twee atomen kan dan worden geschreven

$$E_{o1} - (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}) - \frac{e}{4mc} P_1 H_1^2 + E_{o2} - (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}) - \frac{e}{4mc} P_2 H_2^2 + (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}) = \text{Const.} \quad (30)$$

§ 11 — *Slotbeschouwingen.* Wij merkten in de inleiding op, dat we ons onderzoek verder zouden uitstrekken dan voor ons doel strict noodig was. Wij komen hierop nu terug.

Wij onderzochten de wisselwerking van twee atomen onder de eenvoudige onderstellingen (11), (12), (13), de onderstelling, dat òf beide atomen veel electronen hadden, òf een der atomen bolsymmetrie bezat, en, dat het moment van een atoom gedurende den omloopstijd van de electronen niet noemenswaard veranderde. Deze onderstellingen stelden ons in staat, steeds met de gemiddelde waarden te werken. De uitdrukkingen voor de gemiddelde kracht en het gemiddelde koppel, dat een atoom op het andere uitoefent, waren gemakkelijk te interpreteren, de laatste leidde ons tot het theorema van LARMOR.

Hieruit leidden we op de gewone manier eigenschappen voor het moment:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_o + \frac{2mc}{e} P \mathbf{o} = \mathbf{J}_o - P \mathbf{H} \quad (23),$$

en voor de energie af:

$$E = E_o - (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}) - \frac{e}{4mc} P H^2 \quad (29a)$$

De vergelijking (23) kreeg een nieuwe beteekenis, wanneer wij de twee atomen als een systeem beschouwden en behalve de mechanische momenten ook de electromagnetische van het veld beschouwden. Al onze uitkomsten waren ook bruikbaar, waar het den invloed van een constant of langzaam veranderlijk veld op een atoom betrof.

Was het dus voor een logische ontwikkeling van ons onderwerp noodig, de formules in den vorm op te schrijven, die we gebruikt hebben, practisch ligt de zaak anders, en kan bijv. de term  $PH$  in (23) wel worden verwaarloosd. In § 9 merkten we reeds op, dat  $J_{12}$  klein is t.o.v.  $J_1$  en  $J_2$ . Daar nu

$$J_{12} = P_1 H_1 + P_2 H_2,$$

moet hetzelfde gelden voor  $P_1 H_1$  en  $P_2 H_2$  afzonderlijk. Wij willen echter de verschillende orden van grootte aan een eenvoudig getallenvoorbeeld nagaan:

Wij kiezen een waterstofatoom in zijn stabiele bewegingswijze in een magnetisch veld van 1 Gauss. Voor het atoom geldt:

$$r = 0,5 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$v = 2 \times 10^8 \text{ cm/sec}$$

De grootheid  $e/2mc$ , die zooveel in onze formules voorkomt, is

$$\frac{e}{2mc} = 10^7 \text{ (in electrostatische C. G. S. eenheden)}. \text{ We willen}$$

eerst onderzoeken, of aan de voorwaarde

$$0 \ll \omega$$

is voldaan. Deze drukte uit, dat in den tijd van den omloop der electronen het moment niet noemenswaard veranderde (pag. 27) Nu is

$$\omega = \frac{v}{r} = 4 \times 10^{16} (2\pi \cdot \text{sec})^{-1}$$

$$0 = -\frac{e}{2mc} H = -10^7 (2\pi \cdot \text{sec})^{-1}$$

Aan de voorwaarde is goed voldaan, Zelfs voor tamelijk sterke velden behouden onze ontwikkelingen hun kracht.

Vergelijken wij verder  $J$  met  $PH$ , of  $mv$  met  $e/2c r^2 H$ , dan is het voldoende,  $v$  en  $e/2mc rH$  te beschouwen. Nu is

$$v = 2 \times 10^8 \text{ cm/sec.}$$

$$\frac{e}{2mc} rH = 1/2 \cdot 10^{-1} \text{ cm/sec.}$$

zoodat de verhouding  $1 : 10^{-9}$  is. Wij mogen bij onze toepassingen dus

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_0$$

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_0$$

stellen. De uitdrukking (29a) kan eveneens bij benadering worden geschreven

$$E = E_0 - (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}),$$

en de energie van twee atomen

$$E = E_{o1} - (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}) + E_{o2} - (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}) + (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}) = E_{o1} + E_{o2} - (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}).$$

Deze laatste uitdrukking willen we nog voor een eenvoudig geval verifiëren met de energiebalans. Wij hadden dit ook met de strengere uitdrukking (30) kunnen doen, maar de berekening is dan wat omslachtig.

Denken we ons een atoom vastgehouden, en het andere er naar toe bewogen. De twee momenten mogen de richting van de verbindinglijn hebben. De kracht, die op het tweede atoom wordt uitgeoefend, is

$$K_x = \mu_x \frac{\partial}{\partial x} H_x + \mu_y \frac{\partial}{\partial x} H_y + \mu_z \frac{\partial}{\partial x} H_z, \text{ enz.} \quad (19)$$

en, daar  $\boldsymbol{\mu}$  in de richting van  $\mathbf{H}$  ligt, en dus niet alleen in grootte, maar ook in richting constant is:

$$\mathbf{K} = \text{grad } (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}).$$

De kracht, die we zelf moeten uitoefenen, heeft het tegengestelde teeken, en de arbeid, noodig, om het tweede atoom een afstand  $\Delta \mathbf{s}$  te verplaatsen, is

$$-(\mathbf{K} \Delta \mathbf{s}) = -\Delta (\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}).$$

Inderdaad is deze arbeid gelijk aan  $\Delta E$ , daar  $E_{o1}$  en  $E_{o2}$  constanten zijn.

Dit illustreert nogmaals, dat men bij de beschouwing van deze onderwerpen steeds electromagnetisch, niet mechanisch moet denken. Doet men dit, dan kan men redeneeren: Ieder atoom

verandert zijn energie, als het in een magnetisch veld wordt gebracht, met  $-(\mu\mathbf{H})$ , zoodat de totale energie

$$E_{o1} + E_{o1} - 2(\mu\mathbf{H})$$

is. Men komt dan tot een paradox, omdat men vergeet, dat de energie van een stelsel geladen deeltjes niet door  $\sum \frac{1}{2}mv^2 + E_{\text{pot}}$  wordt uitgedrukt, omdat de energieën van de velden, die bij elk deeltje behooren, niet mogen worden opgeteld. Voor het moment van hoeveelheid van beweging geldt hetzelfde, zooals we zagen; dit feit komt echter niet zoo scherp uit, omdat men de desbetreffende termen ( $P\mathbf{H}$ ) meestal verwaarloost.

Resumeerend kunnen we dus zeggen:

Een magnetisch atoom verwekt gemiddeld hetzelfde veld als een magnetische dipool, en ondervindt ook dezelfde kracht van een magnetisch veld, als een dipool. Dit magnetisch veld kan ook het gemiddelde veld van een ander atoom zijn.

Het moment stelt zich echter in een magnetisch veld niet in, maar zijn as volvoert een rotatie

$$\mathbf{o} = -\frac{e}{2mc} \mathbf{H},$$

terwijl zijn grootte niet verandert. Waar wij in het vervolg gebruik maken van deze resultaten, zullen wij nagaan, of aan de veronderstellingen, waarbij zij zijn verkregen, in die gevallen is voldaan.

## HOOFDSTUK II

### DE SYMMETRIE VAN HET KRISTALROOSTER

§ 1 — *Het klipzoutrooster.* Nadat we de eigenschappen van magnetische electronenstelsels hebben nagegaan, willen wij nu met ons eigenlijk onderzoek aanvangen. In dit hoofdstuk willen we slechts onderzoeken, welke standen van de magnetische momentassen in het klipzoutkristal met de symmetrie van het rooster

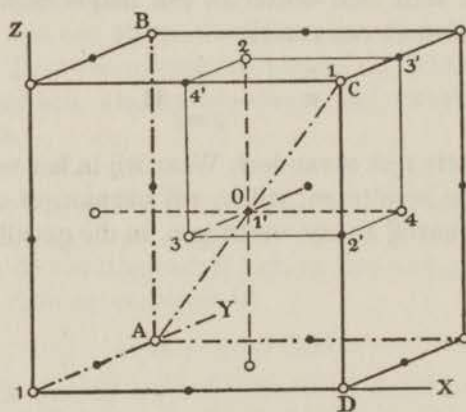


Fig. 1

in overeenstemming zijn. Wij willen daarbij aannemen, dat de momentassen een vasten stand in het kristal hebben. Later zal blijken, dat het ook mogelijk is, dat de assen cirkelkegels beschrijven.

De cel van het rooster bestaat uit een cubus, waarvan de hoekpunten en de middens der zijvlakken met een atoomsoort zijn bezet — wij zullen deze soort de natriumatomen noemen —, terwijl de andere atomen — de chlooratomen — de middens der ribben

en het midden van den cubus innemen. In de eenheidscel komen dus vier atomen van elke soort voor (fig 1). De vier basispunten, waarin zich natriumatomen bevinden, duiden wij aan met 1, 2, 3, 4, de vier andere met 1', 2', 3', 4'.

Het kristal, als geheel genomen, heeft een magnetisch moment nul. Het ligt nu voor de hand, aan de vier natriumatomen momenten in de vier tetraederrichtingen te geven, welke wij  $a, b, c, d$  noemen of in de omgekeerde richtingen  $-a, -b, -c, -d$ . (fig. 2). Ook aan de vier chlooratomen zullen we deze richtingen geven. Het magnetisch moment van de eenheidscel is dan inderdaad nul.

Wij moeten onderscheid maken tusschen het rooster, waarin zich alleen de 4 natriumatomen bevinden (zonder momenten), en dat, waarin die momenten zijn aangebracht. Het eerste rooster zullen wij *tralie* noemen, voor het tweede den naam *rooster* behouden.

Wij willen ons nu eerst bepalen tot de natriumatomen. Zijn de mogelijke constellaties herkend, dan kan worden nagegaan, hoe de chlooratomen moeten worden geplaatst, om de symmetrie van de constellatie niet te verstoren.

Het aantal manieren, waarop de richtingen  $a, b, c, d$  over de punten 1, 2, 3, 4, kunnen worden verdeeld, is  $4! = 24$ . Een even groot aantal krijgen we, wanneer we  $-a, -b, -c, -d$  verdeelen. We behoeven echter slechts de eerste 24 combinaties te onderzoeken, de uitkomsten zullen evenzeer voor de andere 24 gelden.

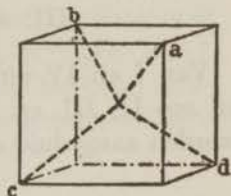


Fig 2

§ 2 — *Translaties van het rooster.* De 24 constellaties leveren echter geen 24 verschillende kristalroosters. We merken daartoe eerst op, dat de tralie met zichzelf tot dekking kan worden gebracht door het langs een der lijnen 1—2, 1—3, 1—4 te verschuiven. Wij vergelijken nu de constellatie, waarbij zich in de punten 1 het moment  $a$ , in 2 het moment  $b$ , in 3  $c$  en in 4  $d$  bevindt, kort geschreven  $abcd$ , met de constellatie  $badc$ . Deze twee kunnen nu tot dekking worden gebracht, door de tweede constellatie langs de richting 1—2 te verschuiven. Immers, haar punt 1 komt op 2 van het eerste rooster, haar punt 2 op 1 van het eerste rooster, en op dezelfde manier verwisselen 3 en 4.

Op dezelfde wijze ziet men in, dat  $cdab$  identiek is met  $abcd$ , door het rooster van 1 naar 3 te verschuiven, waarbij 1 en 3, 2 en 4 verwisselen. Met de derde translatie, 1—4, hangt samen, dat ook  $dcb$  hetzelfde rooster vormt.

Daar nu telkens 4 combinaties een zelfde rooster voorstellen, daalt het aantal tot 6 voor de positieve richtingen  $a, b, c, d$ , en nog eens 6 voor  $-a, -b, -c, -d$ . We willen deze 6 roosters opschrijven. Volgens het bovenstaande is het steeds mogelijk, het moment in het punt 1 de richting  $a$  te geven.

I: $abcd$	IV: $abdc$
II: $acdb$	V: $adcb$
III: $adbc$	VI: $acbd$

Van I en IV uitgaande, heb ik de letters cyclisch verwisseld, en zoo II, III, en V, VI gevonden. De 6 andere roosters mogen worden aangeduid door  $-I, -II, -III, -IV, -V$  en  $-VI$ .

§ 3 — *De drietallige assen van het rooster.* Een tweede dekoperatie van de tralie is de wenteling van  $120^\circ$  om een lichaamsdiagonaal van de cel. We willen nu nagaan, wat dit ons over de mogelijke modellen kan leeren. We onderzoeken eerst die as, welke de richting  $a$  heeft. De lijn  $AC$  (fig. 1) is zoo'n as voor de tralie. Na een draaiing van  $120^\circ$  om  $AC$  komen de atomen, die zich op een plaats 1 bevonden weer op een plaats 1 terecht; die, welke zich op een plaats 2 bevonden, komen op een plaats 3 terecht, die van 3 in 4, die van 4 in 2. De momenten veranderen ook van richting. Een atoom met asrichting  $a$  houdt deze richting, de asrichting  $b$  wordt  $c$ ,  $c$  wordt  $d$ ,  $d$  eindelijk wordt  $b$ . De as  $AC$  zal een symmetrieas voor het model zijn, als het door die draaiing met zichzelf tot dekking wordt gebracht.

Voorbeeld I  $abcd$ .

Voeren wij hiervoor de draaiing uit, dan komen de atomen met asrichtingen  $a, b, c, d$ ,

van de plaatsen 1, 2, 3, 4,

op de plaatsen 1, 3, 4, 2,

met de asrichtingen  $a, c, d, b$ .

Rangschikken wij de momenten in de volgorde 1, 2, 3, 4, dan



vinden wij  $abcd$  terug. De as  $AC$  is inderdaad een drietallige as van het model I.

Vervolgens neemt men nu een diagonaal van den cubus, uit punten 2 gevormd, en wel die, welke de richting  $b$  heeft. Op de zelfde manier bewijst men nu, dat deze as een drietallige symmetrieas is. Ook de lijnen door 3, met richting  $c$ , en door 4, met richting  $d$  zijn symmetrieassen. Het model I heeft dus vier drietallige assen.

De reden, dat I deze symmetrie vertoont, ligt hierin, dat  $b$ ,  $c$ ,  $d$  en 2, 3, 4 in den zelfden zin cyclisch worden verwisseld, zoodat het resultaat gelijk is aan de configuratie, waarvan men is uitgegaan. Nu zijn II en III uit I ontstaan, door in het schema  $b$ ,  $c$ ,  $d$  cyclisch te verwisselen. Men mag dus ook voor II en III verwachten, dat de as  $AC$  een symmetrieas is. Om ons te overtuigen, dat II en III evenals I vier drietallige symmetrieassen hebben, zullen wij voor II die diagonaal van de punten 4 onderzoeken, welke de richting  $b$  heeft.

#### Voorbeeld II $acdb$ .

Dit is het zelfde als  $bdca$  (§ 2). De as 1—1 met richting  $b$  in deze configuratie is de zelfde als de as 4—4 met richting  $b$  in  $acdb$ . Draaien wij nu om die as  $120^\circ$ , dan komen

de atomen met asrichtingen  $b$ ,  $d$ ,  $c$ ,  $a$ ,  
van de plaatsen 1, 2, 3, 4,  
op de plaatsen 1, 3, 4, 2,  
met asrichtingen  $b$ ,  $c$ ,  $a$ ,  $d$ ,  
wat na rangschikking weer  $bdca$  levert.

De drie andere groepeeringsen missen de drietallige assen. Dit hangt hiermee samen, dat IV, V, VI niet uit I door cyclische verwisseling kunnen worden gevonden.

Wij nemen als voorbeeld IV voor de as 1—1 met richting  $a$ .

Dan komen

de atomen met de richtingen  $a$ ,  $b$ ,  $d$ ,  $c$   
van de plaatsen 1, 2, 3, 4  
op de plaatsen 1, 3, 4, 2  
met asrichtingen  $a$ ,  $c$ ,  $b$ ,  $d$ .  
Het resultaat is dus  $adcb$  of V.

Draait men nog eens, dan verkrijgt men VI, en uit VI ontstaat weer IV.  $AC$  is dus hier geen drietallige as.

We zullen deze groep verder buiten beschouwing laten.

§ 4 — *Symmetrievlakken en symmetriecentrum.* Het vlak  $ABCD$  is een symmetrievlak voor de tralie. Bezitten nu de modellen I, II, III, dit symmetrievlak ook?

Bij de spiegeling t. o. v. dat vlak komen de atomen die zich op plaatsen 1 en 2 bevonden, weer op plaatsen 1 en 2 terecht, daarentegen verwisselen de atomen op 3 en 4 van plaats. Evenzoo blijven  $a$  en  $b$  zich zelf gelijk en verwisselen  $c$  en  $d$ .

Voor I leert ons deze spiegeling:

De atomen met asrichtingen  $a, b, c, d$  komen  
van de plaatsen 1, 2, 3, 4  
op de plaatsen 1, 2, 4, 3  
met asrichtingen  $a, b, d, c$ .

Na rangschikking vinden we I terug.

Voor II,  $acdb$ , vinden we na spiegeling, op plaatsen 1, 2, 4, 3 de asrichtingen  $a, d, c, b$ , wat na rangschikking  $a, d, b, c$  levert. Dit is echter de configuratie III.

De configuraties II en III bezitten deze symmetrievlakken niet, zij zijn echter elkaar's spiegelbeeld t. o. v. zoo'n vlak. Zooals uit fig. 4 te zien is waar II is geteekend, vormen de momenten een spiraalachtige structuur, in tegenstelling met I (fig. 3).

Door ten slotte te onderzoeken, of het middelpunt van den cubus een middelpunt van symmetrie is, blijkt, dat I den vorm  $-a, -b, -c, -d$  of  $-I$  aanneemt. Immers, de plaatsen van de atomen veranderen niet van benaming en elke richting gaat in haar tegengestelde over. Een middelpunt van symmetrie missen dus alle groepen, terwijl ons onderzoek ons tevens heeft geleerd, dat de 6 groepen I, II, III,  $-I, -II, -III$  in 2 soorten uiteenvallen, I en  $-I$ , en de vier overige. Als vertegenwoordigers van die twee soorten zullen we I en II nemen. (fig 3 en 4).

Op de aangegeven manier kunnen gemakkelijk de overige symmetrie-elementen van I en II worden opgespoord, dit is echter voor het volgende van geen belang. We hebben slechts het onderzoek naar de symmetrie zoover doorgevoerd, dat we het aantal

mogelijke modellen tot een minimum konden beperken, en het onderscheid van de resulterende groepen aangeven.

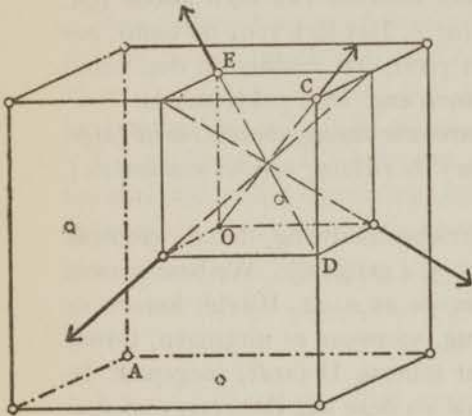


Fig. 3

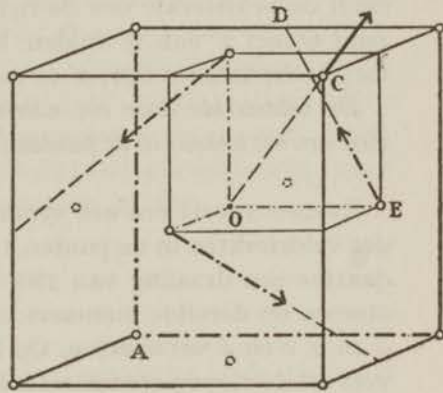


Fig. 4

§ 5 — *De magnetische veldsterkte.* Voor we nu de configuratie van de chlooratomen onderzoeken, willen we nagaan, welke eischen de symmetrie stelt aan de veldsterkte, die door een configuratie I of II wordt teweeggebracht. We hebben slechts te maken met de veldsterkte in de basispunten (waarbij het magnetisch atoom, dat zich op die plaats bevindt, buiten rekening wordt gelaten) en in de tusschengelegen punten, waar zich chlooratomen bevinden.

Bezien we nu de drietallige as  $AOC$  (fig. 3 en 4) dan blijkt, dat in alle punten van die lijn de magnetische veldsterkte de richting  $AOC$  moet hebben. Zou in een punt de veldsterkte een hoek met die lijn maken, dan had zij na een draaiing van  $120^\circ$  om die as een andere richting t. o. v. het kristal, dat met zichzelf tot dekking was gekomen. Dit is onmogelijk, waarmee het bovenstaande bewezen is. De veldsterkte heeft in de punten  $A$  en  $C$  de richting, afgezien van het teeken, van de zich daar bevindende momenten en dezelfde richting in het punt  $O$ , waar zich een chlooratoom bevindt.

Beschouwing van een andere drietallige as leert dat de magnetische veldsterkte in de andere basispunten ook de zelfde richting heeft als de momenten daar ter plaatse. De lijn  $DE$  is in fig. 3 en in fig. 4 zoo gekozen, dat zij een drietallige as met richting  $b$  voor-

stelt. Kiest men nu de eenheidscel zoo, dat  $DE$  een lichaamsdiagonaal van den cubus wordt, dan kan men de zelfde redeneering toepassen. In het punt, dat in het midden van dien cubus ligt, heeft de veldsterkte ook de richting  $b$ . Het ligt voor de hand, het punt  $O$  met  $1'$  aan te duiden; het punt, dat midden in den cubus met hoekpunten  $2$  ligt,  $2'$  te noemen enz. Dan geldt steeds:

*De veldsterkte door het natriumrooster teweeggebracht, heeft (afgezien van het teeken) in de punten  $j$  en  $j'$  de richting van het moment in  $j$ .*

Eveneens leert ons een symmetriebeschouwing, dat de grootten der veldsterkten in de punten  $1, 2, 3, 4$  gelijk zijn. We beschouwen daartoe een draaiing van  $180^\circ$  om de as  $2-2$ . Hierbij komen de atomen op dezelfde nummers terug, vanwaar ze uitgingen, terwijl  $a$  en  $b$ ,  $c$  en  $d$  verwisselen. Op het schema II ( $acdb$ ) toegepast, levert dit de nieuwe configuratie  $bdca$ , en deze kan door een verschuiving langs  $1-4$  worden teruggebracht tot  $acdb$ . De veldsterkte in een punt  $1$  is nu niet van grootte veranderd, maar bevindt zich nu in een punt, waar het moment de richting  $b$  heeft. Door dezelfde redeneering voor de assen  $3-3, 4-4$ , en ook voor de configuratie I ( $abcd$ ), vindt men, dat de veldsterkten in de punten  $1, 2, 3, 4$  van een configuratie dezelfde grootte hebben. Een dergelijk verband bestaat tusschen de veldsterkten in  $1', 2', 3', 4'$ . Wil men nu de veldsterkten, door een natriumrooster teweeggebracht, in de 8 punten,  $1, 2, 3, 4, 1', 2', 3', 4'$  berekenen, dan is het voldoende de grootte van de veldsterkten in  $1$  en  $1'$  te kennen. (of de grootte van een component). De grootte van de veldsterkte in een basispunt is evenredig met  $\mu$ , men kan dus stellen:

$$H \text{ in punt } j = \mu f$$

$$H \text{ in punt } j' = \mu g$$

en alles komt neer op de berekening van  $f$  en  $g$ .

§ 6 — *Het invoegen van het chloorrooster.* We schrijven de 4 chlooratomen in den cubus ook de momenten  $a, b, c, d$ , of  $-a, -b, -c, -d$  toe. Immers, andere richtingen verbiedt de symmetrieëisch, en daar de meetkundige som der natriummomenten nul is, moet dit ook het geval zijn met de chloormomenten. We kunnen nu dezelfde redeneering toepassen als in § 5:

Wil de drietallige as  $AC$  een symmetrieas blijven, dan moet

het magneetje in  $O$  de richting  $a$  of  $-a$  hebben. Anders gezegd, de richting van het magneetje in  $1'$  moet dezelfde (of tegengestelde) zijn van de richting der magneetjes in  $1$ .

Deze redeneering voor de andere assen herhalende, vindt men, dat bij de natriumconstellatie  $I$  ( $a b c d$ ) slechts past  $1', a; 2', b; 3', c; 4', d$ ; of  $1', -a; 2', -b; 3', -c; 4', -d$ . We schrijven dit korter als  $I'$  of  $-I'$ . Bij II passen  $II'$  of  $-II'$ , bij III,  $III'$  of  $-III'$ .

De veldsterkte  $H'$  door het chloorrooster veroorzaakt, heeft natuurlijk dezelfde eigenschappen als de natriumveldsterkte. Is het magnetisch moment van de chlooratomen  $\mu'$ , dan

$$\begin{aligned} H' \text{ in punt } j' &= \mu'f \\ H' \text{ in punt } j &= \mu'g. \end{aligned}$$

§ 7 — *Uitbreiding*. Voor een latere toepassing is de volgende vraag van belang:

Zijn er nog andere natrium- of chloorconfiguraties mogelijk, waarbij de veldsterkte in elk basispunt de zelfde (of tegengestelde) richting heeft als een magneetje?

We bezien daartoe de drie configuraties  $badc$ ,  $cdab$ ,  $dcba$ , welke, indien ze alle dezelfde momenten hebben, op een translatie na, identiek zijn. Wij geven nu aan deze drie configuraties verschillende momenten  $\mu_1$ ,  $\mu_2$ ,  $\mu_3$ , en superponeeren ze dan, zonder ze te verschuiven. Zoo komt er dan in het punt  $1$  bijv. een moment  $\mu_1$ , richting  $b$ , een moment  $\mu_2$ , richting  $c$ , een moment  $\mu_3$ , richting  $d$ . Wij weten nu, dat de momenten  $\mu_1$ , in elk der punten  $1$ , resp.  $1'$  een veldsterkte  $\mu_1f$ , resp.  $\mu_1g$  in de  $b$ -richting veroorzaken; de momenten  $\mu_2$  een veldsterkte  $\mu_2f$  of  $\mu_2g$  in de richting  $c$ ; de momenten  $\mu_3$  een veldsterkte  $\mu_3f$  of  $\mu_3g$  met de richting  $d$ .

Eenerzijds kunnen we de momenten in een punt samenstellen tot een moment, dat de grootte  $\mu$  moge hebben. In alle punten  $1$ ,  $2$ ,  $3$ ,  $4$  heeft het moment de zelfde grootte, de richting is door een eenvoudige meetkundige constructie te vinden, voor het punt  $1$ , door de vectoren  $\mu_1$ , richting  $b$ ,  $\mu_2$  richting  $c$ ,  $\mu_3$  richting  $d$  samen te stellen.

Anderzijds is de veldsterkte in  $1$ , door deze momenten  $\mu$  teweeggebracht, de resultante van  $\mu_1f$ ,  $\mu_2f$ ,  $\mu_3f$ , met de richtingen  $b$ ,  $c$ ,  $d$ . De veldsterkte is dan  $\mu f$ , en gelijkgericht met het moment in  $1$ . Het-

zelfde bewijs geldt voor de punten  $1'$ ,  $2'$ ,  $3'$ ,  $4'$ , waar de veldsterkte  $\mu_g$  is.

Deze opstelling deelt met de vroeger besprokene de eigenschap, dat in elk basispunt de richting der veldsterkte dezelfde is als die van het zich daar bevindende magneetje, en dat de richtingen in de punten  $j$  en  $j'$  dezelfde zijn.

Nu keeren we de redeneering om. Wij geven het moment in  $1$  een willekeurige richting en grootte. Wij kunnen nu dit moment altijd ontbinden in 3 momenten  $\mu_1$ ,  $\mu_2$ ,  $\mu_3$ , met richtingen  $b$ ,  $c$ ,  $d$ . Immers, deze drie richtingen liggen niet in een vlak. Brengen we nu in de punten  $2$  de momenten  $\mu_1$ ,  $\mu_2$ ,  $\mu_3$ , zoodanig aan, als passen zou in een configuratie I (of II), dan zijn die richtingen ook vastgelegd in de punten  $3$  en  $4$ , en daarmee de richtingen der resulterende momenten. Hiermee hebben wij dus een opstelling van de zoeven genoemde soort gevonden, voor een gegeven waarde van  $\mu$  in  $1$ .

Gaat men van I uit, dan vindt men:

$$\begin{aligned} \text{in } 1 \quad \mu &= \mu_1 b + \mu_2 c + \mu_3 d \\ \text{in } 2 \quad \mu &= \mu_1 a + \mu_2 d + \mu_3 c \\ \text{in } 3 \quad \mu &= \mu_1 d + \mu_2 a + \mu_3 b \\ \text{in } 4 \quad \mu &= \mu_1 c + \mu_2 b + \mu_3 a \end{aligned} \tag{1}$$

als  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$  de eenheidsvectoren voorstellen van de richtingen  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$ .

Gaat men van II uit, dan kan men als de drie configuraties kiezen:  $bdca$ ,  $cabd$ ,  $dbac$ , zoodat men dan vindt:

$$\begin{aligned} \text{in } 1 \quad \mu &= \mu_1 b + \mu_2 c + \mu_3 d \\ \text{in } 2 \quad \mu &= \mu_1 d + \mu_2 a + \mu_3 b \\ \text{in } 3 \quad \mu &= \mu_1 c + \mu_2 b + \mu_3 a \\ \text{in } 4 \quad \mu &= \mu_1 a + \mu_2 d + \mu_3 c \end{aligned} \tag{2}$$

Vervolgens kan men in de punten  $1'$ ,  $2'$ ,  $3'$ ,  $4'$  chlooratomen aanbrengen en het moment in  $1'$  een willekeurige richting en grootte geven. Om nu de richtingen in  $2'$ ,  $3'$  en  $4'$  te vinden, moet men weer kiezen, welke configuratie, I' of II', men aan de opstelling ten grondslag legt.

Nu zijn alleen die opstellingen van belang, waarbij voor het chloorrooster en het natriumrooster dezelfde configuratie wordt

gebruikt, evenals wij in § 6 voor de symmetrische configuraties deden. Men kan n.l. bewijzen dat dan alleen de momenten in de punten  $j$  en  $j'$  een vasten hoek met elkaar maken.

Nemen wij als voorbeeld de opstelling in formule I uitgedrukt. Leggen wij nu aan het chloorrooster dezelfde constellatie ten grondslag, met de momenten  $\mu_1', \mu_2', \mu_3'$ , dan vinden wij voor de momenten in  $1', 2', 3', 4'$  analoge uitdrukkingen:

$$\text{in } 1' \quad \mu_1' = \mu_1'b + \mu_2'c + \mu_3'd$$

$$\text{in } 2' \quad \mu_2' = \mu_1'a + \mu_2'd + \mu_3'c$$

enz.

Wanneer men nu  $(\mu\mu')$  berekent, voor de punten I en  $1', 2$  en  $2'$  enz. en men houdt in het oog, dat

$$a^2 = b^2 = c^2 = d^2 = 1$$

$$(ab) = (bc) \text{ enz.}$$

dan vindt men inderdaad voor al deze scalaire producten dezelfde waarde en dus ook voor de hoeken tusschen twee momenten.

Hadden we daarentegen voor het chloorrooster de configuratie II gebruikt, dan zouden de uitdrukkingen voor  $\mu$  in  $j$  en  $\mu'$  in  $j'$  niet analoog zijn geweest.

Dergelijke samenstellingen hebben een geringere graad van symmetrie dan de configuraties I of II zelve. Uit het feit, dat geen moment de richting van een lichaamsdiagonaal heeft, volgt, dat deze geen drietallige assen kunnen zijn.<sup>1)</sup>

Ook in een ander punt wijkt deze samenstelling af van de vroegere, die zich kenmerkten (wanneer beide atoomsoorten in het rooster waren aangebracht) door een samenvallen in de basis-

<sup>1)</sup> De besproken configuraties vinden aldus hun plaats onder de 230 ruimtgroepen van SCHOENFLIESS.

I. behoort tot de tetraedrische hemiedrie van het cubisch stelsel en wel tot  $T_d^1$ .

II. behoort tot de tetartoedrie:  $T^4$ .

IV. is, hoewel zijn cel een cubus is, tetragonaal:  $V_d^2$ .

De in § 6 besproken constellaties hebben als bijzondere gevallen I of II onder zich. Zij behooren dus tot ondergroepen van  $T_d^1$  of  $T^4$ . Zij blijken rhombisch te zijn (zie de opmerking bij IV). De constellaties, die met behulp van I zijn afgeleid, behooren tot  $V^1$ , de andere tot  $V^4$ . Had men op de zelfde manier uit IV een algemeener constellatie afgeleid, dan zou men daarvoor  $V^3$  vinden.

punten van veldsterkte en momentrichting. Indien namelijk de natrium- en chloormomenten in  $\tau$  en  $\tau'$  niet evenwijdig zijn, dan zullen de veldsterkten, door de natrium- en chloorroosters in een basispunt teweeggebracht, ook niet evenwijdig zijn. De veldsterkten, door het natrium- of het chloorrooster alleen teweeggebracht, hebben, zooals wij zagen, wel de richting van het moment in het bedoelde basispunt  $j$  of  $j'$ . Daar nu de momenten in  $j$  of  $j'$  een vasten hoek met elkaar maken, doen dat ook de veldsterkten in een basispunt. De resulterende veldsterkte in een basispunt maakt dus ook een hoek met het zich aldaar bevindende moment.



### HOOFDSTUK III

## DE BEREKENING VAN DE MAGNETISCHE VELD- STERKTE

*Inleiding.* Wij moeten nu de veldsterkte berekenen, die de configuraties, in het vorige hoofdstuk besproken, teweegbrengen. Daartoe zullen wij de magnetische atomen vervangen door dipolen, in de basispunten geplaatst. Voor het veld, op groote afstanden van een atoom, is dit zeker geoorloofd, zoodat de correcties, die men, bij nadere kennis van het atoommodel, zou moeten aanbrengen, alleen berekend behoeven te worden voor de atomen in den naasten omtrek. Wij zullen ons echter tot het dipoolveld bepalen.

Bij berekeningen van het veld van ladingen of magneten in een rooster treden eigenaardige convergentie moeilijkheden op, die de berekening aanmerkelijk ingewikkelder maken. Het heeft dus zijn nut, eerst den gang der berekening aan te duiden.

Wij zullen beginnen eenige algemeene formules op te stellen, die als ruggegraat voor de berekening dienen en tevens het aantal grootheden, die men moet berekenen, beperken. Daarbij maken wij weer gebruik van de symmetriebeschouwingen, die ons in het vorige hoofdstuk (§ 6) ook reeds iets over de veldsterkten leerden. Vervolgens zal de convergentie van de verkregen reeksen worden onderzocht. Daarna pas zal de veldsterkte worden uitgedrukt in snel convergeerende reeksen.

§ 1 — *De algemeene formules.* Men denke zich in de punten 1 van het keukenzoutrooster de eenheidsladingen geplaatst, en formeel de potentiaal opgeschreven, door deze ladingen teweeggebracht. Deze is een functie van  $x, y, z$ ; wij noemen haar  $\Pi_1(x, y, z)$ .

Is de ribbe van den elementairen cubus  $2d$ , en ligt de oorsprong in een punt 1, dan zijn de coördinaten van een ander basispunt

$$2ld, 2md, 2nd,$$

$$(l, m, n \text{ van } -\infty \text{ tot } +\infty)$$

en voor den afstand  $R_{l,m,n}$  van dat punt tot  $x, y, z$  vinden we

$$R_{l,m,n}^2 = (x - 2ld)^2 + (y - 2md)^2 + (z - 2nd)^2.$$

Dan is dus

$$\Pi_1(x, y, z) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{R_{l,m,n}} \quad (1)$$

Op dezelfde manier zullen we  $\Pi_2, \Pi_3, \Pi_4, \Pi_1', \Pi_2', \Pi_3', \Pi_4'$  definiëren als de door in punten 2, 3, 4, 1', 2', 3', 4' geplaatste eenheidsladingen teweeggebrachte potentialen.

Potentialen in de omgeving van een lading, waarbij die lading is weggelaten, zullen we aldus aangeven:

$$(\Pi_1)(x, y, z) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{R_{l,m,n}} \quad (1a).$$

De elementaire magneetjes in de punten 1 mogen nu de richtingscoëfficiënten  $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$  en alle de momenten  $\mu$  hebben. De magnetische potentiaal van een rooster van aldus georiënteerde magneetjes wordt dan voorgesteld door

$$\Omega_1 = -\mu \left\{ \alpha_1 \frac{\partial \Pi_1}{\partial x} + \beta_1 \frac{\delta \Pi_1}{\delta y} + \gamma_1 \frac{\delta \Pi_1}{\delta z} \right\},$$

wat we korter kunnen schrijven:

$$\Omega_1 = -\mu \{ \alpha_1 \Pi_{1x} + \beta_1 \Pi_{1y} + \gamma_1 \Pi_{1z} \}.$$

De componenten van de magnetische veldsterkte kunnen nu gevonden worden door nogmaals te differentieëren. Wanneer men nu

$$\frac{\partial^2 \Pi_1}{\partial x \partial y} = \Pi_{1xy}$$

schrijft, dan kan men de componenten der magnetische veldsterkte voorstellen door:

$$\begin{aligned} H_{1x} &= -\frac{\partial \Omega_1}{\partial x} = \mu \{ \alpha_1 \Pi_{1xx} + \beta_1 \Pi_{1xy} + \gamma_1 \Pi_{1xz} \}, \\ H_{1y} &= \mu \{ \alpha_1 \Pi_{1xy} + \beta_1 \Pi_{1yy} + \gamma_1 \Pi_{1yz} \}, \\ H_{1z} &= \mu \{ \alpha_1 \Pi_{1xz} + \beta_1 \Pi_{1yz} + \gamma_1 \Pi_{1zz} \}. \end{aligned} \quad (2)$$

Dergelijke formules gelden blijkbaar ook voor de veldsterkten ten gevolge van de momenten in de 7 andere puntroosters, en men kan door sommeering de gewenschte veldsterkte vinden. De veldsterkte, door een natriumrooster teweeggebracht, waarvan de momenten in een punt  $j$  de richtingscosinussen  $\alpha_j, \beta_j, \gamma_j$ , hebben, is dus

$$H_x = \mu \sum_{j=1, \dots, 4} \{ \alpha_j \Pi_{jxx} + \beta_j \Pi_{jxy} + \gamma_j \Pi_{jxz} \}, \text{ enz.} \quad (2a)$$

§ 2 — *Symmetrie-beschouwingen.* De symmetrie van de tralie heeft verschillende eenvoudige eigenschappen van de potentialen en haar afgeleiden ten gevolge.

Wij beginnen met de afgeleiden van één functie bijv.  $\Pi_1$ , en onderzoeken haar afgeleiden in een basispunt, bijv. 3. De tralie nu wordt door een draaiing van  $90^\circ$  om een as 3—3 (fig. 1) met zichzelf tot dekking gebracht. Hierbij wordt de  $Z$ -as een  $X$ -as, de  $X$ -as een  $-Z$ -as. De punten 1 en 3 komen weer op punten 1 en 3 terecht, de punten 2 op 4, en 4 op 2.

Deze draaiing leert ons 2 eigenschappen:

$$\begin{aligned} 1^\circ \quad \Pi_{1zy}(3) &= \Pi_{1xy}(3), \\ \Pi_{1xy}(3) &= -\Pi_{1zy}(3), \end{aligned}$$

waaruit volgt:

$$\Pi_{1xy}(3) = -\Pi_{1xy}(3) = 0$$

en

$$\Pi_{1xz}(3) = -\Pi_{1xz}(3) = 0.$$

De gemengde afleidingen zijn voor elk basispunt nul. Verder is

$$\Pi_{1xx}(3) = \Pi_{1zz}(3).$$

$$\begin{aligned} 2^\circ \quad \Pi_{1xx}(2) &= \Pi_{1zz}(4), \\ \Pi_{1yy}(2) &= \Pi_{1yy}(4), \\ \Pi_{1zz}(2) &= \Pi_{1xx}(4). \end{aligned}$$

Wij kunnen deze redeneeringen voor andere assen als 2—2, 4—4, en ook 1—1 toepassen. De draaiing om de laatste as leert, dat

$$(\Pi_1)_{xy}(1) = (\Pi_1)_{yz}(1) = (\Pi_1)_{zx}(1) = 0,$$

$$(\Pi_1)_{xx}(1) = (\Pi_1)_{yy}(1) = (\Pi_1)_{zz}(1).$$

De uitkomst is in de volgende tabel te brengen:

$$\begin{aligned}
 (\Pi_1)_{xx} (1) &= (\Pi_1)_{yy} (1) = (\Pi_1)_{zz} (1) = A \\
 \Pi_{1xx} (2) &= \Pi_{1yy} (2) = B \\
 \Pi_{1xx} (3) &= \Pi_{1zz} (3) = B \\
 &\Pi_{1yy} (4) = \Pi_{1zz} (4) = B \\
 \Pi_{1xx} (4) &= \Pi_{1yy} (3) = \Pi_{1zz} (2) = C \quad (4).
 \end{aligned}$$

Voor de afgeleiden in de punten 1', 2', 3', 4' vinden we ook, dat de gemengde afgeleiden nul zijn, en dat:

$$\begin{aligned}
 \Pi_{1xx} (1') &= \Pi_{1yy} (1') = \Pi_{1zz} (1') = F \\
 \Pi_{1xx} (2') &= \Pi_{1yy} (2') = E \\
 \Pi_{1xx} (3') &= \Pi_{1zz} (3') = E \\
 &\Pi_{1yy} (4') = \Pi_{1zz} (4') = E \\
 \Pi_{1xx} (4') &= \Pi_{1yy} (3') = \Pi_{1zz} (2') = D \quad (4a)
 \end{aligned}$$

Vervolgens onderzoeken we de verschillende potentialen. De potentiaal, door de eenheidsladingen in 1 in een punt  $x, y, z$  teweeggebracht, is dezelfde als die, door eenheidsladingen in 3 in een punt  $x + d, y, z + d$  teweeggebracht.

Analytisch:

$$\Pi_1 (x, y, z) = \Pi_3 (x + d, y, z + d) \quad (5)$$

en dus ook

$$\Pi_{1xx} (x, y, z) = \Pi_{3xx} (x + d, y, z + d).$$

Op geheel dezelfde manier kan men de andere potentialen met  $\Pi_1$  vergelijken:

$$\Pi_1 (x, y, z) = \Pi_{3'} (x, y + d, z),$$

$$\Pi_1 (x, y, z) = \Pi_{1'} (x + d, y + d, z + d).$$

§ 3 — *De formeele uitdrukking voor de veldsterkten.* We zagen in het vorige hoofdstuk (§ 5 en 6), dat het voldoende is, de veldsterkten, door de natrium- en chloorroosters in een punt 1 teweeggebracht, te berekenen, de veldsterkten in de andere roosterpunten zijn dan naar richting en grootte bekend. We zullen dit voor de twee configuraties nader nagaan. Van de algemeene betrek-

kingen tusschen de potentialen hebben wij slechts nodig de volgende specialiseering:

$$\Pi_{1xx}(d, 0, d) = \Pi_{3xx}(2d, 0, 2d),$$

of

$$\Pi_{1xx}(3) = \Pi_{3xx}(1)$$

Algemeen geldt:

$$\Pi_{jxx}(k) = \Pi_{kxx}(j) \quad (6)$$

*Configuratie I.* Deze wordt voorgesteld door  $a, b, c, d$ . De richtingscosinussen van deze zijn

	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
$a,$	$\frac{1}{3}\sqrt{3}$	$-\frac{1}{3}\sqrt{3}$	$\frac{1}{3}\sqrt{3}$
$b,$	$-\frac{1}{3}\sqrt{3}$	$\frac{1}{3}\sqrt{3}$	$\frac{1}{3}\sqrt{3}$
$c,$	$-\frac{1}{3}\sqrt{3}$	$-\frac{1}{3}\sqrt{3}$	$-\frac{1}{3}\sqrt{3}$
$d,$	$\frac{1}{3}\sqrt{3}$	$\frac{1}{3}\sqrt{3}$	$-\frac{1}{3}\sqrt{3}$

Laat men nu de gemengde afleidingen van  $\Pi$ , die nul zijn, weg, dan is de veldsterkte van het natriumrooster volgens (2a)

$$H_x(1) = \mu \{ \alpha_a \Pi_{1xx}(1) + \alpha_b \Pi_{2xx}(1) + \alpha_c \Pi_{3xx}(1) + \alpha_d \Pi_{4xx}(1) \}$$

$$= \frac{1}{3} \sqrt{3} \mu \{ (\Pi_{1xx}(1) - \Pi_{2xx}(1) - \Pi_{3xx}(1) + \Pi_{4xx}(1)) \}.$$

Uit (6) en (4) weten wij verder:

$$\begin{aligned} \Pi_{1xx}(1) &= A \\ \Pi_{2xx}(1) &= \Pi_{1xx}(2) = B \\ \Pi_{3xx}(1) &= \Pi_{1xx}(3) = B \\ \Pi_{4xx}(1) &= \Pi_{1xx}(4) = C, \end{aligned}$$

zoodat

$$H_x(1) = \frac{1}{3} \sqrt{3} \mu (A - 2B + C).$$

Daar nu verder de veldsterkte, door het natriumrooster in een punt 1 teweeggebracht, dezelfde richting heeft, als het zich daar bevindende momentje, in casu  $a$ , kunnen we opschrijven:

$$H_y(1) = -\frac{1}{3} \sqrt{3} \mu (A - 2B + C),$$

$$H_z(1) = \frac{1}{3} \sqrt{3} \mu (A - 2B + C).$$

We stelden reeds

$$H(1) = \mu f.$$

We zien nu, dat

$$f_1 = A - 2B + C \quad (7)$$

Vervolgens zoeken we de veldsterkte, die de chloorconfiguratie I' in  $\tau$  uitoefent. Ook deze veldsterkte heeft de richting  $a$ . Haar  $x$ -componente is:

$$H'_x(\tau) = \frac{1}{3} \sqrt{3} \mu' \{ \Pi_{1'xx}(\tau) - \Pi_{2'xx}(\tau) - \Pi_{3'xx}(\tau) + \Pi_{4'xx}(\tau) \},$$

en volgens (6) en (4a)

$$H'_x(\tau) = \frac{1}{3} \sqrt{3} \mu' (F - 2E + D)$$

Daar we deze veldsterkte reeds  $\mu'g$  stelden, is nu

$$g_I = F - 2E + D \quad (8)$$

*Configuratie II.* Deze heeft het schema  $acdb$ . Men vindt nu:

$$H_x(\tau) = \frac{1}{3} \sqrt{3} \mu \{ (\Pi_{1xx})(\tau) - \Pi_{2xx}(\tau) + \Pi_{3xx}(\tau) - \Pi_{4xx}(\tau) \}$$

voor het natriumrooster en

$$H'_x(\tau) = \frac{1}{3} \sqrt{3} \mu' \{ \Pi_{1'xx}(\tau) - \Pi_{2'xx}(\tau) + \Pi_{3'xx}(\tau) - \Pi_{4'xx}(\tau) \}.$$

voor het chloorrooster.

Deze uitdrukkingen kunnen worden geschreven:

$$H_x(\tau) = \frac{1}{3} \sqrt{3} \mu (A - C)$$

$$H'_x(\tau) = \frac{1}{3} \sqrt{3} \mu' (F - D),$$

zoodat,

$$f_{II} = A - C \quad (9)$$

$$g_{II} = F - D \quad (10)$$

Om dus de veldsterkten, door een der symmetrische configuraties I of II voor de natriumroosters of I' of II' voor de chloorroosters, in een basispunt teweeggebracht, te berekenen, hebben we formeel slechts de 4 combinaties (7), (8), (9), (10), van de 6 grootheden  $A, B, C, D, E, F$  noodig. Wij moeten echter nu eerst nagaan, in hoeverre aan deze formules een beteekenis kan worden toegeschreven.

§ 4 — *Convergentie-beschouwingen.* Het is nu welbekend, dat de reeksen (1) voor de functie  $\Pi$  divergeeren. Door de volgendemethode, die voorloopig geen aanspraak op strengheid mag maken, kunnen we ons in de convergentie-toestanden van de verschillende reeksen oriënteren.

Wij zullen nl. dat gedeelte van de reeks, dat met de basispunten op grooten afstand van het stelpunt samenhangt, door een ruimte-integraal vervangen, en aannemen, dat de convergentie of divergentie van die integraal convergentie of divergentie van de reeks ten gevolge heeft.

Beschouwen we als voorbeeld een der functies  $\Pi$ ,

$$\Pi = \sum \frac{I}{r}.$$

Is  $N$  het aantal roosterpunten per eenheid van volumen, en voeren we poolcoördinaten in (fig. 5), dan bevinden zich in een volumenelement

$$Nr^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$$

roosterpunten, die te samen tot de reeks bijdragen

$$Nr^2 dr \sin \theta d\theta \cdot d\varphi \cdot \frac{I}{r}.$$

Deze uitdrukking moeten we integreeren. De integratie voor een bolschil levert

$$4\pi Nr dr$$

en het is duidelijk, dat

$$\int_r^\infty 4\pi Nr dr$$

divergeert.

Wij willen nu eerst nagaan, of de reeks voor de veldsterkte, veroorzaakt door in  $r$  geplaatste, gelijkgerichte magneetjes, convergeert.

Laat een magneetje in een punt  $x, y, z$  geplaatst zijn, en zoeken we  $h$ , de magnetische veldsterkte, in den oorsprong, die hier geen punt  $r$  hoeft te zijn.

De magnetische potentiaal aldaar is:

$$\begin{aligned} \omega &= -\alpha \frac{\partial}{\partial x} \frac{I}{r} - \beta \frac{\partial}{\partial y} \frac{I}{r} - \gamma \frac{\partial}{\partial z} \frac{I}{r} \\ &= \alpha \frac{x}{r^3} + \beta \frac{y}{r^3} + \gamma \frac{z}{r^3}. \end{aligned}$$

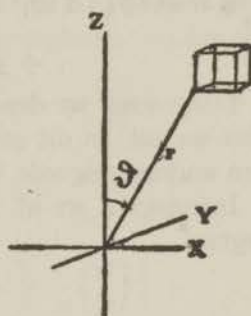


Fig. 5

Van de magnetische veldsterkte schrijven we slechts de component in de  $Z$ -richting op:

$$h_z = - \frac{\partial \omega}{\partial z} = 3\alpha \frac{xz}{r^5} + 3\beta \frac{yz}{r^5} + 3\gamma \frac{z^2}{r^5} - \gamma \frac{1}{r^3} =$$

$$= \frac{1}{r^3} \{ 3\alpha \sin \theta \cos \theta \cos \varphi + 3\beta \sin \theta \cos \theta \sin \varphi + 3\gamma \cos^2 \theta - \gamma \}.$$

Wanneer wij deze uitdrukking weer vermenigvuldigen met het aantal roosterpunten in een volumenelementje, vinden we:

$$\frac{N}{r} \cdot dr d\theta d\varphi \{ 3\alpha \sin^2 \theta \cos \theta \cos \varphi + 3\beta \sin^2 \theta \cos \theta \sin \varphi +$$

$$+ 3\gamma \cos^2 \theta \sin \theta - \gamma \sin \theta \}.$$

Integreeren we deze uitdrukking nu over een bolschil, dan vinden we nul. In dit geval convergeert de integraal. Echter niet bij een andere volgorde van integratie!

Integreeren we nl. eerst naar  $\varphi$  en  $r$ , dan komen we op de integraal

$$\int_r^{\infty} \frac{dr}{r},$$

die logaritmisch oneindig is, zoodat nu de integraal divergeert.

Wij willen nu nagaan, of de reeks voor de veldsterkte, door een geheele configuratie teweeggebracht, convergeert, en zullen trachten dit op een strengere manier te doen. Hiertoe maken wij gebruik van een stelling, die door RIEMANN is uitgesproken, en die ons nog meer van nut zal kunnen zijn. Zij luidt (in een gespecialiseerden vorm):

*Wanneer de algemeene term van een reeks kan worden voorgesteld door*

$$f(\sqrt{(l-\xi)^2 + (m-\eta)^2 + (n-z)^2})$$

*waarbij  $f(r)$  een positieve functie van  $r$  is, die afneemt met toenemende  $r$ , dan convergeert de reeks gelijktijdig met*

$$\int_b^{\infty} f(r) r^2 dr.$$

Bovendien convergeert zij dan uniform in  $\xi, \eta, z$ .



Met behulp van deze stelling, die in een scherperen vorm herhaalt, wat in het begin van deze paragraaf is gezegd, kunnen wij nu gemakkelijk bewijzen, dat de reeks voor de veldsterkte absoluut convergeert, en haar som dus onafhankelijk is van de manier waarop wij de sommatie uitvoeren.

Daartoe berekenen wij de veldsterkte in den oorsprong, uitgeoefend door de natriumatomen met moment  $\mathbf{I}$  van een elementairen cubus, op grooten afstand van den oorsprong gelegen. Wij stellen de afstand van het punt  $\mathbf{1}$  tot den oorsprong  $r$ , zijn coördinaten  $x, y, z$ , de relatieve coördinaten van  $\mathbf{2}$  t.o.v.  $\mathbf{1}$   $\xi_2, \eta_2, \zeta_2$ , en de richtingscosinussen van het magneetje aldaar  $\alpha_2, \beta_2, \gamma_2$ , enz. Wanneer wij de machten van  $\mathbf{1}/r$  grooter dan 4 weglaten, vinden wij:

$$\begin{aligned} h_z \sim & \sum_{1\dots 4} \left( 3\alpha_i \frac{xz}{r^5} + 3\beta_i \frac{yz}{r^5} + 3\gamma_i \frac{z^2}{r^5} - \gamma_i \frac{\mathbf{I}}{r^3} \right) + \\ & + \sum_{2\dots 4} \left[ 3\alpha_i \left\{ \xi_i \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{xz}{r^5} \right) + \eta_i \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{xz}{r^5} \right) + \zeta_i \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{xz}{r^5} \right) \right\} + \right. \\ & + 3\beta_i \left\{ \xi_i \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{yz}{r^5} \right) + \eta_i \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{yz}{r^5} \right) + \zeta_i \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{yz}{r^5} \right) \right\} + \\ & + 3\gamma_i \left\{ \xi_i \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{z^2}{r^5} \right) + \eta_i \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{z^2}{r^5} \right) + \zeta_i \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{z^2}{r^5} \right) \right\} + \\ & \left. + \gamma_i \left\{ \xi_i \frac{3x}{r^5} + \eta_i \frac{3y}{r^5} + \zeta_i \frac{3z}{r^5} \right\} \right] \end{aligned}$$

Nu is de eerste som nul, daar

$$\sum_{1\dots 4} \alpha_i = \sum_{1\dots 4} \beta_i = \sum_{1\dots 4} \gamma_i = 0$$

Voeren wij in de tweede som poolcoördinaten in:

$$h_z \sim f(\theta, \varphi) \frac{\mathbf{I}}{r^4}$$

waarbij  $f(\theta, \varphi)$  een rationeele geheele functie is van  $\sin \theta, \cos \theta, \sin \varphi, \cos \varphi$ . Haar grootste absolute waarde is dan steeds eindig. Dan is

$$|h_z| < \frac{M'}{r^4} \left( \mathbf{1} + \frac{A}{r} + \frac{B}{r^2} \dots \right)$$

of, voor  $r$  grooter dan een gegeven waarde

$$|h_z| < \frac{M}{r^4}.$$

Bedenken wij, dat de coördinaten van eenig roosterpunt zijn

$$x = -x_0 + 2ld, \quad y = -y_0 + 2md, \quad z = -z_0 + 2nd$$

dan is

$$r^2 = (-x_0 + 2ld)^2 + (-y_0 + 2md)^2 + (-z_0 + 2nd)^2$$

zoodat de algemeene term van de reeks

$$\sum \frac{M}{r^4} = \sum \frac{M}{(2d)^4} \frac{1}{[(l-\xi)^2 + (m-\eta)^2 + (n-\zeta)^2]^2}$$

inderdaad den vorm heeft, die in de stelling wordt genoemd. Men ziet nu zonder meer, dat de integraal

$$\int_b^{\infty} \frac{1}{r^4} r^2 dr$$

convergeert, waarmee reeds alles bewezen is. Immers,  $\sum M/r^4$  convergeert, en de reeks  $\sum h_z$ , die de totale veldsterkte voorstelt, convergeert absoluut. Wanneer men eerst de bijdragen van een cel neemt, kan men deze op willekeurige wijze sommeeren.

§ 5 — *De methode van Ewald.* Uit het voorafgaande blijkt nu, dat we de berekening van de veldsterkte van voren aan moeten beginnen. Wij moeten uitgaan van de reeks voor de veldsterkte, door een natriumrooster teweeggebracht, die we, voor de  $Z$ -componente, nog eens willen opschrijven. Duiden we door  $r_{1lmn}$  den afstand aan van een punt 1 van den cubus  $(lmn)$  tot den oorsprong, door  $r_{2lmn}$  die van het punt 2 van denzelfden cubus, dan is

$$H_z = \mu \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_j \left\{ \alpha_j \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \cdot \frac{1}{r_{jlmn}} + \beta_j \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \frac{1}{r_{jlmn}} + \gamma_j \frac{\partial^2}{\partial z^2} \cdot \frac{1}{r_{jlmn}} \right\} \quad (\text{II})$$

De sommand is de  $Z$ -component van de veldsterkte, door een magneetje, met richtingscosinussen  $\alpha_j$ ,  $\beta_j$ ,  $\gamma_j$  in het punt  $jlmn$ , in

den oorsprong teweegebracht. De eerste drie sommaties mogen niet met de vierde worden verwisseld.

Wij maken nu deze uitdrukking schijnbaar ingewikkelder, op het voetspoor van EWALD<sup>2)</sup> en LAPLACE.

We denken ons de grootte van een moment niet meer  $\mu$  maar  $\mu e^{-kr}$ , waarbij  $r$  de afstand is van het moment tot het punt, waarvoor we de veldsterkte willen berekenen, en  $k$  een willekeurige, positieve constante. EWALD past deze methode toe om het veld van trillende dipolen te berekenen; hier is het probleem eenvoudiger, daar van rustende dipolen sprake is.

Verder heeft het zijn nut, de  $\theta$ -functies, die EWALD slechts tijdelijk in zijn formules invoert, te laten staan.

Men overtuigt zich nu gemakkelijk, dat

$$H_z = \mu \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \lim_{k \rightarrow 0} \sum_{j=1, \dots, 4} \left\{ \alpha_j \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \frac{e^{-kr_{jlmn}}}{r_{jlmn}} + \beta_j \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \frac{e^{-kr_{jlmn}}}{r_{jlmn}} + \gamma_j \frac{\partial^2}{\partial z^2} \frac{e^{-kr_{jlmn}}}{r_{jlmn}} \right\} \quad (12)$$

door de differentiaties uit te werken en daarna  $k = 0$  te stellen.

Echter is eveneens waar, met verwisseling van sommatie en grensovergang:

$$H_z = \mu \lim_{k \rightarrow 0} \sum_l \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_j \left\{ \alpha_j \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \cdot \frac{e^{-kr_{jlmn}}}{r_{jlmn}} + \dots + \dots \right\} \\ = \lim_{k \rightarrow 0} H_{zk} \quad (12a)$$

Immers de reeks  $H_{zk}$  convergeert gelijkmatig voor  $k \geq 0$ . De verwisseling is dan geoorloofd.

In  $H_{zk}$  echter kunnen we nu differentiaties en sommaties verwisselen, zoodat

$$H_{zk} = \sum_{j=1, \dots, 4} \left\{ \alpha_j \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \sum_l \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-kr_{jlmn}}}{r_{jlmn}} + \beta_j \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \sum_l \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-kr_{jlmn}}}{r_{jlmn}} + \gamma_j \frac{\partial^2}{\partial z^2} \sum_l \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-kr_{jlmn}}}{r_{jlmn}} \right\} \quad (13)$$

Nu zijn we echter zoover, dat we aan de mathematisch aanvechtbare formules van § 1, 2, 3 een meer exacten inhoud kunnen geven. Daartoe hebben we de grootheden  $\Pi$  van daar te vervangen door:

$$\Pi_j(x, y, z, k) = \sum_l \sum_m \sum_n \frac{e^{-kr_{jlmn}}}{r_{jlmn}} \quad (14)$$

waarvoor we thans geen nieuwe notatie willen invoeren, en die de eigenschappen, voortvloeiende uit de symmetrie, in § 2 vermeld, bezitten. De grootheden  $A, B, C, D, E, F$  van § 3, kunnen we nu vervangen door overeenkomstige, van de parameter  $k$  afhankelijke, die we  $A_k$  enz. zullen noemen, en die de eigenschappen, in (4) en (4a) uitgedrukt bezitten. De formule (13) wordt dan

$$H_{zk} = \sum_{i \dots 4} \{ \alpha_i \Pi_{jxz} + \beta_j \Pi_{jyz} + \gamma_j \Pi_{jzz} \} \quad (13a)$$

Dit heeft denzelfden vorm als (2a). Ook de uitdrukkingen uit § 3 kunnen we nu overnemen: in een punt 1 vinden we, voor de natriumconfiguratie I

$$H_k = \mu(A_k - 2B_k + C_k),$$

voor een chloorconfiguratie I'

$$H_k = \mu'(D_k - 2E_k + F_k),$$

voor een natriumconfiguratie II

$$H_k = \mu(A_k - C_k),$$

en voor een chloorconfiguratie II'

$$H_k = \mu'(F_k - D_k). \quad (15)$$

In deze uitdrukkingen moet men dan tot de  $\text{Lim } k = 0$  overgaan, om de werkelijke veldsterkten te verkrijgen, volgens (12a).

§ 6 — *Uitdrukkingen voor de functies  $\Pi$  en haar afgeleiden.* Voor de functies  $\Pi$  (14) kunnen we nu op de volgende, door EWALD aangegeven wijze, uitdrukkingen vinden.

We beginnen met

$$\Pi_1(x, y, z) = \sum_l \sum_m \sum_n \frac{e^{-kr_{1lmn}}}{r_{1lmn}},$$

$$r_{1lmn}^2 = (2dl - x)^2 + (2dm - y)^2 + (2dn - z)^2,$$

waarbij de oorsprong in een punt 1 is gelegd. Nu is

$$\frac{e^{-kr}}{r} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-r^2 \epsilon'^2 - \frac{k^2}{4\epsilon'^2}} d\epsilon' \quad (16)$$

of

$$\frac{e^{-kr_{lmn}}}{r_{lmn}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\epsilon'^2 \{4d^2(l^2 + m^2 + n^2) - 4d(lx + my + nz)\} - (x^2 + y^2 + z^2)\epsilon'^2 - \frac{k^2}{4\epsilon'^2}} d\epsilon'.$$

Wij maken de formule homogeen, door de coördinaten  $x, y, z$  te deelen door  $2d$ :

$$\xi = \frac{x}{2d}, \quad \eta = \frac{y}{2d}, \quad \zeta = \frac{z}{2d}$$

en bovendien door

$$\epsilon' 2d = \epsilon \sqrt{\pi}, \quad \kappa = \frac{d}{\sqrt{\pi}} k$$

te stellen. Dan is

$$\frac{e^{-kr_{lmn}}}{r_{lmn}} = \frac{1}{d} \int_0^{\infty} e^{-\pi \epsilon^2 (l^2 + m^2 + n^2 - 2l\xi - 2m\eta - 2n\zeta) - \pi \epsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2) - \frac{\kappa^2}{\epsilon^2}} d\epsilon$$

Wij vormen nu de functie  $\Pi_1$ . Deze is, met verwisseling van de volgorde van sommatie en integratie:

$$\Pi_1(x, y, z) = \frac{1}{d} \int_0^{\infty} \sum_l \sum_m \sum_n e^{-\pi \epsilon^2 (l^2 + m^2 + n^2 - 2l\xi - 2m\eta - 2n\zeta) - \pi \epsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2) - \frac{\kappa^2}{\epsilon^2}} d\epsilon \quad (17)$$

De som onder het integraalteeken is het product van drie enkelvoudige reeksen, elk van den vorm:

$$\sum_{-\infty}^{+\infty} e^{-\pi \epsilon^2 l^2 + 2\pi \epsilon^2 l \xi}$$

Dit zijn echter  $\theta$ -functies. Noemen wij

$$\theta_3(Z|\tau) = \sum_{-\infty}^{+\infty} e^{\pi i \tau l^2} e^{2i Z l},$$

waar  $Z$  de loopende variabele,  $\tau$  een parameter is <sup>7)</sup>, dan blijkt, dat onze som wordt voorgesteld door:

$$\theta_3(-\pi i \varepsilon^2 \xi | i \varepsilon^2)$$

en

$$\begin{aligned} \Pi_1(x, y, z) &= \frac{1}{d} \int_0^\infty \theta_3(-\pi i \varepsilon^2 \xi | i \varepsilon^2) \cdot \theta_3(-\pi i \varepsilon^2 \eta | i \varepsilon^2) \\ &\cdot \theta_3(-\pi i \varepsilon^2 \zeta | i \varepsilon^2) \cdot e^{-\pi \varepsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2) - \frac{x^2}{\varepsilon^2}} \cdot d\varepsilon. \end{aligned} \quad (17a)$$

Wij zullen dit den eersten vorm noemen. Een tweeden vorm verkrijgen we nl., door op den integrand de  $\theta$ -transformatie toe te passen. De theorie der  $\theta$ -functies leert namelijk, dat

$$\theta_3(Z | \tau) = \frac{1}{\sqrt{-i\tau}} e^{\frac{Z^2}{\pi i \tau}} \theta_3\left(-\frac{Z}{\tau} \middle| -\frac{1}{\tau}\right),$$

of, in ons geval:

$$\theta_3\left(-\pi \xi \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) = \varepsilon e^{-\pi \xi^2 \varepsilon^2} \theta_3(-\pi i \varepsilon^2 \xi | i \varepsilon^2).$$

De tweede vorm voor  $\Pi_1$  is dan

$$\begin{aligned} \Pi_1(x, y, z) &= \frac{1}{d} \int_0^\infty \theta_3\left(\pi \xi \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \cdot \theta_3\left(\pi \eta \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \cdot \theta_3\left(\pi \zeta \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \\ &\cdot \varepsilon^{-3} e^{-\frac{x^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \end{aligned} \quad (17b)$$

Het is niet geoorloofd, de  $\theta$ -transformatie toe te passen bij de grens  $\varepsilon = \infty$ , zoodat men de integraal van den tweeden vorm slechts tusschen  $\varepsilon = 0$  en  $\varepsilon = a$  ( $a$  willekeurig en eindig)

kan nemen. Dit geven wij aan door de schrijfwijze  $\int_0^{(\infty)}$ .

Daar  $\theta_3$  een even functie is, hebben wij  $-\pi \xi$  door  $\pi \xi$  vervangen. Daar  $\theta_3$  een periodieke functie is van  $\xi$  met periode  $1$ , is aan dezen vorm duidelijk te zien, dat  $\Pi_1(\xi, \eta, \zeta)$  drievoudig periodiek is met perioden  $1, 1, 1$  en  $\Pi_1(x, y, z)$  met perioden  $2d, 2d, 2d$ .

Wij vinden nu gemakkelijk de uitdrukkingen voor de overige potentialen. Bijv.  $\Pi_2$ , waarvoor we reeds eerder vonden:

$$\begin{aligned}\Pi_2(x, y, z) &= \Pi_1(x + d, y + d, z) \\ \Pi_2(\xi, \eta, \zeta) &= \Pi_1(\xi + 1/2, \eta + 1/2, \zeta).\end{aligned}\quad (5)$$

Daar nu

$$\theta_3(Z + 1/2\pi | \tau) = \theta_4(Z | \tau),$$

vinden we uit (17b)

$$\begin{aligned}\Pi_2 &= \frac{1}{d} \int_0^{(\infty)} \theta_4\left(\pi\xi \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \cdot \theta_4\left(\pi\eta \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_3\left(\pi\zeta \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \\ &\quad \cdot \varepsilon^{-3} e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.\end{aligned}\quad (18b)$$

Voor  $\Pi_2'$  vinden we:

$$\begin{aligned}\Pi_2' &= \frac{1}{d} \int_0^{(\infty)} \theta_3\left(\pi\xi \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \cdot \theta_3\left(\pi\eta \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_4\left(\pi\zeta \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \\ &\quad \cdot \varepsilon^{-3} e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.\end{aligned}\quad (19b)$$

Ook de uitdrukkingen voor  $\Pi_3, \Pi_4, \Pi_3', \Pi_4'$  zijn nu gemakkelijk op te schrijven.

Voor  $\Pi_1'$  vinden we

$$\begin{aligned}\Pi_1' &= \frac{1}{d} \int_0^{(\infty)} \theta_4\left(\pi\xi \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \cdot \theta_4\left(\pi\eta \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_4\left(\pi\zeta \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \\ &\quad \cdot \varepsilon^{-3} e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.\end{aligned}\quad (20b)$$

De vormen (18b), (19b), (20b) zullen we nu ook de tweede vormen noemen. De eerste vormen verkrijgt men, door nog eens de  $\theta$ -transformatie toe te passen:

$$\theta_4(Z | \tau) = \frac{1}{\sqrt{-i\tau}} e^{\frac{Z^2}{\pi i \tau}} \theta_2\left(-\frac{Z}{\tau} \middle| -\frac{1}{\tau}\right).$$

We vinden dan

$$\Pi_2 = \frac{1}{d} \int_0^{\infty} \theta_2(-\pi i \varepsilon^2 \xi | i \varepsilon^2) \cdot \theta_2(-\pi i \varepsilon^2 \eta | i \varepsilon^2) \cdot$$

$$\cdot \theta_3(-\pi i \varepsilon^2 \zeta | i \varepsilon^2) e^{-\pi \varepsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \quad (18a)$$

$$\Pi_2 = \frac{1}{d} \int_0^{\infty} \theta_3(-\pi i \varepsilon^2 \xi | i \varepsilon^2) \cdot \theta_3(-\pi i \varepsilon^2 \eta | i \varepsilon^2) \cdot$$

$$\cdot \theta_2(-\pi i \varepsilon^2 \zeta | i \varepsilon^2) \cdot e^{-\pi \varepsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \quad (19a)$$

$$\Pi_1 = \frac{1}{d} \int_0^{\infty} \theta_2(-\pi i \varepsilon^2 \xi | i \varepsilon^2) \cdot \theta_2(-\pi i \varepsilon^2 \eta | i \varepsilon^2) \cdot$$

$$\cdot \theta_2(-\pi i \varepsilon^2 \zeta | i \varepsilon^2) e^{-\pi \varepsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \quad (20a)$$

Wanneer we nu  $A_k$  of  $(\Pi_1)_{xx}$  willen uitrekenen, moeten we, om  $(\Pi_1)$  te vinden, uit (17a)  $l = m = n = 0$  weglaten. Dan is

$$(\Pi_1) = \frac{1}{d} \int_0^{\infty} [\theta_3(\pi i \varepsilon^2 \xi | i \varepsilon^2) \cdot \theta_3(\pi i \varepsilon^2 \eta | i \varepsilon^2) \theta_3(\pi i \varepsilon^2 \zeta | i \varepsilon^2) - 1] \cdot e^{-\pi \varepsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon,$$

of, in den tweeden vorm getransformeerd:

$$(\Pi_1) = \frac{1}{d} \int_0^{(\infty)} \left[ \theta_3\left(\pi \xi \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \cdot \theta_3\left(\pi \eta \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \cdot \theta_3\left(\pi \zeta \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \frac{1}{\varepsilon^3} - e^{-\pi \varepsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2)} \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon$$

De schemata (4) en (4a) wijzen ons nu, hoe we  $A_k$  enz. moeten vinden. Zij zijn de waarden van de tweede afgeleiden in een punt 1, dus in den oorsprong. Dus (4, 4a, 6)

$$\begin{aligned} A_k &= (\Pi_1)_{xx} (1) & B_k &= \Pi_{2xx} (1) \\ C_k &= \Pi_{2zz} (1) & D_k &= \Pi'_{2zz} (1) \\ E_k &= \Pi'_{2xx} (1) & F_k &= \Pi'_{1xx} (1). \end{aligned}$$



Bij de differentiatie zullen we dus ineens  $\xi = \eta = \zeta = 0$  stellen, en  $\theta_3(0/\tau)$  door  $\theta_3(\tau)$  aanduiden. Wanneer we er bovendien gebruik van maken, dat

$$\theta_3'(0/\tau) = \theta_3'(0/\tau) = \theta_4(0/\tau) = 0,$$

vinden wij

$$\begin{aligned} A_k &= \frac{1}{4d^3} \int_0^\infty \left[ -\pi^2 \varepsilon^4 \theta_3''(i\varepsilon^2) \theta_3^2(i\varepsilon^2) - \right. \\ &\quad \left. - 2\pi\varepsilon^2 \{ \theta_3^3(i\varepsilon^2) - 1 \} \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \\ &= \frac{1}{4d^3} \int_0^{(\infty)} \left[ \frac{\pi^2}{\varepsilon^3} \theta_3''\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_3^2\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) + 2\pi\varepsilon^2 \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_k &= \frac{1}{4d^3} \int_0^\infty \left[ -\pi^2 \varepsilon^4 \theta_2''(i\varepsilon^2) \theta_2(i\varepsilon^2) \theta_3(i\varepsilon^2) - \right. \\ &\quad \left. - 2\pi\varepsilon^2 \theta_2^2(i\varepsilon^2) \theta_3(i\varepsilon^2) \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \\ &= \frac{1}{4d^3} \int_0^{(\infty)} \left[ \frac{\pi^2}{\varepsilon^3} \theta_2''\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_2\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_3\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_k &= \frac{1}{4d^3} \int_0^\infty \left[ -\pi^2 \varepsilon^4 \theta_3''(i\varepsilon^2) \theta_2^2(i\varepsilon^2) - \right. \\ &\quad \left. - 2\pi\varepsilon^2 \theta_2^2(i\varepsilon^2) \theta_3(i\varepsilon^2) \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \\ &= \frac{1}{4d^3} \int_0^{(\infty)} \left[ \frac{\pi^2}{\varepsilon^3} \theta_3''\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_2^2\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_k &= \frac{1}{4d^3} \int_0^\infty \left[ -\pi^2 \varepsilon^4 \theta_2''(i\varepsilon^2) \theta_3^2(i\varepsilon^2) - \right. \\ &\quad \left. - 2\pi\varepsilon^2 \theta_2(i\varepsilon^2) \theta_3^2(i\varepsilon^2) \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{4d^3} \int_0^{(\infty)} \left[ \frac{\pi^2}{\varepsilon^3} \theta_4'' \left( \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \theta_3^2 \left( \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon, \\
E_k &= \frac{1}{4d^3} \int_0^{\infty} \left[ -\pi^2 \varepsilon^4 \theta_3'' (i\varepsilon^2) \theta_2 (i\varepsilon^2) \theta_3 (i\varepsilon^2) - \right. \\
&\quad \left. - 2\pi \varepsilon^2 \theta_2 (i\varepsilon^2) \theta_3^2 (i\varepsilon^2) \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \\
&= \frac{1}{4d^3} \int_0^{(\infty)} \left[ \frac{\pi^2}{\varepsilon^3} \theta_3'' \left( \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \theta_4 \left( \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \theta_3 \left( \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon, \\
F_k &= \frac{1}{4d^3} \int_0^{\infty} \left[ -\pi^2 \varepsilon^4 \theta_2'' (i\varepsilon^2) \theta_2^2 (i\varepsilon^2) - \right. \\
&\quad \left. - 2\pi \varepsilon^2 \theta_2^3 (i\varepsilon^2) \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \\
&= \frac{1}{4d^3} \int_0^{(\infty)} \left[ \frac{\pi^2}{\varepsilon^3} \theta_4'' \left( \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \theta_4^2 \left( \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon. \quad (21)
\end{aligned}$$

De vormen tusschen vierkante haken zijn telkens twee aan twee identiek voor elke waarde van  $\varepsilon$ . Men kan bij het afleiden van deze formules gemakkelijk nagaan, dat aan (4) en (4a) en (6) is voldaan.

§ 7 — *De uitdrukking voor de veldsterkten.* Wij kunnen in  $A_k$  enz. niet tot de  $\text{Lim } k = 0$  overgaan. Immers, zooals uit (2) volgt, zouden we de veldsterkte in den oorsprong krijgen, door gelijkgerichte magneetjes in de punten 1 teweeggebracht. In § 4 zagen we, dat de reeks, die deze veldsterkte voorstelt, slechts voorwaardelijk convergeert. Wij moeten nu eerst de vier uitdrukkingen (15) vormen. Gebruikt men nu den eersten of den tweeden vorm, steeds krijgt men slecht convergeerende reeksen. Wij kunnen ons nu redden op de volgende manier.

We beschouwen als voorbeeld de veldsterkte, door een natriumconfiguratie II in een punt 1 teweeggebracht. Volgens (15) is dan

$$H_k = \mu(A_k - C_k)$$

en uit (21) volgt dan

$$\begin{aligned} H &= \lim_{k \rightarrow 0} H_k = \lim_{k \rightarrow 0} \mu(A_k - C_k) \\ &= \frac{1}{4d^3} \int_0^\infty \left[ -\pi^2 \varepsilon^4 \theta_3''(i\varepsilon^2) \theta_3^2(i\varepsilon^2) + \pi^2 \varepsilon^4 \theta_3''(i\varepsilon^2) \theta_2^2(i\varepsilon^2) - \right. \\ &\quad \left. - 2\pi \varepsilon^2 \{ \theta_3^3(i\varepsilon^2) - 1 \} + 2\pi \varepsilon^2 \theta_2^2(i\varepsilon^2) \theta_3(i\varepsilon^2) \right] d\varepsilon. \\ &= \frac{1}{4d^3} \int_0^\infty \left[ \frac{\pi^2}{\varepsilon^3} \theta_3''\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_3^2\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) + 2\pi \varepsilon^2 - \frac{\pi^2}{\varepsilon^3} \theta_3''\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_4^2\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) \right] d\varepsilon. \end{aligned} \quad (22)$$

Wij kunnen de integranden nu in reeksen ontwikkelen. Uit de definitie van de  $\theta$ -functies volgt, als we  $e^{\pi\tau} = q$  stellen,

$$\begin{aligned} \theta_3(o|\tau) &= 1 + 2q + 2q^4 \dots \\ \theta_3''(o|\tau) &= -8(q + 4q^4 \dots) \\ \theta_4(o|\tau) &= 1 - 2q + 2q^4 \dots \\ \theta_4''(o|\tau) &= 8(q - 4q^4 \dots) \\ \theta_2(o|\tau) &= 2q^{1/4} + 2q^{9/4} \dots \\ \theta_2''(o|\tau) &= -2(q^{1/4} + 9q^{9/4} \dots) \end{aligned}$$

Nu is in den eersten vorm  $\tau = i\varepsilon^2$  en  $q = e^{-\pi\varepsilon^2}$ . Voor  $\varepsilon = 0$  wordt  $q = 1$ . De  $\theta$ -functies worden dan oneindig. Voor  $\varepsilon \rightarrow \infty$  nadert  $q$  tot 0, en convergeeren de  $\theta$ -functies goed. Juist omgekeerd staat het met den tweeden vorm. Hier is  $q = e^{-\pi/\varepsilon^2}$ . De  $\theta$ -functies zullen hier divergeeren voor  $\varepsilon \rightarrow \infty$ ; zeer goed convergeeren in de omgeving van  $\varepsilon = 0$ . EWALD heeft nu het idee aan de hand gedaan, het integratieinterval te splitsen door een getal  $p$ , den tweeden vorm van  $0 \dots p$  te integreeren, en den eersten van  $p \dots \infty$ . Dit is geoorloofd, daar de 2 vormen van den integrand voor elke waarde van  $\varepsilon$  identiek zijn.

Het is gemakkelijk, een voordeelige waarde van  $p$  aan te geven. Stellen we nl.  $p = 1$ , dan loopt  $\varepsilon$  in den eersten vorm van 1 naar  $\infty$ ,  $q$  van  $e^{-\pi}$  naar 0, en in den tweeden vorm loopt  $\varepsilon$  van 0 naar 1, en  $q$  van 0 naar  $e^{-\pi}$ . Nu is  $e^{-\pi} = 0,0432$ . Wij zijn dus in elk integratieinterval van een snelle convergentie der  $\theta$ -functies verzekerd.

Nu kunnen we de uitdrukking (22) weer schrijven, na het integratieinterval te hebben gesplitst:

$$H = \mu (A_o - C_o),$$

waarbij

$$A_o = \frac{1}{4d^3} \int_0^1 \left[ \frac{\pi^2}{\epsilon^3} \theta_3'' \left( \frac{i}{\epsilon^2} \right) \theta_3^2 \left( \frac{i}{\epsilon^2} \right) + 2\pi \epsilon^2 \right] d\epsilon$$

$$+ \frac{1}{4d^3} \int_1^\infty \left[ -\pi^2 \epsilon^4 \theta_3'' (i\epsilon^2) \theta_3^2 (i\epsilon^2) - 2\pi \epsilon^2 \{ \theta_3^3 (i\epsilon^2) - 1 \} \right] d\epsilon$$

$$C_o = \frac{1}{4d^3} \int_0^1 \frac{\pi^2}{\epsilon^3} \theta_3'' \left( \frac{i}{\epsilon^2} \right) \theta_4^2 \left( \frac{i}{\epsilon^2} \right) d\epsilon$$

$$+ \frac{1}{4d^3} \int_1^\infty \left[ -\pi^2 \epsilon^4 \theta_3'' (i\epsilon^2) \theta_2^2 (i\epsilon^2) - 2\pi \epsilon^2 \theta_2^2 (i\epsilon^2) \theta_3 (i\epsilon^2) \right] d\epsilon.$$

Op dezelfde manier kunnen we  $B_o$ ,  $C_o$ ,  $E_o$ ,  $F_o$  vormen, door in de uitdrukkingen (21) het integratie-interval te splitsen, en dan tot  $k \rightarrow 0$  over te gaan. Deze 6 grootheden zijn nu volkomen gedefinieerd door snelconvergerende reeksen, en men kan uit hen zonder meer de veldsterkten vinden uit de vgl (15), door daar  $k = 0$  te stellen.

§ 8 — *Eigenschappen van de veldsterkten.* De berekening van  $A_o$ ,  $B_o$ ,  $C_o$ ,  $D_o$ ,  $E_o$  en  $F_o$  wordt door de volgende eigenschappen zeer vergemakkelijkt:

$$A_o = \frac{1}{4d^3} \cdot \frac{2}{3} \pi,$$

$$2B_o + C_o = \frac{1}{4d^3} \cdot 2\pi,$$

$$2E_o + D_o = \frac{1}{4d^3} 2\pi,$$

$$F_o = \frac{1}{4d^3} \cdot \frac{2}{3} \pi, \quad (23)$$

welke formules niet alleen gelden, als men in de integralen de grens 1 invoert, maar voor elke eindige, en van nul verschillende grens  $\phi$ . Wij zullen het bewijs alleen voor  $A_o$  geven.

Uit de definitie van de  $\theta$ -functies volgt reeds:

$$-\frac{4}{\pi i} \cdot \frac{\partial \theta(Z|\tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta(Z|\tau)}{\partial Z^2} = \theta''(Z|\tau).$$

Schrijven we nu voor  $\tau$ ,  $i\varepsilon^2$  of  $i/\varepsilon^2$  en stellen we  $Z = 0$ , dan vinden we:

$$\theta''(i\varepsilon^2) = -\frac{4}{\pi i} \frac{\partial \theta(i\varepsilon^2)}{\partial \varepsilon} \cdot \frac{d\tau}{d\varepsilon} = \frac{2}{\pi \varepsilon} \frac{\partial \theta(i\varepsilon^2)}{\partial \varepsilon},$$

$$\tau = i\varepsilon^2,$$

$$\theta''\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) = -\frac{4}{\pi i} \frac{\partial \theta\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right)}{\partial \varepsilon} \cdot \frac{d\tau}{d\varepsilon} = -\frac{2\varepsilon^3}{\pi} \cdot \frac{\partial \theta\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right)}{\partial \varepsilon}$$

$$\tau = \frac{i}{\varepsilon^2}.$$

Wij voeren dit in de uitdrukking voor  $A_0$  in, met dien verstande, dat we de grens 1 door een algemeener grens  $p$  vervangen.

$$A_0 4d^3 = -\int_0^p \left\{ 2\pi \frac{\partial \theta_3\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right)}{\partial \varepsilon} \theta_3^3\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) - 2\pi \varepsilon^2 \right\} d\varepsilon$$

$$- \int_p^\infty \left\{ 2\pi \varepsilon^3 \frac{\partial \theta_3(i\varepsilon^2)}{\partial \varepsilon} \theta_3^3(i\varepsilon^2) + 2\pi \varepsilon^2 \theta_3^3(i\varepsilon^2) - 2\pi \varepsilon^2 \right\} d\varepsilon.$$

Door partieele integratie maken wij hiervan:

$$A_0 4d^3 = -\frac{2}{3} \pi \theta_3^3\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) \Big|_0^p + \frac{2}{3} \pi p^3$$

$$- \frac{2}{3} \pi \varepsilon^3 \theta_3^3(i\varepsilon^2) \Big|_p^\infty + \int_p^\infty 2\pi \varepsilon^2 \theta_3^3(i\varepsilon^2) d\varepsilon$$

$$- \int_p^\infty 2\pi \varepsilon^2 \theta_3^3(i\varepsilon^2) d\varepsilon + \frac{2}{3} \pi \varepsilon^3 \Big|_p^\infty$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{2}{3}\pi\theta_3^3\left(\frac{i}{p^2}\right) + \frac{2}{3}\pi + \frac{2}{3}\pi p^3 - \frac{2}{3}\pi\epsilon^3\left\{\theta_3^3(i\epsilon^2) - 1\right\} \Bigg|_p^\infty \\
&= -\frac{2}{3}\pi\theta_3^3\left(\frac{i}{p^2}\right) + \frac{2}{3}\pi + \frac{2}{3}\pi p^3 + \\
&\quad + \frac{2}{3}\pi p^3\theta_3^3(ip^2) - \frac{2}{3}\pi p^3.
\end{aligned}$$

Daar nu uit de  $\theta$ -transformatie volgt

$$p\theta_3(ip^2) = \theta_3\left(\frac{i}{p^2}\right),$$

is

$$A_o \cdot 4d^3 = \frac{2}{3}\pi$$

Op dezelfde manier leidt men de andere betrekkingen af.

Wij willen nu verder met elkaar vergelijken de veldsterkten, die een natriumconfiguratie I en een configuratie II in een hunner basispunten teweegbrengen. Volgens (15) en (23) is

$$\begin{aligned}
H_I &= \mu(A_o - 2B_o + C_o) \\
&= \frac{\mu}{4d^3} \left( \frac{2}{3}\pi - 2\pi + 2C_o \cdot 4d^3 \right) \\
&= \frac{\mu}{4d^3} (2C_o \cdot 4d^3 - \frac{4}{3}\pi),
\end{aligned}$$

terwijl

$$\begin{aligned}
H_{II} &= \mu(A_o - C_o) \\
&= \frac{\mu}{4d^3} \left( \frac{2}{3}\pi - C_o \cdot 4d^3 \right).
\end{aligned}$$

*Wij zien dus dat  $H_I$  tweemaal zoo groot is als  $H_{II}$ , en de tegengestelde richting heeft.* Hetzelfde geldt voor de veldsterkten, die de chloorconfiguraties I' of II' in een der basispunten 1, 2, 3, 4 te weegbrengen.

§ 9 — *De numerieke uitkomsten.* Uit (23) volgt, dat we slechts  $C_o$  en  $D_o$  moeten berekenen.

Daartoe moet de integrand in een reeks worden ontwikkeld, en deze termsgewijze worden geïntegreerd. Zoo is

$$\begin{aligned}
 4d^3 C_o &= - \int_1^{\infty} \pi^2 \varepsilon^4 \theta_3''(i\varepsilon^2) \theta_2^2(i\varepsilon^2) d\varepsilon \\
 &\quad - \int_1^{\infty} 2\pi \varepsilon^2 \theta_3(i\varepsilon^2) \theta_2^2(i\varepsilon^2) d\varepsilon + \\
 &\quad + \int_0^1 \frac{\pi^2}{\varepsilon^3} \theta_3''\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_4^2\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) d\varepsilon.
 \end{aligned}$$

Nu zijn de  $\theta$ -functies en haar afgeleiden machtreeksen in  $q$ . (pag. 67). Men vindt, als men

$$q_1 = e^{-\pi \varepsilon^2} \qquad q_2 = e^{-\frac{\pi}{\varepsilon^2}}$$

stelt

$$\begin{aligned}
 \theta_3''(i\varepsilon^2) \theta_2^2(i\varepsilon^2) &= -32 (q_1^{3/2} + 2q_1^{7/2} \dots) \\
 \theta_3(i\varepsilon^2) \theta_2^2(i\varepsilon^2) &= 4 (q_1^{1/2} + 2q_1^{3/2} + 2q_1^{5/2} \dots) \\
 \theta_3''\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_4^2\left(\frac{i}{\varepsilon^2}\right) &= -8 (q_2 - 4q_2^2 + 4q_2^3 \dots)
 \end{aligned}$$

Van de drie integralen, waarin  $4d^3 C_o$  is gesplitst, levert de eerste dus een reeks met termen

$$a_n \int_1^{\infty} \pi^2 \varepsilon^4 e^{-n\pi \varepsilon^2} d\varepsilon \quad \left( n = \frac{3}{2}, \frac{7}{2}, \dots \right)$$

welke, na twee keer partieel te zijn geïntegreerd, wordt

$$a_n \left\{ \frac{\pi}{2n} e^{-\pi n} + \frac{3}{4n^2} e^{-\pi n} + \frac{3}{4n^2} \int_1^{\infty} e^{-\pi \varepsilon^2 n} d\varepsilon \right\}$$

Voor de tweede integraal vinden we een reeks

$$b_n \int_1^{\infty} 2\pi \varepsilon^2 e^{-n\pi \varepsilon^2} d\varepsilon, \quad (n = 1/2, 3/2, 5/2, \dots)$$

deze wordt

$$b_n \left\{ \frac{1}{n} e^{-\pi n} + \frac{1}{n} \int_1^{\infty} e^{-n\pi \varepsilon^2} d\varepsilon \right\}$$

De integraal

$$\int_1^{\infty} e^{-n\pi\epsilon^2} d\epsilon = \frac{1}{\sqrt{\pi n}} \int_{\sqrt{\pi n}}^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi n}} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \int_0^{\sqrt{\pi n}} e^{-x^2} dx \right\}$$

is in tabellen gebracht <sup>(8)</sup>. Met het grooter worden van  $\sqrt{\pi n}$  nadert ze snel tot nul.

De derde integraal van  $4d^3C_0$  eindelijk is een reeks met termen;

$$c_n \int_0^1 \frac{\pi^2}{\epsilon^3} e^{-\frac{\pi n}{\epsilon^2}} d\epsilon \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

$$\text{of} \quad c_n \frac{\pi}{2n} \cdot e^{-n\pi}$$

Alle reeksen convergeeren snel.

Nadat men  $C_0$  en  $D_0$  aldus heeft berekend, kan men de veldsterkten voor de configuraties II en II' berekenen, terwijl men door de gevonden waarden met  $-2$  te vermenigvuldigen, de veldsterkten voor de configuraties I en I' vindt.

De uitkomsten zijn:

Een natriumconfiguratie I geeft in elk punt 1, 2, 3, 4 een veldsterkte:

$$H_I = -\frac{\mu}{4d^3} \times 8,59$$

Een chloorconfiguratie I':

$$H'_{I'} = \frac{\mu'}{4d^3} \times 30,08.$$

Een natriumconfiguratie II:

$$H_{II} = \frac{\mu}{4d^3} \times 4,29.$$

Een chloorconfiguratie II':

$$H_{II'} = -\frac{\mu'}{4d^3} \times 15,04$$

De verhouding van de veldsterkten voor I en I', en II en II' is klaarblijkelijk hetzelfde. Zij is, wanneer men  $\mu = \mu'$  neemt

$$\frac{H_{I'}}{H_I} = \frac{H_{II'}}{H_{II}} = -3,52.$$



## AANHANGSEL BIJ HOOFDSTUK III

In Hoofdstuk III hebben wij ons bepaald tot een berekening van de veldsterkte, en ons daarbij in twee opzichten een beperking opgelegd. Aan den eenen kant hebben wij de rechtvaardiging van de verschillende processen (verwisseling van limieten e.d.) geheel achterwege gelaten, om den gang der berekeningen niet te storen. Aan den anderen kant hebben wij ook van de physische beteekenis der gebruikte formules geheel afgezien. Liever dan de tekst door verwijzingen te onderbreken, geef ik het benodigde hier in samenhangend verband.

§ 1 — *De stelling van Riemann.* Het bewijs voor deze stelling nemen wij uit een verhandeling van HURWITZ,<sup>9)</sup> waar zij in algemeeneren vorm is bewezen. Zij luidt:

Wanneer de algemeene term van een reeks kan worden voorgesteld door

$$f(\sqrt{(l-\xi)^2 + (m-\eta)^2 + (n-3)^2})$$

waarbij  $f(r)$  een positieve functie is van  $r$ , afnemende met toenemende  $r$ , dan convergeert (en divergeert) de reeks gelijktijdig met

$$\int_b^{\infty} f(r) r^2 dr.$$

Wij kunnen hier nog aan toevoegen, dat zij uniform convergeert in  $\xi, \eta, 3$  en dus haar som een continue functie van die veranderlijken is.

*Bewijs.* Wij denken ons een ruimte, waarin zich roosterpunten bevinden met de coördinaten

$$x = l - \xi, \quad y = m - \eta, \quad z = n - 3,$$

waarbij  $l, m, n$  alle waarden van  $-\infty$  tot  $+\infty$  doorloopen. Dan is

$$r = \sqrt{(l-\xi)^2 + (m-\eta)^2 + (n-3)^2}$$

de afstand van een der roosterpunten tot den oorsprong.

De termen van de reeks kunnen wij ons nu naar de grootte gerangschikt denken. Wij kunnen eerst de termen nemen, waar-

voor  $r < 1$  en die dus grooter zijn dan  $f(1)$ , en zoo voortgaan. Wij nummeren de termen van de reeks aldus

$$a_0 \leq a_1 \leq a_2 \dots \dots \dots$$

Nu willen wij een uitdrukking vinden voor het aantal termen, waarvan de roosterpunten binnen een bol  $R$  liggen. Alleen deze termen zijn grooter dan  $f(R)$ .

Dit aantal nu is zeker kleiner, dan dat, wat binnen den omgeschreven cubus ligt, met volumen  $8R^3$ , en een eenvoudige meetkundige beschouwing leert ons, dat dit aantal kleiner is dan  $8 \times$  het volumen van dien cubus of  $64R^3$ , wat wij  $CR^3$  schrijven.

Nu kiezen wij een reeks getallen

$$b < r_0 < r_1 < r_2 \dots r_n,$$

zoó, dat

$$Cr_0^3 = m$$

$$Cr_1^3 = m + 1$$

$$Cr_2^3 = m + 2$$

$$Cr_n^3 = m + n.$$

Nu zijn er op zijn hoogst  $m + 1$  termen, die grooter zijn dan  $f(r_1)$ , zoodat

$$a_{m+1} < f(r_1)$$

of

$$a_{m+1} < f(r_1) \int_{r_0}^{r_1} \frac{d}{dr} (Cr^3) dr < 3C \int_{r_0}^{r_1} f(r) r^2 dr$$

Immers  $f(r)$  neemt af met toenemende  $r$ . Dezelfde redeneering volgende voor  $a_{m+2}$ ,  $a_{m+3}$  . . . . :

$$(a_{m+1} + a_{m+2} + \dots a_{m+n}) < 3C \int_{r_0}^{r_n} f(r) r^2 dr < 3C \int_b^{\infty} f(r) r^2 dr.$$

Hieruit volgt, dat, als de integraal convergeert, de reeks het ook doet. Daarbij hangt de integraal niet af van  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ , zoodat ook de uniforme convergentie hieruit volgt.

Het bewijs voor de divergentie kan op analoge wijze worden geleverd.

§ 2 — Toepassingen. Wij vonden reeksen van den vorm

$$\sum \frac{e^{-kr_{lmn}}}{r_{lmn}} = \sum \frac{e^{-2dk\sqrt{(l-\xi)^2 + (m-\eta)^2 + (n-3)^2}}}{2d\sqrt{(l-\xi)^2 + (m-\eta)^2 + (n-3)^2}}$$

waarbij

$$2 dl - 2d\xi, \quad 2 dm - 2d\eta, \quad 2 dn - 2d3,$$

de coördinaten van de punten 1 zijn. Uit onze stelling volgt nu zonder meer, dat deze reeks uniform convergeert in  $\xi, \eta, 3$ .

Zij mag nu termsgewijze worden gedifferentieerd. Dit is immers geoorloofd, als de gedifferentieerde reeks uniform convergeert. Nu is de algemeene term van die reeks:

$$\frac{\partial}{\partial x} \cdot \frac{e^{-kr}}{r} = \left( -\frac{e^{-kr}}{r^2} - k \frac{e^{-kr}}{r} \right) \frac{x}{r}$$

De absolute waarde van die term is kleiner dan

$$e^{-kr} \left( \frac{1}{r^2} + \frac{k}{r} \right)$$

Deze reeks convergeert volgens RIEMANN, en uniform, zoodat dit ook voor de gedifferentieerde reeks geldt, en de differentiatie werkelijk geoorloofd is.

Op de zelfde manier bewijst men, dat de gedifferentieerde reeks nogmaals gedifferentieerd mag worden, zoodat

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \sum \frac{e^{-kr_{lmn}}}{r_{lmn}} = \sum \frac{\partial^2}{\partial x^2} \cdot \frac{e^{-kr_{lmn}}}{r_{lmn}}$$

Wij bezien nu de reeks

$$H_{zk} = \sum_{i=1}^j \left\{ \alpha_j \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \sum_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-kr_{jlmn}}}{r_{jlmn}} + \dots + \dots \right\}$$

waarin sommatie en differentiatie mogen worden verwisseld. Wij berekenen nu, als op pag. 57, de bijdrage van een cel:

$$h_{zk} = \sum_{i=1}^j \left\{ \alpha_j \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \frac{e^{-kr_{jlmn}}}{r_{jlmn}} + \dots + \dots \right\}$$

Wij vinden dan

$$|h_{zk}| < M \frac{e^{-kr}}{r^4} \{1 + akr + bk^2r^2 + ck^3r^3\}$$

Nu zijn  $kr e^{-kr}$ ,  $k^2 r^2 e^{-kr}$ ,  $k^3 r^3 e^{-kr}$  voor  $k \equiv 0$  steeds eindig. Wij vervangen ze door haar maxima, en  $e^{-kr}$  door 1:

$$|h_{zk}| < \frac{M}{r^4} \{1 + A + B + C\}$$

Passen wij nu de stelling van Riemann toe, dan zien wij, dat de integraal niet meer afhangt van  $k$ , en dat  $\sum h_{zk}$  uniform in  $k$  convergeert, ook als  $k = 0$ .

Wij mogen dan termgewijze tot de limiet  $k = 0$  overgaan, of  $\text{Lim } \sum h_{zk} = \sum h_z$ .

Hiermee zijn alle bewerkingen van § 5 gerechtvaardigd.

§ 3 — *De functie*  $\Pi$ . Wij zullen den inhoud der overige paragrafen niet op den voet volgen, maar liever uitgaan van de functie  $\Pi(x, y, z, k)$ , die wij als volgt definiëren:

$$\begin{aligned} \Pi(x, y, z, k) &= \frac{1}{d} \int_0^p \theta_3\left(\pi\xi \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_3\left(\pi\eta \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \theta_3\left(\pi\zeta \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) \cdot \varepsilon^{-3} e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \\ &+ \frac{1}{d} \int_p^\infty \sum_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi \varepsilon^2 (l-\xi)^2} \cdot \sum_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi \varepsilon^2 (m-\eta)^2} \cdot \sum_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi \varepsilon^2 (n-\zeta)^2} \cdot e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon. \end{aligned}$$

waarbij:

$$\xi = \frac{x}{2d}, \quad \eta = \frac{y}{2d}, \quad \zeta = \frac{z}{2d}, \quad \kappa = \frac{kd}{\sqrt{\pi}}$$

en

$$\theta_3\left(\pi\xi \middle| \frac{i}{\varepsilon^2}\right) = \sum_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\pi}{\varepsilon^2} l^2 + 2\pi i l \xi}$$

Van deze functie willen wij de eigenschappen nagaan.

1°. De twee integralen bestaan onder eenige voorwaarden. Bij de eerste willen wij de grens 0 bezien. De  $\theta_3$  functies naderen tot 1, de term  $\varepsilon^{-3} e^{-\kappa^2/\varepsilon^2}$  nadert tot nul. Deze integraal convergeert voor  $\kappa^2 > 0$ .

Bij de tweede integraal mag  $\kappa$  nul zijn. Hier zijn echter  $\xi, \eta, \zeta$  aan voorwaarden gebonden. Stel, dat  $\xi$  geen geheel getal is, dan is

$$\begin{aligned}\sum e^{-\pi \varepsilon^2 (l-\xi)^2} &= e^{-\pi \varepsilon^2 a} + e^{-\pi \varepsilon^2 b} + \dots \\ &= e^{-a \pi \varepsilon^2} \{1 + e^{-\pi \varepsilon^2 c} + \dots\}\end{aligned}$$

Wanneer  $\varepsilon$  naar het oneindige gaat, wordt de vorm tusschen accolades 1, en de som:  $e^{-\pi \varepsilon^2 a}$ , waar  $a$  de kleinste waarde is, die  $(l-\xi)^2$  aanneemt. De tweede integraal convergeert in dit geval. Is  $\xi$  echter nul, of een geheel getal, dan nadert de som tot 1, en, indien  $\xi, \eta, \zeta$  tegelijk geheele getallen zijn, nadert de integrand tot 1 en divergeert de integraal.

2°. De functie  $\Pi$  wordt oneindig voor  $\xi = \eta = \zeta = 0$  en voor  $\kappa = 0$ . Op welke wijze gebeurt dat? Nu wordt

$$\begin{aligned}\sum e^{-\pi \varepsilon^2 (l-\xi)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (m-\eta)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (n-\zeta)^2} \\ - e^{-\pi \varepsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2)}\end{aligned}$$

exponentieel nul, wanneer  $\varepsilon$  naar oneindig gaat. We behoeven dit alleen na te gaan voor  $\xi = \eta = \zeta = 0$ , wanneer de vorm wordt

$$\sum e^{-\pi \varepsilon^2 l^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 m^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 n^2} - 1$$

Dan volgt daaruit, dat

$$\begin{aligned}(\Pi) &= \frac{1}{d} \int_0^p \left[ \theta_3 \left( \pi \xi \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \eta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \zeta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \varepsilon^{-3} e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} - \right. \\ &\quad \left. - e^{-\pi \varepsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} \right] d\varepsilon + \\ &+ \frac{1}{d} \int_p^\infty \left[ \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (l-\xi)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (m-\eta)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (n-\zeta)^2} - \right. \\ &\quad \left. - e^{-\pi \varepsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2)} \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.\end{aligned}$$

een eindige waarde heeft voor  $\xi = \eta = \zeta = 0$ . Wij kunnen schrijven:

$$\begin{aligned}
 (\Pi) &= \Pi - \frac{1}{d} \int_0^{\infty} e^{-\pi \varepsilon^2 (\zeta^2 + \eta^2 + \xi^2) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon. \\
 &= \Pi - \frac{e^{-\kappa \{ \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \}}}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}
 \end{aligned}$$

Voor een latere toepassing is het van belang na te gaan, hoe  $\Pi$  tot  $\infty$  nadert voor  $\kappa \rightarrow 0$ . Wij hebben dan op de eerste integraal te letten. Wanneer wij van het product

$$\theta_3\left(\pi\xi \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right.\right) \theta_3\left(\pi\eta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right.\right) \theta_3\left(\pi\zeta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right.\right)$$

1 afrekken, vinden wij, dat het verschil nu exponentieel tot nul nadert, wanneer  $\varepsilon$  tot 0 nadert. De functie

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{d} \int_0^p \left[ \theta_3\left(\pi\xi \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right.\right) \theta_3\left(\pi\eta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right.\right) \theta_3\left(\pi\zeta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right.\right) - 1 \right] \varepsilon^{-3} e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon + \\
 &+ \frac{1}{d} \int_0^p \left[ \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (l-\xi)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (m-\eta)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (n-\zeta)^2} - \varepsilon^{-3} \right] \\
 &\quad \cdot e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \\
 &= \Pi - \frac{1}{d} \int_0^{\infty} \varepsilon^{-3} e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon = \Pi - \frac{1}{2 d \kappa^2}
 \end{aligned}$$

blijft eindig, wanneer  $\kappa \rightarrow 0$ .

3°. De functie  $\Pi$  hangt niet af van  $p$ , daar volgens de  $\theta$ -transformatie

$$\theta_3\left(\pi\xi \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right.\right) \equiv \sum e^{-\frac{\pi}{\varepsilon^2} l^2 + 2\pi i l \xi} = \varepsilon \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (l-\xi)^2}.$$

4°. De functie  $\Pi$  is drievoudig periodiek in  $\xi, \eta, \zeta$  met perioden 1 of in  $x, y, z$  met perioden  $2d$ .

5°. Zij kan gedifferentieerd worden naar  $x, y, z$ , door den integrand te differentieeren.

Immers, dit is geoorloofd voor een integraal

$$\int_a^{\infty} f(\epsilon, x) d\epsilon$$

wanneer de functie continu is in  $\epsilon$  en  $x$  en

$$\int_a^{\infty} f'(\epsilon, x) d\epsilon \text{ en } \int_a^{\infty} f''(\epsilon, x) d\epsilon$$

bestaan <sup>10)</sup> (de accenten geven afgeleiden naar  $x$  aan). Wij overtuigen ons gemakkelijk, dat deze integralen en  $\int_a^{\infty} f'''(\epsilon, x) d\epsilon$  bestaan, zoodat het hierboven gezegde is bewezen.

Het is wel voldoende, de tweede afgeleide naar  $x$  op te schrijven. Zij is:

$$\begin{aligned} & \frac{\pi^2}{4d^3} \int_0^p \theta_3'' \left( \pi \xi \left| \frac{i}{\epsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \eta \left| \frac{i}{\epsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \zeta \left| \frac{i}{\epsilon^2} \right. \right) \epsilon^{-3} e^{-\frac{\kappa^2}{\epsilon^2}} d\epsilon + \\ & + \frac{1}{4d^3} \int_p^{\infty} \sum \left\{ 4\pi^2 \epsilon^4 (l - \xi)^2 e^{-\pi \epsilon^2 (l - \xi)^2} - 2\pi \epsilon^2 e^{-\pi \epsilon^2 (l - \xi)^2} \right\}, \\ & \cdot \sum e^{-\pi \epsilon^2 (m - \eta)^2} \cdot \sum e^{-\pi \epsilon^2 (n - \zeta)^2} \cdot e^{-\frac{\kappa^2}{\epsilon^2}} d\epsilon. \end{aligned}$$

De notatie  $\theta_3'' \left( \pi \xi \left| \frac{i}{\epsilon^2} \right. \right)$  beteekent de tweede afgeleide naar de veranderlijke  $\pi \xi$ .

Het termgewijze differentieeren van  $\sum e^{-\pi \epsilon^2 (l - \xi)^2}$  behoeft wel geen nader betoog.

De eerste integraal convergeert, daar

$$\theta_3'' \left( \pi \xi \left| \frac{i}{\epsilon^2} \right. \right) = - \sum 4l^2 e^{-\frac{\pi l^2}{\epsilon^2} + 2\pi i \xi l}$$

voor  $\epsilon \rightarrow 0$  tot  $e^{-\pi/\epsilon^2}$  nadert. In tegenstelling met de eerste integraal voor  $\Pi$  zelf is het niet meer noodig, dat  $\kappa > 0$  is. Voor de

tweede integraal gelden de zelfde beschouwingen als voor de tweede integraal van  $\Pi$  zelf. Zij convergeert niet voor  $\xi = \eta = \zeta = 0$ . De tweede afgeleide naar  $x$  van  $(\Pi)$  doet dit echter wel. Zij luidt, wanneer wij  $\xi = \eta = \zeta = 0$  stellen:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Pi) =$$

$$\frac{1}{4d^3} \int_0^p \left( \theta_3'' \left( 0 \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3^2 \left( 0 \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \pi^2 \varepsilon^{-3} + 2 \pi \varepsilon^2 \right) e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon +$$

$$+ \frac{1}{4d^3} \int_0^\infty \left[ \sum \left\{ 4\pi^2 \varepsilon^4 l^2 e^{-\pi \varepsilon^2 l^2} - 2\pi \varepsilon^2 e^{-\pi \varepsilon^2 l^2} \right\} \right.$$

$$\left. \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 m^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 n^2} + 2 \pi \varepsilon^2 \right] e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

De integralen  $\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Pi)$  en  $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Pi$  bestaan ook voor  $\kappa = 0$ . Stelt men nu in de integralen  $\kappa = 0$  of  $e^{-\kappa^2/\varepsilon^2} = 1$ , dan zijn deze integralen gelijk aan  $\text{Lim}_{k \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Pi)$  en  $\text{Lim}_{k \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Pi$ . Om dit in te zien, heeft men slechts na te gaan of de integralen over de eerste afgeleiden naar  $\kappa$  voor  $\kappa \equiv 0$  bestaan <sup>10</sup>). Dit is inderdaad het geval.

Nu is  $\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Pi) = A_k$  en

$\text{Lim}_{k \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Pi) = A_0$ . De overige grootheden:  $B_0, C_0, D_0, E_0, F_0$

zijn alle in de formule voor  $\text{Lim}_{k \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Pi$  opgesloten. Zoo is

$$B_0 = \text{Lim}_{k \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Pi_2(0, 0, 0)$$

$$= \text{Lim}_{k \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Pi(d, d, 0)$$

(pag. 63)

§ 4 — *Andere uitdrukkingen voor  $\Pi$* . Wij hebben in de vorige paragraaf aangetoond, dat men differentiaties en limietovergang



van de functie  $\Pi$  onder het integraalteeken kan uitvoeren. Wij hebben nu nog aan te toonen, dat

$$\Pi = \sum \frac{e^{-kr}}{\gamma}$$

of, uitvoeriger geschreven:

$$\Pi = \sum \frac{e^{-k\sqrt{(2dl-x)^2 + (2dm-y)^2 + (2dn-z)^2}}}{\sqrt{(2dl-x)^2 + (2dm-y)^2 + (2dn-z)^2}}.$$

Wij schrijven, om dit te bewijzen, eerst

$$\begin{aligned} & \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (l-\xi)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (m-\eta)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (n-\zeta)^2} \\ & \quad + \sum_{-\infty}^{+\infty} e^{-\pi \varepsilon^2 [(l-\xi)^2 + (m-\eta)^2 + (n-\zeta)^2]}. \end{aligned}$$

De laatste reeks is namelijk convergent volgens de stelling van Riemann (§ 1A), en bestaat uit positieve termen. Het product van de drie reeksen kan als een bepaalde rangschikking van de termen worden opgevat.

Vervolgens schrijven wij

$$\begin{aligned} \Pi = & \frac{1}{d} \int_0^\delta \theta_3 \left( \pi \xi \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \eta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \zeta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \varepsilon^{-3} e^{-\frac{\pi^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon + \\ & + \frac{1}{d} \sum_{-\infty}^{+\infty} \int_\delta^\infty e^{-\pi \varepsilon^2 [(l-\xi)^2 + (m-\eta)^2 + (n-\zeta)^2]} e^{-\frac{\pi^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon. \end{aligned}$$

Hierbij is  $\delta$  een kleine grootheid. De sommatie en integratie in de tweede integraal zijn verwisseld. Men kan dit aldus rechtvaardigen:

De termen van de reeks

$$\sum e^{-\pi \varepsilon^2 [(l-\xi)^2 + (m-\eta)^2 + (n-\zeta)^2]}$$

zijn kleiner dan die van de convergeerende reeks

$$\sum e^{-\pi \delta^2 [(l-\xi)^2 + (m-\eta)^2 + (n-\zeta)^2]}$$

De eerste reeks convergeert dus gelijkmatig voor  $\varepsilon > \delta$  en mag over een eindig interval termgewijze worden geïntegreerd.

Schrijven wij  $[(l-\xi)^2 + (m-\eta)^2 + (n-\zeta)^2] = (l, m, n)$ , dan kunnen wij schrijven:

$$\sum_{\delta} \int_{\delta}^q e^{-\pi \varepsilon^2 (l, m, n) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon = \int_{\delta}^q \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (l, m, n) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

Gaat men rechts tot de limiet  $q \rightarrow \infty$  over, dan krijgt men de integraal over het oneindige interval. Deze zal gelijk zijn aan de som der integralen, als men in de som links termsgewijze tot  $q \rightarrow \infty$  mag overgaan. Nu is

$$\begin{aligned} \int_{\delta}^q e^{-\pi \varepsilon^2 (l, m, n) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon &< \int_{\delta}^q e^{-\pi \varepsilon^2 (l, m, n)} d\varepsilon < \\ &< \int_{\delta}^{\infty} e^{-\pi \varepsilon^2 (l, m, n)} \cdot \frac{2\varepsilon}{2\varepsilon} d\varepsilon < \frac{1}{2\pi\delta (l, m, n)} e^{-\pi \delta^2 (l, m, n)} \end{aligned}$$

De termen van de reeks

$$\sum_{\delta} \int_{\delta}^q e^{-\pi \varepsilon^2 (l, m, n) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon$$

zijn dus kleiner dan die der nieuw gevonden reeks. Deze convergeert voor eindige  $\delta$  (Stelling van Riemann) en hangt niet van  $q$  af. Daarmee is de uniforme convergentie in  $q$  van de reeks van integralen bewezen, en daarmee de termgewijze integratie.

Na deze lange uitweiding keeren wij tot de functie  $\Pi$  terug. Wij voegen aan haar toe

$$\frac{1}{d} \sum_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{\delta} e^{-\pi \varepsilon^2 (l, m, n) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

en zullen nagaan, of men dit bedrag zoo klein kan maken als men zelf wil, als men  $\delta$  maar klein genoeg maakt. Dit is inderdaad het geval. De termen der reeks zijn kleiner dan of gelijk aan

$$\frac{1}{d} \delta e^{-\pi \Theta^2 (l, m, n) - \frac{\kappa^2}{\Theta^2}},$$

wanneer  $\Theta$  een tusschen  $o$  en  $\delta$  gelegen grootheid is. Daar  $\Theta \neq o$  kunnen wij op de reeks van deze termen de  $\theta$ -transformatie toepassen:

$$\sum \frac{1}{d} \delta e^{-\pi \theta^2 (l, m, n) - \frac{\kappa^2}{\theta^2}} = \frac{\delta}{d} \cdot \Theta^{-3} \theta_3 \left( \pi \xi \left| \frac{i}{\Theta^2} \right. \right) \cdot \theta_3 \left( \pi \eta \left| \frac{i}{\Theta^2} \right. \right) \cdot \theta_3 \left( \pi \zeta \left| \frac{i}{\Theta^2} \right. \right) e^{-\frac{\kappa^2}{\Theta^2}}$$

en dit is voor kleine  $\delta$  van de orde van grootte van

$$\delta^{-2} e^{-\frac{\kappa^2}{\delta^2}} \cdot \frac{1}{d}$$

Dit wordt zoo klein, als men zelf wil, voor  $\delta$  klein genoeg.

Wanneer wij dus aan  $\Pi$  de reeks

$$\frac{1}{d} \sum_0^3 e^{-\pi \varepsilon^2 (l, m, n) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon$$

toevoegen en

$$\frac{1}{d} \int_0^3 \theta_3 \left( \pi \xi \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \eta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \zeta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \varepsilon^{-3} e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

weglaten, dan brengen wij daarmee veranderingen aan, die wij zoo klein kunnen maken, als we zelf willen. We hebben daarmee bewezen:

$$\Pi = \sum \frac{1}{d} \int_0^\infty e^{-\pi \varepsilon^2 (l, m, n) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

Uitvoering van de integraal en invoeren van  $x, y, z, k$  i.p.v.  $\xi, \eta, \zeta, \kappa$ , levert de gezochte uitkomst.

$$\Pi = \sum \frac{e^{-k \sqrt{(2dl-x)^2 + \dots + \dots}}}{\sqrt{(2dl-x)^2 + \dots + \dots}} = \sum \frac{e^{-kr}}{r}.$$

Voor  $(\Pi)$  vindt men de zelfde reeks met uitzondering van den term  $l = m = n = 0$ .

Wij hebben hiermee de formules als

$$\begin{aligned}
 A_0 &\equiv \frac{\pi^2}{4d^3} \int_0^p \left[ \theta_3'' \left( \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \theta_3^2 \left( \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \pi^2 \varepsilon^{-3} + 2\pi \varepsilon^2 \right] d\varepsilon + \\
 &+ \frac{1}{4d^3} \int_p^\infty \left[ \sum \left\{ 4\pi^2 \varepsilon^4 l^2 e^{-\pi \varepsilon^2 l^2} - 2\pi \varepsilon^2 e^{-\pi \varepsilon^2 l^2} \right\} \cdot \right. \\
 &\left. \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 m^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 n^2} + 2\pi \varepsilon^2 \right] d\varepsilon = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sum \frac{e^{-kr}}{r}
 \end{aligned}$$

streng bewezen, en daarmee ons doel bereikt. Wij willen echter nog eenige physische beteekenis aan de gebruikte formules hechten, waarbij dan mathematische strengheid wat op den achtergrond mag treden.

Wij willen eerst een derde vorm voor  $\Pi$  afleiden.

Het bewijs in het begin van de paragraaf leerde ons, in het kort gezegd, dat de functie  $\Pi$  niet alleen voor eindige waarden van  $p$  bestond, maar dat men  $p$  ook nog nul kan stellen, en de reeks termgewijze integreeren. Wij moesten dit wat omslachtig bewijzen, omdat het niet vanzelfsprekend is, dat de  $\theta$ -transformatie geldig blijft voor  $\varepsilon = 0$ .

Men kan nu omgekeerd probeeren  $p = \infty$  te stellen, en termgewijze integreeren. Men vindt dan

$$\begin{aligned}
 \Pi &= \frac{1}{d} \int_0^\infty \theta_3 \left( \pi \xi \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \eta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \zeta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \varepsilon^{-3} e^{-\frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon = \\
 &= \frac{1}{d} \int_0^\infty \varepsilon^{-3} \sum e^{-\frac{\pi}{\varepsilon^2} (l^2 + m^2 + n^2) - \frac{\kappa^2}{\varepsilon^2}} \cdot e^{2\pi i (l\xi + m\eta + n\zeta)} d\varepsilon.
 \end{aligned}$$

Integreert men termgewijze, dan:

$$\Pi(x, y, z, k) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2d} \cdot \frac{1}{\pi (l^2 + m^2 + n^2) + \kappa^2} e^{2\pi i (l\xi + m\eta + n\zeta)}.$$

Dit is een Fourier-ontwikkeling, welke overigens niet overal convergeert.

Wij kunnen dus de verschillende uitdrukkingen zoo noemen:

1<sup>o</sup>.  $\sum \frac{e^{-kr}}{r}$ , die de som van de potentialen van de verschillende

roosterpunten voorstelt, en die een periodieke functie is in  $x, y, z$ .

2°. De daaraan (formeel) beantwoordende Fourier-ontwikkeling.

3°. Het compromis tusschen beiden, welke in tegenstelling met 1° en 2° goed convergeert, en waarvan 1° en 2° bijzondere gevallen zijn, n.m.  $p = 0$  en  $p = \infty$ .

§ 5 — De grootheden  $A_0, B_0, \dots, F_0$ . In § 3 hebben wij nagegaan, hoe de functie  $\Pi$  naar  $\infty$  gaat wanneer  $k \rightarrow 0$  nadert. Wij vonden, dat

$$\Pi \sim \frac{1}{2d\kappa^2}$$

eindig bleef.

Stellen wij nu in de integraal uitdrukkingen voor

$$\Pi \sim \frac{1}{2d\kappa^2}, \quad (\Pi) \sim \frac{1}{2d\kappa^2}$$

$\kappa$  werkelijk nul, dan krijgen wij twee nieuwe functies, die wij  $P$  en  $(P)$  noemen:

$$\begin{aligned} P &= \frac{1}{d} \int_0^p \left[ \theta_3 \left( \pi \xi \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \eta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \zeta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) - 1 \right] \varepsilon^{-3} d\varepsilon + \\ &+ \frac{1}{d} \int_p^\infty \left[ \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (l-\xi)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (m-\eta)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (n-\zeta)^2} - \varepsilon^{-3} \right] d\varepsilon \\ (P) &= \frac{1}{d} \int_0^p \left\{ \left[ \theta_3 \left( \pi \xi \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \eta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) \theta_3 \left( \pi \zeta \left| \frac{i}{\varepsilon^2} \right. \right) - 1 \right] \varepsilon^{-3} - \right. \\ &\quad \left. - e^{-\pi \varepsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2)} \right\} d\varepsilon \\ &+ \frac{1}{d} \int_p^\infty \left[ \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (l-\xi)^2} \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (m-\eta)^2} \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (n-\zeta)^2} - \varepsilon^{-3} - \right. \\ &\quad \left. - e^{-\pi \varepsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2)} \right] d\varepsilon. \end{aligned}$$

Men overtuigt zich nu onmiddellijk, dat

$$A_o = \frac{\partial^2}{\partial x^2} (P) (o, o, o)$$

$$B_o = \frac{\partial^2}{\partial x^2} P (d, d, o)$$

of algemeener:

$$\lim_{k \rightarrow o} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Pi = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}.$$

De grootheden  $A_o$  enz. zijn dus tweede afgeleiden van een functie, die wij nu willen onderzoeken.

1°. Wij merken eerst op, dat  $P$  niet afhangt van  $p$ , dat zij 3-voudig periodiek is, en dat zij oneindig wordt wanneer  $\xi, \eta, \zeta$  alle 3 geheele getallen zijn.

2°. Het gedrag in het punt  $\xi = \eta = \zeta = o$  wordt nader aangeduid door het feit, dat ( $P$ ) dan nog convergeert. Echter is

$$\begin{aligned} (P) &= P - \frac{1}{d} \int_0^{\infty} e^{-\pi \varepsilon^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2)} d\varepsilon \\ &= P - \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = P - \frac{1}{r} \end{aligned}$$

In de roosterpunten wordt  $P$  oneindig als  $\frac{1}{r}$ .

3°. Vervolgens leiden wij voor  $P$  een differentiaalvergelijking af. Daartoe bezien wij

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} &= \frac{1}{4d^3} \int_0^p \theta_3'' \left( \pi \xi \mid \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \theta_3 \left( \pi \eta \mid \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \theta_3 \left( \pi \zeta \mid \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \pi^2 \varepsilon^{-3} d\varepsilon + \\ &+ \frac{1}{4d^3} \int_p^{\infty} \sum \{ 4\pi^2 \varepsilon^4 (l - \xi)^2 e^{-\pi \varepsilon^2 (l - \xi)^2} - 2\pi \varepsilon^2 e^{-\pi \varepsilon^2 (l - \xi)^2} \} \cdot \\ &\quad \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (m - \eta)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (n - \zeta)^2} d\varepsilon. \end{aligned}$$

Nu is

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \theta_3 \left( \pi \xi \mid \frac{i}{\varepsilon^2} \right) = -\frac{\pi}{2\varepsilon^3} \cdot \theta_3'' \left( \pi \xi \mid \frac{i}{\varepsilon^2} \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (l - \xi)^2} = - \sum 2\pi \varepsilon (l - \xi)^2 e^{-\pi \varepsilon^2 (l - \xi)^2},$$

zoodat

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} &= - \frac{\pi}{2d^3} \int_0^p \frac{\partial}{\partial \xi} \theta_3 \left( \pi \xi \mid \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \theta_3 \left( \pi \eta \mid \frac{i}{\varepsilon^2} \right) \theta_3 \left( \pi \zeta \mid \frac{i}{\varepsilon^2} \right) d\varepsilon - \\ &- \frac{\pi}{2d^3} \int_p^\infty \varepsilon^3 \frac{\partial}{\partial \xi} \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (l - \xi)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (m - \eta)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (n - \zeta)^2} d\varepsilon - \\ &- \frac{\pi}{2d^3} \int_p^\infty \varepsilon^2 \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (l - \xi)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (m - \eta)^2} \cdot \sum e^{-\pi \varepsilon^2 (n - \zeta)^2} d\varepsilon. \end{aligned}$$

Bereken men nu

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2},$$

dan vindt men na een berekening, geheel analoog aan die op pag. 69, dat dit gelijk is aan

$$\Delta P = \frac{4\pi}{8d^3}$$

Uit deze eigenschappen ziet men echter, dat  $P$  de potentiaal is, veroorzaakt door een rooster van eenheidsladingen en een negatieve ruimtelading van  $1/8d^3$  per eenheid van volume of 1 per cel. Deze potentiaal is drievoudig periodiek, voldoet aan de onder 3° afgeleide differentiaal vergelijking, en wordt oneindig als  $1/r$  in de roosterpunten.

§ 6 — *Conclusies*. Het in de twee laatste paragrafen verkregen materiaal stelt ons nu in staat, de berekening der veldsterkten in een meer algemeen verband te overzien.

Bij berekeningen als die, welke ons hier bezighoudt, zal men het liefst van de potentiaal uitgaan, door eenheidsladingen in de roosterpunten teweeggebracht, en de berekening zoo trachten in te richten, dat men convergerende reeksen krijgt.

Er zijn nu twee manieren mogelijk.

1°. Men gaat van de definitie van de potentiaal uit en schrijft

de potentiaal op, door alle ladingen teweeggebracht. Hierbij dient dan de factor  $e^{-kr}$  om convergentie te verkrijgen. Dit is de manier, die wij op het voetspoor van EWALD hebben gevolgd.

2°. Men kan echter uitgaan van de differentiaalvergelijking, en formeel een Fourierreeks opstellen, die aan de differentiaalvergelijking voldoet. Dit is, o.a. door MADELUNG <sup>11)</sup>, <sup>1)</sup> gedaan. Voor het geval, dat ons hier bezighoudt, zal deze reeks moeten divergeeren, zoodat weer kunstgrepen noodig zijn.

Deze methode is gevolgd door ORNSTEIN en ZERNIKE <sup>12)</sup>. Hun doel is, de potentiaal te berekenen, van een rooster van magneetjes, alle evenwijdig aan een der ribben gericht. Daartoe beschouwen zij eerst de potentiaal van eenheidsladingen, maar brengen een ruimtelading van  $-1$  per cubus aan. Deze potentiaal is identiek met onze functie  $P$ . De Fourierontwikkeling, die men voor haar krijgt, kunnen wij afleiden, door in onze formule voor  $P$   $\rho = \infty$  te stellen, en dan termsgewijze te integreeren:

$$P = \sum_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2d\pi(l^2 + m^2 + n^2)} e^{2\pi i(l\xi + m\eta + n\zeta)}.$$

(vergelijk deze met de Fourierontwikkeling voor  $\Pi$ ). Deze uitdrukking is in menig opzicht onbruikbaar en komt dan ook in de verhandeling niet voor. ORNSTEIN en ZERNIKE vormen hun uitdrukking op die manier, dat zij eerst een laag van dikte  $2d$  beschouwen (dikte in de  $Z$ -richting). De potentiaal, door zoo'n laag uitgeoefend, wordt in een Fourierreeks ontwikkeld, en vervolgens worden de bijdragen van de verschillende lagen gesommeerd. Bij de berekening kan een tijdelijke invoering van  $e^{-kr}$  niet worden vermeden.

De uitdrukking, dan verkregen, is goed bruikbaar, maar  $z$  komt anders voor dan  $x$  en  $y$ , terwijl in onze uitdrukking  $x, y, z$  volkomen gelijkwaardig optreden.

Bij de uitkomst moet dan nog de potentiaal van een positieve ruimtelading gevoegd worden, die de negatieve opheft, waarna door differentieeren de potentiaal, door magneetjes veroorzaakt, wordt gevonden.

Schrijft men de potentiaal op als reeks van potentialen, door elk magneetje veroorzaakt, dan leert de stelling van Riemann, dat deze reeks niet absoluut convergeert (pag. 56) Dit maakt het noodig dat ORNSTEIN en ZERNIKE een bepaalde keuze treffen om



de begrenzing van het kristal (als een bol) tot het oneindige laten naderen.

Keeren wij nu tot ons eigen onderwerp terug. De grootheden  $A_o$ ,  $B_o$  enz. zijn tweede afgeleiden van de functie  $P$ , dus van de potentiaal van eenheidsladingen + negatieve ruimtelading. Men kan ze dus *niet* verkrijgen door de tweede afgeleide te nemen van de potentiaal van een eindig rooster, en dit op een bepaalde manier tot  $\infty$  te laten naderen. Om dit nader in te zien, bezien wij de 2<sup>de</sup> afgeleide in een punt 1, (met weglating van de lading aldaar). Deze oneindige reeks convergeert niet absoluut, maar dit sluit niet uit, dat men wel een voorwaardelijke convergente reeks kan verkrijgen. Heeft men een convergente reeks voor  $\partial^2\Pi/\partial x^2$ , dan

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Pi + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Pi + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Pi = 0$$

en uit symmetrieoverwegingen

$$\frac{\partial^2 \Pi}{\partial x^2} = 0$$

Voor de grootheid  $A_o$  vinden wij

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} (P) (o, o, o) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} (P) (o, o, o) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} (P) (o, o, o) = \frac{\pi}{2d^3}$$

of

$$A_o = \frac{\pi}{6d^3}.$$

een uitdrukking, die wij ook op pag. 70 hebben afgeleid.

Het verschil tusschen beiden komt op rekening van de negatieve ruimtelading.

De veldsterkten zijn verschillen van de grootheden  $A_o$  enz., bijv.

$$\begin{aligned} A_o - C_o \\ A_o - 2 B_o + C_o = A_o - B_o + C_o - B_o \end{aligned}$$

en bij deze aftrekking vallen de verschillen, door de negatieve ruimtelading veroorzaakt, weg.

Deze beschouwingen versterken niet de mathematische grondslag van de berekening, maar willen alleen laten zien, wat onder de limietovergangen verborgen ligt. Had men inplaats van de gebruikte methode de bovenstaande gebruikt, dan had men zich

voortdurend met voorwaardelijk convergente reeksen moeten bezig houden, en de begrenzing op een voorgeschrevene manier naar het  $\infty$  laten gaan. Het zou ons echter te ver voeren, dit in concreto na te gaan. Het vasthouden van de factor  $e^{-kr}$  heeft ons echter van de begrenzing van het kristal onafhankelijk gemaakt, en is dus, mathematisch gesproken, aantrekkelijker.

#### HOOFDSTUK IV

### DE MOGELIJKE RANGSCHIKKINGEN VAN DE MAGNETISCHE DIPOLEN

*Inleiding.* Tot nu toe hebben we de configuraties van de natriumatomen en van de chlooratomen gescheiden beschouwd. In Hoofdstuk II hebben we nagegaan, welke configuraties uithoofde van de symmetrie van het kristal mogelijk waren, terwijl in Hoofdstuk III de veldsterkten werden berekend, die die mogelijke configuraties in de basispunten uitoefenden.

Eveneens vonden we in Hoofdstuk II § 6, dat de symmetrie-eisch ook beperkingen oplegde aan de keus van de chloorconfiguratie, wanneer die van de natriumatomen gegeven was. Hoe het echter met het evenwicht van het rooster is gesteld, kunnen we uit symmetriebeschouwingen niet vinden.

Wij zullen nu aannemen, dat de plaats van de atomen wordt bepaald door de electrostatische krachten, terwijl de magnetische krachten de richting der momentassen bepalen. De magnetische krachten zijn namelijk zeer klein t.o.v. de electrostatische, zoodat zij bij de berekening van den roosterafstand geen rol spelen. Bij magnetisch veld denken we steeds aan het gemiddelde veld. In Hoofdstuk I leidden we af, dat onder omstandigheden ook bij de berekening van het gedrag van twee atomen het veld door het gemiddelde mocht worden vervangen, hier is dit geoorloofd, daar elk atoom zich in het veld van veel atomen bevindt, dat elk oogenblik zeer weinig van het gemiddelde veld zal afwijken.

§ 1 — *Het statisch model.* Wij vonden voor de natriumatomen de volgende mogelijke configuraties:

$$\begin{aligned}
 & \text{I} \quad (1, a; 2, b; 3, c; 4, d), \\
 & -\text{I} \quad (1, -a; 2, -b; 3, -c; 4, -d), \\
 & \text{II} \quad (1, a; 2, c; 3, d; 4, b), \\
 & -\text{II} \quad (1, -a; 2, -c; 3, -d; 4, -b),
 \end{aligned}$$

waarbij nog kwamen III en -III, die echter het spiegelbeeld van II en -II waren, zoodat de beschouwing van deze ons niets nieuws leert.

Voor het chloor vonden we analoge configuraties

$$\begin{aligned}
 & \text{I}', -\text{I}', \text{II}', -\text{II}' \text{ bijv.}; \\
 & \text{I}' \quad (1', a; 2', b; 3', c; 4', d).
 \end{aligned}$$

De benamingen 1, 2, 3, 4, 1', 2', 3', 4', zoowel als de richtingen  $\pm a$ ,  $\pm b$ ,  $\pm c$ ,  $\pm d$  werden in Hoofdstuk II (fig. 1 en 2) bepaald. Eveneens vonden we aldaar (§ 6), dat het kristal slechts symmetrie-elementen bezat, wanneer men aan de natriumconfiguratie I, de chloorconfiguratie I' of -I' toevoegde, en aan II, II' of -II'.

De veldsterkte door een natriumconfiguratie I te weeggebracht heeft de richting  $\pm a$  in 1 en in 1',  $\pm b$  in 2 en in 2',  $\pm c$  in 3 en in 3',  $\pm d$  in 4 en 4'. Bij II vindt men voor de richtingen  $\pm a$  in 1 en 1',  $\pm c$  in 2 en 2',  $\pm d$  in 3 en 3',  $\pm b$  in 4 en 4'.

De veldsterkten, door een chloorconfiguratie I' teweeggebracht, hebben in de aangegeven punten dezelfde richtingen (op het teeken na) als die van I en die van II' dezelfde als die van II (§ 5 en 6).

Tenslotte zijn voor elke configuratie de veldsterkten in 1, 2, 3 en 4 in grootte en teeken (t.o.v. de richting van het moment) onderling gelijk, en eveneens de veldsterkten in 1', 2', 3', 4'.

In het vorige hoofdstuk werden die veldsterkten door berekening gevonden. Wanneer we de natrium- en de chlooratomen hetzelfde moment  $\mu$  toeschrijven, is de veldsterkte, door I in 1 teweeggebracht, gelijk aan die, door I' in 1' veroorzaakt, en die door I in 1' veroorzaakt, gelijk aan die van I' in 1.

We kunnen, met de hierboven geresumeerde uitkomsten uit de twee vorige hoofdstukken nu nagaan, wat het veld is, dat op een natrium- of chlooratoom werkt. Deze veldsterkte is de resultante van de veldsterkten, alleen door de natriumatomen en alleen door de chlooratomen teweeggebracht. Onder  $\mu$  verstaan we het magnetische moment van een atoom, waarbij we de diamagnetische

vermindering door het veld van de andere atomen veroorzaakt, verwaarloozen. (pag. 36).

Voor de mogelijke roosters vinden we:

*A I, I'*. De veldsterkte, door het chloor in een punt *I* veroorzaakt, is  $\mu/4d^3$ . 30,08 met richting *a*.

Het natriumrooster, met uitsluiting van het ion, dat zich in het bedoelde punt bevindt, oefent een veldsterkte uit  $-\mu/4d^3$ . 8,59, dus in de richting  $-a$ .

De totale veldsterkte heeft de richting *a*, dus van het moment aldaar, en is

$$H = \frac{\mu}{4d^3} (30,08 - 8,59) = \frac{\mu}{4d^3} \cdot 21,49.$$

De veldsterkte in *r'* heeft dezelfde grootte en richting.

*B, I, -I'*. In *I* vinden we dezelfde veldsterkte voor het natriumrooster; die, door het chloorrooster veroorzaakt heeft nu het omgekeerde teeken. De veldsterkte is nu

$$H = -\frac{\mu}{4d^3} (30,08 + 8,59) = -\frac{\mu}{4d^3} \cdot 38,67,$$

en heeft de omgekeerde richting van het moment. In *r'* vinden we dezelfde veldsterkte met richting  $+a$ , terwijl het chloormoment de richting  $-a$  heeft.

*C II, II'*. Een natriumion in *I* ondervindt van de andere natriumionen een veldsterkte  $\mu/4d^3$ . 4,29 in de richting *a*, en van de chloorionen  $-\mu/4d^3$ . 15,04. Ook hier is de totale veldsterkte tegengesteld gericht aan het moment:

$$H = -\frac{\mu}{4d^3} (15,04 - 4,29) = -\frac{\mu}{4d^3} \cdot 10,75.$$

*D II, -II'*. Het teeken van de chloorveldsterkte keert om, zoodat

$$H = \frac{\mu}{4d^3} (15,04 + 4,29) = \frac{\mu}{4d^3} \cdot 19,33$$

met richting  $+a$ . Bij *C* en *D* hebben we niet meer de veldsterkte in *r'* nagegaan, ook deze blijkt in *C* tegengesteld te zijn aan het moment, in *D* gelijkgericht. De overige basispunten behoeften we niet te onderzoeken daar, wat voor *I* geldt, ook geldt, m. m. voor 2, 3, 4.

Deze vier modellen zullen we *statische modellen* noemen. Zij bezitten symmetrie, o.a. de 4 drietallige assen. *A* en *B* hebben een hogere symmetrie dan *C* en *D*. Bij *A* en *D* liggen in elk basispunt veldsterkte en moment in dezelfde richting, bij *B* en *C* in tegengestelde richting.

§ 2 — *Het dynamisch model*. Men kan zich afvragen, of niet modellen mogelijk zijn, waarbij het moment en de veldsterkte in een basispunt een hoek met elkaar maken. De symmetrie schijnt een dergelijk model te verbieden. Deze eischt toch, dat zoowel moment als veldsterkte in elk basispunt de richting van een zelfde lichaamsdiagonaal van de eenheidscel moeten hebben, indien de drietallige assen in het kristal zullen voorkomen. Wij moeten nu bedenken, dat een atoom in een magnetisch veld, dat een hoek maakt met de momentas, een praecessie-beweging volvoert. Dit leidt ons tot de vraag: Zijn er modellen mogelijk, waarin elk atoom een praecessie volvoert, zoo, dat de gemiddelde standen der atomen aan de symmetrievorwaarden voldoen? Een dergelijk model zullen we een *dynamisch model* noemen.

Inderdaad is het mogelijk, zulke modellen samen te stellen. We gaan daartoe uit van een der statische modellen, in de vorige paragraaf besproken. Elk moment draaien we over een zekeren hoek uit zijn stand, en dit moment laten we met constante snelheid een cirkelkegel om den symmetrischen stand beschrijven. Het is duidelijk, dat hierdoor aan de symmetrie van het kristal niets wordt veranderd. Deze praecessie moge de orde van grootte van de Larmorpraecessie hebben, en dus klein zijn t.o.v. de hoeksnelheid der electronen in een atoom. Het gemiddelde veld, op de plaats van een basispunt (gemiddeld voor den tijd, waarin de electronen hun omloop volbrengen) is dus langzaam veranderlijk, en we mogen, daar het veld zwak is, de stelling van Larmor toepassen (Hoofdstuk I § 8). Daartoe moet men het veld berekenen, dat de praecederende momenten teweegbrengen.

Dit is nu in sommige gevallen zeer eenvoudig te doen. Wij maken daartoe gebruik van de resultaten in § 7 van Hoofdstuk III verkregen, en beschouwen de natrium- en de chloorroosters aanvankelijk afzonderlijk.

Hier vonden we configuraties, waarbij in elk basispunt de veld-

sterkte dezelfde of tegengestelde richting had als het moment aldaar, en waar de veldsterkte in een punt  $j$  en een punt  $j'$  dezelfde of tegengestelde richting had, juist als bij de symmetrische configuraties I, II. Men kan ze ontstaan denken door de superpositie van drie symmetrische configuraties, die alle tot hetzelfde type I of II behooren, doch welke in het punt 1 momenten in de richtingen  $b, c, d$  hebben, met de grootte  $\mu_1, \mu_2, \mu_3$ . Gaat men van I uit, dan zijn de drie configuraties  $b a d c, c d a b, d c b a$ , zoodat de momenten zijn

$$\begin{aligned} \text{in 1} \quad \mu &= \mu_1 b + \mu_2 c + \mu_3 d \\ \text{in 2} \quad \mu &= \mu_1 a + \mu_2 d + \mu_3 c \\ \text{in 3} \quad \mu &= \mu_1 d + \mu_2 a + \mu_3 b \\ \text{in 4} \quad \mu &= \mu_1 c + \mu_2 b + \mu_3 a. \end{aligned} \tag{1}$$

Gaat men van II uit, dan zijn de configuraties:

$b d c a, c a b d, d b a c$ , en de momenten

$$\begin{aligned} \text{in 1} \quad \mu &= \mu_1 b + \mu_2 c + \mu_3 d \\ \text{in 2} \quad \mu &= \mu_1 d + \mu_2 a + \mu_3 b \\ \text{in 3} \quad \mu &= \mu_1 c + \mu_2 b + \mu_3 a \\ \text{in 4} \quad \mu &= \mu_1 a + \mu_2 d + \mu_3 c \end{aligned} \tag{2}$$

Men kan het moment in 1 willekeurig in grootte en richting aannemen, steeds is dan  $\mu$  te schrijven:

$$\mu = \mu_1 b + \mu_2 c + \mu_3 d.$$

Hierdoor  $\mu_1, \mu_2, \mu_3$  gegeven zijnde, is het mogelijk, de momenten  $\mu$  in de andere punten aan te geven.

Men overtuigt zich gemakkelijk, dat elk moment een vasten hoek maakt met de richting van een symmetrische configuratie, die tot dezelfde groep behoort, bijv.  $abcd$  of  $acdb$ . Immers rekest men uit (voor I)

$$\text{in 1} \quad (\mu a) = \mu_1 (ab) + \mu_2 (ac) + \mu_3 (ad),$$

$$\text{in 2} \quad (\mu b) = \mu_1 (ba) + \mu_2 (bd) + \mu_3 (bc),$$

enz.

dan zijn al deze scalaire producten gelijk, daar

$$(ab) = (bc) = (ca)$$

enz.

Verder bleek, dat de veldsterkte in een basispunt 1  $\mu f$  was, in

een punt  $r' \mu g$ , waarbij  $f$  en  $g$  dezelfde grootte hebben als in de bijbehorende symmetrische configuraties.

Nu laat men het moment in  $r$  eenparig een cirkelkegel beschrijven om de richting  $a$ . Wanneer nu het natriumrooster op elk tijdstip een superpositie van drie symmetrische configuraties zal voorstellen, dan is kinematisch de beweging van de momenten in 2, 3, 4 ook bepaald. Ze beschrijven cirkelkegels, met dezelfde opening en dezelfde frequentie om de richtingen in de punten 2, 3, 4, welke met de richting  $a$  in  $r$  een symmetrische configuratie I of II vormen. Nu is duidelijk, dat de magnetische veldsterkte in  $r$ , door de natriumconfiguratie veroorzaakt, ook een cirkelkegel om  $a$  beschrijft, daar ze steeds dezelfde richting heeft als het moment. Verder zal ze in  $r'$  ook een omwentelingskegel om  $a$  beschrijven, in 2 een om dezelfde richting als in  $2'$ , enz. Voor een chloorconfiguratie gelden dezelfde beschouwingen.

Wanneer we nu natrium- en chloorconfiguraties in elkaar passen, zullen we aan een natriumconfiguratie, die met behulp van symmetrische configuraties I is opgebouwd, een chloorconfiguratie toevoegen, die met I' samenhangt. Eveneens zullen we naast II alleen II' toelaten. Op pag. 47 bewezen we reeds, dat dan de momenten in de punten  $j$  en  $j'$  steeds denzelfden hoek met elkaar maken. Dit geldt dus ook voor de veldsterkten, die in een basispunt door het natrium en het chloor worden veroorzaakt, daar deze de zelfde richting hebben als de momenten in die punten.

Verder laten we het natrium-ion in  $r$  en het chloor-ion in  $r'$  elk een willekeurigen hoek met de richting  $a$  maken, en vervolgens om die richting roteeren. Naar gelang wij I of II als grondslag kiezen, zijn dan door formule (1) of (2) de standen van de andere momenten bepaald. We onderstellen verder

1°, dat de omloopstijd voor natrium- en chloormomenten dezelfde is,

2°, dat in een roosterpunt de natriumveldsterkte en de chloorveldsterkte in denzelfden zin rondloopen.

De veldsterkte in een basispunt is dan de resultante van twee veldsterkten, die elk in denzelfden zin, en met denzelfden omlooptijd een cirkelkegel beschrijven. De totale veldsterkte roteert dus ook eenparig. Daar de samenstellende veldsterkten in elk basis-



punt denzelfden hoek met elkaar maken, zal ook de resulterende veldsterkte in elk basispunt even groot zijn. Ons rest dus na te gaan, of een atoom een roterende beweging in een roterend magnetisch veld kan volvoeren, en verband te leggen tusschen de openingen van de kegels, die het natriummoment en het chloormoment beschrijven.

§ 3 — *De beweging van een atoom in een roterend magnetisch veld.* Om de vraag, in de vorige paragraaf opgeworpen, te kunnen beantwoorden, gaan wij het beste op meetkundige wijze te werk. Wij stellen het veld op de plaats van de kern voor door den vector  $\mathbf{H}$ , en nemen aan, dat het veld in het gebied van het atoom voldoende homogeen is, zooals wij bij de afleiding van de stelling van Larmor veronderstelden. De vector  $\mathbf{H}$  moge nu een rotatie volvoeren, die door den vector  $\boldsymbol{\omega}$  wordt voorgesteld. (fig 6).

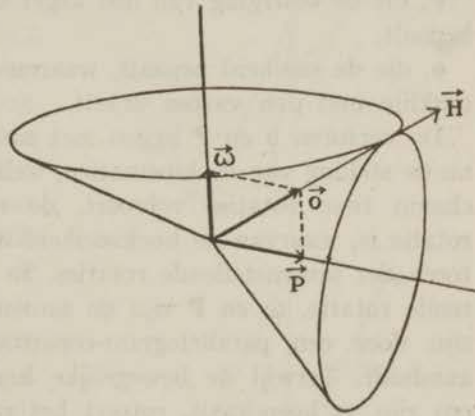


Fig. 6

Uit de stelling van Larmor volgt nu, dat er een zich bewegend assenstelsel bestaat, waarin het atoom de zelfde beweging volvoert, als bij afwezigheid van een uitwendig veld t.o.v. een vast assenstelsel. In dit bewegend assenstelsel heeft dus de momentas een vasten stand. De beweging van dit assenstelsel bestaat elk oogenblik uit een rotatie om de as door  $H$ , met de grootte

$$\boldsymbol{\omega} = - \frac{e}{2mc} \mathbf{H},$$

(daar  $e$  negatief is, hebben in de figuur  $\boldsymbol{\omega}$  en  $\mathbf{H}$  de zelfde richting). Een dergelijke beweging kan men kinematisch voorstellen door twee cirkelkegels eenparig op of om elkaar te laten rollen. Om dit in te zien, denke men zich de kegel, door den roterenden vector

$\mathbf{o}$  beschreven, vast, en men late een voorloopig willekeurige omwentelingskegel met de as  $P$  er langs rollen. Inderdaad is nu elk oogenblik de beweging van den rollenden kegel een rotatie om de raaklijn met den vasten kegel, en deze raaklijn beweegt zich eenparig over den mantel van den vasten kegel.

Men kan de beweging van den kegel ook nog anders beschrijven. Bij het rollen draait de kegel om zijn eigen as  $P$ , en deze as  $P$  wordt met dezelfde hoeksnelheid  $\omega$  als de raaklijn der twee kegels rondgedraaid. Men heeft dus drie rotaties:

$\omega$ , die de as  $P$  en de raaklijn  $\mathbf{o}$  doet omloopen,

$\mathbf{P}$ , die de beweging van den kegel van uit zijn eigen as bezien, bepaalt,

$\mathbf{o}$ , die de snelheid bepaalt, waarmee de rollende kegel om zijn raaklijn met den vasten draait.

De vectoren  $\mathbf{o}$  en  $\mathbf{P}$  liggen met  $\omega$  in een vlak. Wij gebruiken nu de stelling van de kinematica, welke zegt dat, wanneer een lichaam twee rotaties volvoert, de resulterende beweging een rotatie is, waarvan de hoeksnelheid de resultante is van de vectoren der samenstellende rotaties. In ons geval is  $\mathbf{o}$  de resulterende rotatie,  $\omega$  en  $\mathbf{P}$  zijn de samenstellende. De drie vectoren zijn door een parallelogram-constructie verbonden, als fig. 6 aanduidt. Terwijl de bewegelijke kegel met de hoeksnelheid  $\mathbf{P}$  om zijn as heendraait, roteert het parallelogram  $\omega \mathbf{o} \mathbf{P}$  met de hoeksnelheid  $\omega$  om de  $Z$ -as.

De moment-as van het atoom is, zooals we reeds hebben opgemerkt, vast in het bewegelijke assensstelsel. Dit geldt eigenlijk alleen voor  $\mu_0$ , we stellen echter  $\mu = \mu_0$ , met verwaarloozing van de diamagnetische vermindering (pag. 93). Ze beschrijft dus een kegel, waarvan de doorsnede met een vlak, loodrecht op de  $Z$ -as, aan een epicycloïde doet denken. Het probleem is trouwens geheel analoog aan dat, waarbij een bewegelijke cirkel over een vasten cirkel rolt, en de baan wordt onderzocht van een punt, dat vast in den bewegelijken cirkel ligt.

Wanneer echter de moment-as dezelfde richting heeft als de as  $P$ , zal zij een cirkelkegel om de  $Z$ -as beschrijven. Haar hoek met de  $Z$ -as blijft dan, en alleen dan, even groot.

*Wanneer dus het veld  $\mathbf{H}$  en zijn rotatie  $\omega$  gegeven zijn, is er een stand mogelijk van het moment, waarbij dit, onder invloed van het*

veld, ook een eenparige rotatie  $\omega$  beschrijft. Het moet de richting  $\mathbf{P}$  of  $-\mathbf{P}$  hebben, als

$$\mathbf{P} = \mathbf{0} - \omega \quad (3)$$

§ 4 — *De mogelijke dynamische modellen.* Een dynamisch model, als in § 2 beschreven, is dus zeker mogelijk. Er blijft dus nog over, verband tusschen de openingen van de kegels te leggen, welke door de natrium- en chloormomenten worden beschreven. Het is nu voldoende, slechts een natriumatoom in  $\mathbf{r}$  en een chlooratom in  $\mathbf{r}'$  te beschouwen. Wij zagen op pag. 95, dat de veldsterkten in alle punten 1, 2, 3, 4, 1, 2, 3, 4, even groot zijn. Gaat men van de symmetrische configuratie I uit, dan is de hoek, die de veldsterkte in 1 maakt met  $a$ , dezelfde, welke de veldsterkte in 2 met  $b$  maakt, in 3 met  $c$ , in 4 met  $d$ . Hetzelfde geldt voor de veldsterkten in  $\mathbf{r}'$ ,  $2'$ ,  $3'$ ,  $4'$  en voor de momenten. Gaat men van II uit, dan moet de volgorde  $abcd$  door  $acdb$  worden vervangen.

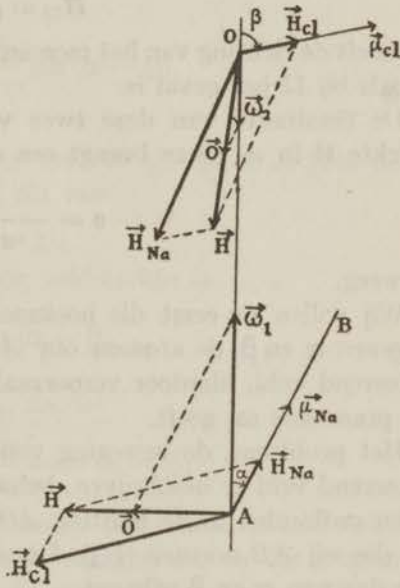


Fig. 7

In fig. 7 moge nu  $A$  een punt  $\mathbf{r}$  voorstellen,  $AO$  de lijn door  $A$  met de richting  $a$ , en  $O$  het dichtstbijzijnde punt  $\mathbf{r}'$ . We zullen de momenten van de chloor- en natriumatomen weer even groot stellen, en de hoeken, die ze met de richting  $a$  maken, resp.  $\beta$  en  $\alpha$  noemen. Wanneer  $\alpha$  en  $\beta$  nul zijn, hebben we een statisch stelsel, zooals dat in § 1 werd besproken, en wel  $A$  of  $C$ . Is  $\alpha = 0$ ,  $\beta = \pi$ , dan is dit het statisch stelsel  $B$  of  $D$ .

Nu is de vraag: Is een stelsel met de hoeken  $\alpha$  en  $\beta$  mogelijk, gesteld, dat de atomen een praecessie volvoeren, en zoo ja, hoe

groot is dan die praecessie, en hoe groot zijn dan de hoeken? Wij beantwoorden deze vraag als volgt.

De veldsterkte, die het natriumrooster in  $A$  uitoefent, is

$$H_{Na} = f\mu$$

en heeft de richting van het moment in  $A$ . In de figuur is  $f$  positief genomen, dit is het geval bij de modellen, die op de symmetrische configuratie II berusten. Bij I is  $f$  tweemaal zoo groot, en negatief (pag. 72). De veldsterkte, die het chloorrooster uitoefent, is

$$H_{Cl} = g\mu$$

en heeft de richting van het moment in  $O$ . In de figuur is  $g$  negatief, zooals bij II het geval is.

De resultante van deze twee veldsterkten is de totale veldsterkte  $H$  in  $A$ . Deze brengt een momentane rotatie

$$\mathbf{o} = -\frac{e}{2mc} \mathbf{H}$$

te weeg.

Wij willen nu eerst die hoeksnelheid  $\omega_1$  zoeken, waarmee bij gegeven  $\alpha$  en  $\beta$  de atomen om  $AO$  moeten roteeren, opdat het roteerend veld, hierdoor veroorzaakt, aan het moment in  $A$  juist de praecessie  $\omega_1$  geeft.

Het probleem, de beweging van een magnetisch atoom in een roteerend veld te beschrijven, behandelden we in § 3. Wij moeten  $\mathbf{o}$  nu ontbinden in de richting  $AO$  en in die van het moment in  $A$ , die wij  $AB$  noemen (§ 3). De eerste ontbondene moet  $\omega_1$  zijn, die dus van  $\alpha$  en  $\beta$  afhangt.

Daar nu  $\mathbf{o}$  met  $AO$  en  $AB$  in een vlak moet liggen, volgt hieruit dat ook  $H_{Cl}$  in  $AOB$  ligt, en ten slotte, dat de momenten in  $A$  en  $O$  in een vlak met  $AO$  moeten liggen.

Wanneer men nu de berekening herhaalt voor het moment in  $O$ , vindt men in het algemeen een andere waarde:  $\omega_2$ . De tweede voorwaarde is dan

$$\omega_1 = \omega_2 \tag{4}$$

en hieruit vinden we een verband tusschen de hoeken  $\alpha$  en  $\beta$ .

Om nu  $\omega_1$  en  $\omega_2$  in  $\alpha$  en  $\beta$  uit te drukken, zullen we alle vectoren in  $A$  in de richtingen  $AO$  en  $AB$  ontbinden. De hoeken  $\alpha$  en  $\beta$  specificeren we nader als de hoeken, die de momenten maken

met de richting  $AO$ , vanaf  $AO$  geteld met de wijzers van het uurwerk mee. Wanneer we een waarde voor den hoek  $\alpha$  aannemen, kan  $\beta$  nog van  $0$  naar  $2\pi$  loopen. Daarentegen beweegt  $\alpha$  zich slechts tusschen  $0$  en  $\pi/2$ . Dit zien we in, wanneer we bijv.  $\alpha$  en  $\beta$  tusschen  $\pi/2$  en  $\pi$  inleggen. Keeren we dan den richtingszin van  $AO$  om, dan hebben we het geval, waar  $\alpha$  en  $\beta$  tusschen  $0$  en  $\pi/2$  liggen.

Wanneer nu een vector  $\mathbf{P}$ , die een hoek  $\beta$  maakt met  $AO$ , ontbonden wordt langs  $AO$  en  $AB$ , terwijl  $\angle OAB = \alpha$ , dan is de ontbondene langs  $AO$

$$P_1 = \frac{P}{\sin \alpha} \sin (\alpha - \beta),$$

voor alle waarden van  $\alpha$  en  $\beta$ .

Nu tot fig. 7 terugkeerende, merken we op, dat  $H_{Na}$  geen ontbondene langs  $AO$  bezit, terwijl die van

$$H_{Cl} = g\mu,$$

en dus ook van de resulterende veldsterkte is

$$\frac{g\mu}{\sin \alpha} \sin (\alpha - \beta)$$

De ontbondene van  $\mathbf{0}$  is juist  $\omega_1$ , zoodat

$$\omega_1 = -\frac{e}{2mc} \frac{g\mu}{\sin \alpha} \sin (\alpha - \beta).$$

Voor  $\omega_2$  in  $O$  geldt dezelfde berekening, hier is het het veld van de natriumatomen, dat door  $g\mu$  wordt voorgesteld, en dat een ontbondene langs  $AO$  heeft. Wij behoeven slechts in  $\omega_1$ , de hoeken  $\alpha$  en  $\beta$  te verwisselen:

$$\begin{aligned} \omega_2 &= -\frac{e}{2mc} \frac{g\mu}{\sin \beta} \sin (\beta - \alpha) \\ &= \frac{e}{2mc} \frac{g\mu}{\sin \beta} \sin (\alpha - \beta). \end{aligned}$$

De gezochte voorwaarde (4) is dus

$$\sin \alpha \sin (\alpha - \beta) + \sin \beta \sin (\alpha - \beta) = 0.$$

De oplossingen zijn, wanneer  $\alpha$  tusschen  $0$  en  $\pi/2$ ,  $\beta$  tusschen  $0$  en  $2\pi$  blijft:

$$\beta = \alpha, \quad \beta = \pi + \alpha, \quad \beta = 2\pi - \alpha.$$

De twee eerste oplossingen leveren echter

$$\omega_1 = \omega_2 = 0$$

Inderdaad hebben dan de vectoren  $\mathbf{H}_{Na}$ ,  $\mathbf{H}_{Cl}$ ,  $\mathbf{o}$  en  $\boldsymbol{\mu}$  in een punt dezelfde richting. Elk ion staat in de richting van het eigen veld. Dit is een statisch model, dynamisch mogelijk, maar niet symmetrisch, en daarom te verwerpen.

Voor  $\alpha = 0$  gaan deze modellen in de statische van § 1 over.

De eenige mogelijkheid is dus

$$\beta = 2\pi - \alpha.$$

Dit beteekent, dat de natrium- en chloormomenten op de lijn  $AO$  gelijke hoeken met deze maken, maar zich aan verschillende zijden bevinden (fig. 8).

Verder is

$$\begin{aligned} \omega &= -\frac{e}{2mc} g\mu \frac{\sin(2\alpha - 2\pi)}{\sin \alpha} \\ &= -\frac{e}{2mc} 2g\mu \cos \alpha. \end{aligned}$$

Voor  $g$  kan men de waarden van pag. 72 invoegen, al naar gelang men een configuratie

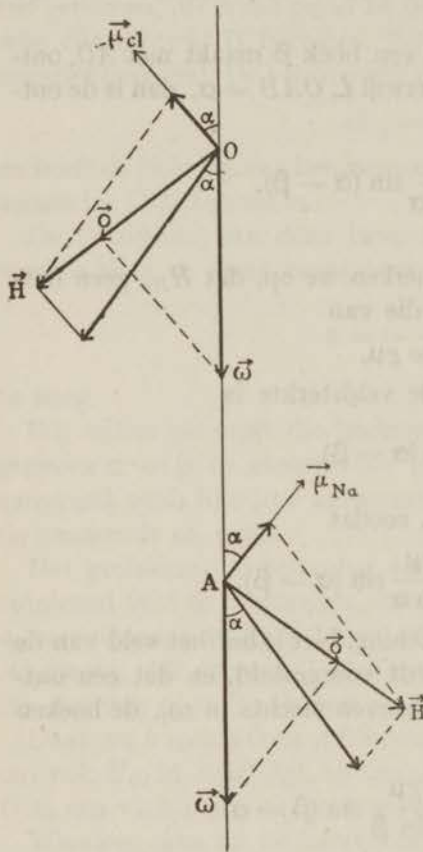


Fig. 8

I of II tot grondslag heeft gelegd.

§ 5 — *Resumé en slotbeschouwing.* Wij zijn dus tot het volgende resultaat gekomen. Er zijn twee groepen van modellen, die zich onderscheiden door hun symmetrieëlementen. In elke groep zijn

twee modellen, waarin de momenten dezelfde of tegengestelde richting als de veldsterkte aldaar hebben. Dit zijn dus vier modellen, die wij in § 1 hebben besproken, en daar  $A, B, C, D$  hebben genoemd. Bij twee van deze vier,  $A$ , die tot de eerste,  $C$ , die tot de tweede groep behoort, heeft een chloormoment dezelfde richting als de natriummomenten, die zich op de hoekpunten van den cubus bevinden, waarvan het bovengemelde chlooraatoom het midden vormt. Bij de twee andere heeft het chloormoment de tegengestelde richting als de natriummomenten.

Deze twee laatste modellen,  $B$  en  $D$  zijn geïsoleerd, aan  $A$  en  $C$  sluiten zich daarentegen een rij modellen aan, die wij dynamische hebben genoemd. Bij deze modellen beschrijven alle momenten cirkelkegels met dezelfde opening om de richtingen die zij in de statische modellen  $A$  en  $C$  zouden hebben. Deze opening hebben wij  $\alpha$  genoemd, en voor de daarbij behorende praecessie  $\omega$  vonden wij in de vorige paragraaf

$$\omega = -\frac{e}{2mc} \cdot 2g \mu \cos \alpha.$$

Men kan de hoek  $\alpha$  laten aangroeien tot  $\pi/2$ . Voor deze waarde echter liggen  $H_{Cl}$ ,  $H_{Na}$  en  $\mu$  weer in een richting en is  $\omega$  nul. Dit model is dan statisch en niet symmetrisch.

Terwijl  $\alpha$  van  $0$  tot  $\pi/2$  loopt, doorloopt de hoek, dien de veldsterkte met het moment maakt, alle waarden tusschen  $0$  en  $\pi$ . In fig. 8, die voor een model van de tweede groep is geteekend, ziet men, hoe voor  $\alpha = 0$  de bedoelde hoek  $\pi$  is (zooals reeds in § 1 voor  $C$  werd opgemerkt), en hoe bij het groter worden van  $\alpha$  deze hoek afneemt, tot hij voor  $\alpha = \pi/2$  nul is geworden. Voor een model van groep I zijn  $f$  en  $g$  elk  $-2$ maal zoo groot, hier heeft dus  $H$  de tegengestelde richting als in II en loopt de hoek tusschen moment en veldsterkte van  $0$  tot  $\pi$ .

*Men kan dus voor elken gegeven hoek tuschen moment en veldsterkte in de basispunten, twee modellen vinden, die symmetrie bezitten, en dynamisch mogelijk zijn.*

Meer speciaal kan dus steeds aan den eisch worden voldaan, dat veldsterkte en moment loodrecht op elkaar staan. In dit geval is

$$\cos 2\alpha_0 = \frac{|H_{Na}|}{|H_{Cl}|} = \frac{|f|}{|g|} = \frac{1}{3.52}$$

welke waarde zoowel voor I als voor II geldt. De figuur 8 is voor dezen hoek  $\alpha_0$  geteekend.

#### LITERATUURLIJST

- 1 — *M. Born* — Atomtheorie des festen Zustandes. pag. 709 v.v.
- 2 — *P. Ewald* — Annalen der Physik. 49
- 3 — *P. Langevin* — Annales de Chimie et Physique. 8.5.
- 4 — *H. A. Lorentz* — Congrès Solvay 1921.
- 5 — *A. D. Fokker* — Physica I. pag. 129.
- 6 — *Riemann-Weber* — Partielle Differentialgleichungen. I 6te Auflage. pag. 28.
- 7 — *Whittaker and Watson* — Modern Analysis. Ch. XXI. pag. 462.
- 8 — *Jahnke und Emde* — Funktionentafeln. pag. 33 v.v.
- 9 — *A. Hurwitz* — Math. Annalen 44, 1894, pag. 83.
- 10 — *Czuber* — Differential & Integral Rechnung. II. pag. 160.
- 11 — *E. Madelung* — Physikalische Zeitschrift. 19. pag. 524.
- 12 — *L. S. Ornstein & F. Zernike* — Academie van Wetenschappen. Amsterdam. XXVII 1. pag 396.



