

Theorie der unelastischen Stösse zwischen Atomen

Autor(en): **Stueckelberg, E.C.G.**

Objektyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **5 (1932)**

Heft VI

PDF erstellt am: **08.05.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-110177>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.

Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.

Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

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

Theorie der unelastischen Stöße zwischen Atomen

von E. C. G. Stueckelberg in Basel.

(28. XI. 32.)

Kurze Inhaltsangabe.

- § 1. **Einleitung:** Dieser § enthält die Problemstellung und die aus der Arbeit hervorgehenden Resultate in kurzer Zusammenfassung.
- § 2. **Die Formulierung des Problems. (Zweiatomiges Molekül.)**
- § 3. **Grenzbedingungen und Wirkungsquerschnitt:** Dieser § enthält die nötigen Definitionen zur Errechnung der Wirkungsquerschnitte.
- § 4. **Die Formulierung des Problems nach der Born-Dirac'schen Theorie:** Diese Formulierung unterscheidet sich von § 2 in für die Arbeit wichtigen Punkten.
- § 5. **Beispiel einer strengen Lösung.**
- § 6. **Die angenäherten Lösungen:** Hier wird das Störungsverfahren kurz diskutiert.
- § 7. **Vergleich der London'schen mit der Born-Dirac'schen Näherung:** Dieser Abschnitt vergleicht die Ansätze des § 2 und § 4.
- § 8. **Das Anschlussverfahren der Näherungsfunktionen in den Umkehrpunkten:** Hier werden die für die folgenden § verwendeten Näherungsfunktionen aufgestellt und das W. K. B.¹⁾ Verfahren von einem neuen Gesichtspunkte aus erläutert.
- § 9. **Das Anschlussverfahren der Näherungsfunktionen in der Überschneidungs-
gegend: (Fall II):** Der § diskutiert den Fall sich schneidender Potentialkurven.
- § 10. **Das Anschlussverfahren für den Fall I (ψ auf der reellen Axe überall grösser
als null):** Hier wird der Fall sich nicht schneidender Potentialkurven behandelt.
- § 11. **Abschätzung der Matrixelemente $|\eta_{1J}|^2$ nach dem Störungsverfahren:** Für einige Fälle wird hier das Verfahren des § 6 angewendet.
- § 12. **Bestimmung des Wirkungsquerschnittes in Fall I (kein Überschneiden
der Kurven).**
- § 13. **Der Wirkungsquerschnitt im Resonanzfall.**
- § 14. **Bestimmung des Wirkungsquerschnittes im Fall II (Überschneidungsfall).**
- § 15. **Die Ionisation von Edelgasen durch Alkaliionen:** Die Resultate des § 14 werden auf Ionenstossversuche angewendet.
- § 16. **Zusammenfassung.**

§ 1. Einleitung.

Das Problem des unelastischen Stosses zwischen zwei Atomen reduziert sich, wenn es erlaubt ist nur zwei Elektronenzustände jedes Atoms zu berücksichtigen, immer auf unendlich viele Systeme von je zwei gekoppelten linearen Differentialgleichungen zweiter Ordnung mit einer unabhängigen Variablen r , welche den Abstand zwischen den beiden Systemschwerpunkten darstellt.

Ist die für die Übergänge verantwortlich zu machende Wechselwirkungsenergie zwischen den beiden Elektronenzuständen im Bereiche reeller Geschwindigkeiten klein gegen die vom Abstand abhängige Termdifferenz, so kann man mit FRANCK von potentiellen Energiekurven der beiden Elektronenzustände sprechen. Die Begriffe „sich schneiden“ und „sich nicht schneiden“ haben dann im folgenden den Sinn, dass die Kurven für *fehlende Wechselwirkungsenergie* sich schneiden oder nicht schneiden. Die Tatsache, dass Übergänge auftreten bedeutet ja schon, dass das Bild der potentiellen Energiekurven nicht mehr streng richtig sein kann.

Das Auftreten einer Wechselwirkung bewirkt immer, dass die beiden Kurven sich im Überschneidungsgebiet abstossen. Die Wechselwirkung zwischen zwei Termen kann in zwei Teile zerlegt werden: in einen von der Rotationsenergie unabhängigen und in einen von der Rotationsenergie (Quantenzahl J) abhängigen. Die Franck'schen Kurven zeichnet man im ganzen für $J = 0$. Haben die Elektronenterme verschiedene Symmetrieeigenschaften oder verschiedene Quantenzahlen Λ (resp. Ω) (= Elektronendrehimpulsquantenzahl um die Kernverbindungsachse), so verschwindet der zweite Teil¹⁾. Ist das nicht der Fall, so bewirkt dieser zweite Teil, dass die Kurven auch für $J = 0$ sich nicht schneiden. Die Kurven kommen sich also nur nahe. In Figur 1 ist der Fall des „Überschneidens“ und „Nahekommens“ gezeichnet. Man kann also in beiden Fällen annehmen, dass die Kurven sich schneiden, je nachdem man die Äste A_1B_1 und A_0B_0 zuordnet, da im Überschneidungsgebiet die Kurven ihre Bedeutung verlieren.

Wählt man das Bild der Überschneidung, und ist die durch die Wechselwirkung bedingte Übergangswahrscheinlichkeit klein gegen 1, so kann man das Franck'sche Bild in erster Näherung auch im Überschneidungsgebiet gelten lassen und die Übergangswahrscheinlichkeiten nach der Störungstheorie ermitteln. Ist dies jedoch nicht mehr der Fall, so kann man insofern von „schneiden“ sprechen, als man links und rechts die Wellenfunktionen der Elektronenkonfiguration in Beziehung bringen kann. Die

¹⁾ J. v. NEUMANN und E. WIGNER, Phys. Zeitschr. 30, 467 (1929).

„Schnittgegend“ hat dann, für die asymptotische Darstellung der Wellenfunktion ähnliche Eigenschaften wie die Umkehrpunkte der klassisch-mechanischen Bewegung. Im § 9 wird ein dem WENTZEL, KRAMERS, BRILLOUIN'schen²⁾ analoges Anschlussverfahren beschrieben, welches gestattet die Übergangswahrscheinlichkeiten für beliebig grosse Wechselwirkungsenergien zu ermitteln, wenn die Schnittgegend mit reeller Geschwindigkeit durchfahren wird. Betrachten wir einen Wahrscheinlichkeitsstrom der Stärke 1,

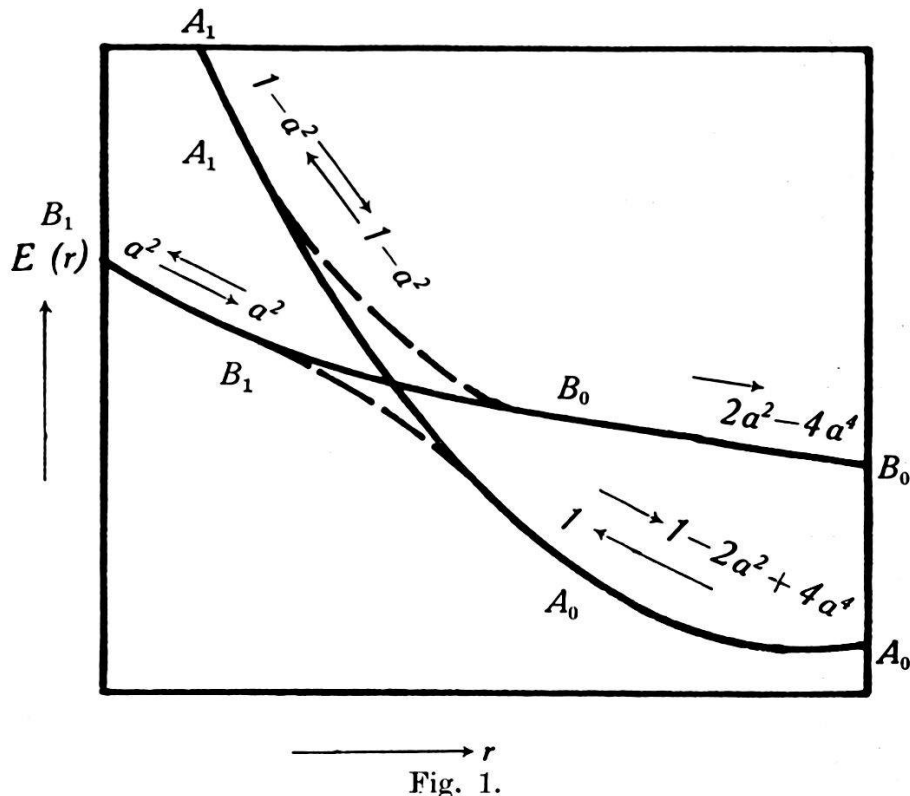


Fig. 1.

Sich „schneidende“ Energiekurven für den Stoss zweier Atomsysteme. A_0 und A_1 haben dieselben charakteristischen Elektronenkonfigurationen. Die Pfeile stellen die Ströme dar, welche auf den einzelnen Kurvenästen fließen, wenn der Strom 1 auf dem Ast A_0 ankommt, und wenn jeder Strom sich im Schnittpunkt so verteilt, dass der Teil $1-a^2$ auf dem Ast gleicher Konfiguration weiterläuft, während der Teil a^2 auf dem andern Aste weiterfließt.

der „auf“ der einen potentiellen Energiekurve (mit A_0 bezeichnet) ankommt, so teilt er sich im „Schnittpunkt“ in zwei Ströme: den Strom $1-a^2$ auf der Kurve A_1 und den Strom a^2 auf der Kurve B_1 . Die Ströme fließen im ankommenden Sinne weiter bis an ihre Umkehrpunkte. Dort werden sie reflektiert und beide kreuzen den Umkehrpunkt ein zweites Mal. Jeder der beiden Ströme verteilt sich dort wieder so, dass der Teil $(1-a^2)$ seiner Intensität auf der Kurve gleicher Elektronenkonfiguration weiter-

²⁾ G. WENTZEL, Zeitschr. f. Phys. **38**, 518 (1926); A. H. KRAMERS, Zeitschr. f. Phys. **39**, 828 (1926); L. BRILLOUIN, C. R. Juli (1926).

fließt, während der Teil a^2 auf der andern Kurve fortläuft. Der auslaufende Strom $4 \cdot |\eta_1|^2$ auf der Kurve B_1 beträgt also:

$$4 \cdot |\eta_1|^2 = (1 - a^2)a^2 + a^2(1 - a^2) = 2a^2 \cdot (1 - a^2)$$

Nennt man a^2 Übergangswahrscheinlichkeit, so nähert diese sich für grosse Wechselwirkungsenergien dem Wert 1. Bezeichnet man sie aber mit $4 |\eta_1|^2$ wie dies im folgenden geschehen soll, so erreicht sie für $a^2 = \frac{1}{2}$ ihr Maximum mit dem Werte $4 \cdot |\eta_1|^2 = \frac{1}{2}$, und wird für $a^2 = 1$ zu Null.

Schneiden sich die Kurven nicht und kann ihr Abstand angenähert durch eine konstante Termdifferenz dargestellt werden, so liegt die „Schnittgegend“ dort, wo die Wechselwirkungsenergie der Termdifferenz gleich wird. Befindet sich diese Gegend bei imaginären Geschwindigkeiten, so ist die Störungsmethode gerechtfertigt. Liegt sie aber bei reellen Geschwindigkeiten so erhält man einen ähnlichen Fall wie wenn sich die Kurven im reellen Geschwindigkeitsbereich schneiden (§ 10).

Das Verfahren wird zur Bestimmung von Wirkungsquerschnitten von Stößen zweiter Art verwendet. Man findet, dass der Fall, wo keine Überschneidung im oben definierten Sinne stattfindet, in Grössenordnung und Resonanzcharakter die experimentellen Ergebnisse besser darstellt, als der Fall der Überschneidung. Das plötzliche Einsetzen der Ionisation durch schnelle Alkaliionen, wie es von BEECK, MOUZON und NORDMEYER³⁾ gefunden wurde, lässt sich sehr gut durch die Überschneidung der Potentialkurven erklären⁴⁾.

Die Durchrechnung des Problems ist bis jetzt von verschiedenen Gesichtspunkten aus erfolgt. Eine erste, halbklassische Rechnung von KALLMANN und LONDON⁵⁾ hatte den Nachteil, dass nur die Elektronenbewegung wellenmechanisch erfasst wurde. Die zum Vorgang wichtige kinetische Energie der Kerne konnte daher nicht in Erscheinung treten. MORSE und STUECKELBERG⁶⁾

³⁾ O. BEECK und J. C. MOUZON, Ann. d. Phys. **11**, 737, 858 (1931) siehe auch O. BEECK, Ann. d. Phys. **6**, 1001 (1930); C. J. BRASEFIELD, Phys. Rev. **42**, 11 (1932); M. NORDMEYER, erscheint demnächst in den Ann. d. Phys., der Verfasser ist Herrn Dr. NORDMEYER für die Mitteilung seiner Ergebnisse zu Dank verpflichtet. J. C. MOUZON, Phys. Rev. **41**, 605 (1932).

⁴⁾ W. WEIZEL und O. BEECK, Zeitschr. f. Phys. **76**, 250 (1932).

⁵⁾ H. KALLMANN und F. LONDON, Zeitschr. f. Phys. Chem. **2** (B), 220 (1929).

⁶⁾ P. M. MORSE und E. C. G. STUECKELBERG, Ann. d. Phys. **9**, 579 (1931). Für eine zusammenfassende Darstellung der elastischen und inelastischen Stösse sei auf die Arbeit von P. M. MORSE Rev. Mod. Phys. **4**, 577 (1932) verwiesen, s. auch O. K. RICE, Phys. Rev. **38**, 1943 (1931).

wendeten das Störungsverfahren von BORN und DIRAC unter Berücksichtigung der endlichen Ausdehnung der Atome an.

Die Theorie des unelastischen Stosses zwischen sich langsam bewegenden schweren Massenteilchen muss sich aber, wie LONDON⁷⁾ später gezeigt hat, wesentlich von der Theorie des unelastischen Elektronenstosses unterscheiden.

Wendet man nämlich formal dasjenige Störungsverfahren an, in welchem die gesamte elektrische Wechselwirkung der beiden Atome als Störungsfunktion angesetzt wird so erhält man eine Grösse, welche den pro Zeiteinheit eintretenden Zuwachs der Endsubstanz angibt. Diese Grösse enthält, in LONDON's Ausdrucksweise, zwei Vorgänge:

1. den Anteil des „adiabatischen“ Vorgangs, welcher sich nach dem Stosse wieder vollständig in die Anfangssubstanz zurückverwandelt und daher nur zur elastischen Reflexion beiträgt.

2. den Anteil des unelastischen Stosses.

Beim Elektronenstoss wird der Anteil 1 verschwindend klein, während beim Atomstoss unter Umständen der Teil 1 wesentlich grösser als der Teil 2 wird. Eine Methode zur Trennung von 1 und 2 wurde von ihm angegeben. Sie besteht darin (siehe § 7 dieser Arbeit und § 5 bei LONDON), dass er von einer den adiabatischen Vorgang bereits enthaltenden Näherung ausgeht. Auf diese Näherungen wendet er dann das übliche Störungsverfahren an. Bei der Auswertung der hierbei auftretenden Matrixelemente machte (LONDON's § 7) er aber wieder eine Vernachlässigung, die in gewissen Fällen nicht erlaubt ist (siehe § 11 dieser Arbeit).

LONDON⁷⁾ und auch die Arbeit von MORSE und dem Verfasser⁶⁾ nehmen den „allgemeinen“ Fall an, dass sich die potentiellen Energiekurven, auf welchen sich die elastische Bewegung abspielt, *nicht schneiden*. Dem entgegen behandelt LANDAU⁸⁾ den Fall, dass die Kurven *sich schneiden*. Er glaubt folgern zu dürfen, dass dieser letzte Fall bedeutend grössere Wirkungsquerschnitte ergibt als der erste „allgemeine“ Fall.

Die vorliegende Arbeit behandelt nun beide Fälle nach einer neuen Methode, welche nicht auf einem Störungsverfahren beruht, sondern als eine Lösung des Problems im Sinne des WENTZEL, KRAMERS, BRILLOUIN'schen²⁾ Verfahrens bezeichnet werden kann. Zum Vergleich wird in jedem Fall auch die Auswertung des entsprechenden Matrixelementes nach den Verfahren⁶⁾ ⁷⁾ und ⁸⁾ im § 11 diskutiert.

⁷⁾ F. LONDON. Zeitschr. f. Phys. **74**, 143 (1932).

⁸⁾ L. LANDAU, Sow. Phys. **1**, 89 (1932), s. auch O. K. RICE, Phys. Rev. **37**, 1187 (1931).

§ 2. Die Formulierungen des Problems (zweiatomiges Molekül).

Die Behandlung des zweiatomigen Moleküls gestaltet sich am einfachsten im Koordinatensystem der Eulerschen Winkel. Auf das unelastische Stossproblem können wir, formal wenigstens, diese Betrachtungen übertragen.

KRONIG⁹⁾ zeigt, dass in erster Näherung das Problem in diesen Koordinaten folgendermassen separierbar ist:

$$\psi_{\sigma J \Lambda M T} = \frac{1}{r} v_{\sigma J \Lambda T}(r) \cdot \Theta_{J M \Lambda}(\vartheta) \cdot e^{i M \varphi} \cdot \frac{\sin \Lambda \varphi}{\cos \Lambda \varphi} \cdot \Phi_{\sigma \Lambda} \\ \cdot \exp \left[- \frac{2 \pi i}{h} (E_{\Lambda \sigma \infty} + T) t \right].$$

Hier bezeichnet r den Abstand der beiden Kerne, ϑ den Winkel zwischen der Verbindungsaxe der Kerne (ζ -Axe) und einer im Raum festen Richtung (z -Axe). ψ resp. φ die Winkel von der Knotenlinie (Schnitt der xy mit der $\xi\eta$ -Ebene) nach der positiven x - resp. ξ -Axe. ξ bedeutet in den Formeln auch die Gesamtheit der Elektronenkoordinaten $\xi_i \eta_i \zeta_i$.

σ bezeichnet die Quantenzahlen des Elektronenzustandes, Λ ihre Drehimpulsquantenzahl um die ζ -Axe (Λ -Type doubling!), J die Gesamtimpulsquantenzahl des Systems und M ihre Projektion auf die z -Axe. $E_{\sigma \infty}$ bedeutet die Energie der Elektronen (Termwert) und T die kinetische Energie der Kerne, beides für $r = \infty$. Dann genügen die verschiedenen Funktionen den Gleichungen:

$$\left\{ \Delta_{\xi_i \eta_i \zeta_i \dots \varphi} + \frac{8 \pi^2 m}{h^2} [E_{\sigma \Lambda}(r) - V(\xi_i \eta_i \zeta_i \dots, r)] \right\} \Phi(\xi_i \dots, r) \cdot \frac{\sin \Lambda \varphi}{\cos \Lambda \varphi} \\ = 0. \quad (1)$$

(Dies ist die Lösung bei festen Kernen im Abstand r (r als Parameter).)

$$\left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) - \frac{(M - \Lambda \cos \vartheta)^2}{\sin^2 \vartheta} \right. \\ \left. + (J(J+1) - \Lambda^2) \right\} \Theta_{J M \Lambda}(\vartheta) = 0 \quad (2)$$

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{8 \pi^2 M}{h^2} \left[T - E_{\sigma \Lambda}(r) - \frac{J(J+1) - \Lambda^2}{r^2} \cdot \frac{h^2}{8 \pi^2 M} \right] \right\} v_{\sigma J \Lambda T}(r) = 0^*). \quad (3)$$

⁹⁾ R. DE L. KRONIG, Zeitschr. f. Phys. **46**, 814 (1928) und **50**, 247 (1928).

^{*}) In Formel (3) ist der Kürze halber $E_{\sigma \Lambda \infty} = 0$ gesetzt.

Die Störungen (fehlende Glieder) sind dann gegeben durch die Operatoren ($\frac{\partial}{\partial r}$ wirke auf r in $\Phi(\xi, \dots, r)$ und $\frac{\delta}{\delta r}$ auf r in $v(r)$):

$$\begin{aligned} \text{I} + \text{II} = & \frac{h^2}{8\pi^2 M} \left\{ \frac{\partial}{\partial r^2} + 2 \frac{\partial}{\partial r} \cdot \frac{\delta}{\delta r} \right\} \\ & + \frac{h^2}{8\pi^2 M} \cdot \frac{1}{r^2} \left\{ \cos \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \dots \right\} \Xi(\xi, \eta, \zeta), \end{aligned} \quad (4)$$

wo Ξ Operatoren der Art ξ/ζ und $\eta\partial/\partial\xi$ enthält.

(4) zerfällt daher in zwei Teile I und II. Idealisiert man wieder das Problem auf *nur zwei Elektronenzustände* $\sigma = 0$ und $\sigma = 1$ mit A_0 und A_1 , so hat man folgende Fälle zu unterscheiden:

Fall 1: $A_0 = A_1$:

Man erhält, nach linksseitiger Multiplikation mit

$$\bar{\Phi}_0 \cdot e^{-iM_0\psi} \cdot \frac{\sin}{\cos} A_0 \varphi \cdot \Theta_{J_0 M_0 A_0}$$

und Integration über die Elektronenkoordinaten ξ und über ψ, φ und ϑ , (wenn ' die Ableitung nach r bezeichnet, und wenn man J_0^2 statt $J_0(J_0 + 1) - A_0^2$ schreibt was ja für grosse J_0 immer zugänglich ist):

$$\begin{aligned} v_{0J T_0}'' + \frac{8\pi^2 M}{h^2} \left[T_0 - (E_{0A}(r) - E_{0A\infty}) - \frac{h^2}{8\pi^2 M} \cdot \frac{J_0^2}{r^2} \right] v_{0J T_0} \\ + \int d\xi (\bar{\Phi}_0 \Phi_0'' v_{0J_0 T_0} + 2 \bar{\Phi}_0 \Phi_0' v_{0J_0 T_0}') \\ = - \int d\xi (\bar{\Phi}_0 \Phi_1'' v_{1J_0 T_1} + 2 \bar{\Phi}_0 \Phi_1' v_{1J_0 T_1}') \end{aligned} \quad (5)$$

und eine entsprechende Gleichung (wenn 0 und 1 vertauscht werden) für $v_{1J_0 T_1}$. Es ist $T_0 + E_{0A\infty} = T_1 + E_{1A\infty}$. Dies sind die *zwei gekoppelten Gleichungen*, welche LONDON⁷⁾ seiner Betrachtung zugrunde legt. Die Kopplung durch die unter II aufgeführten höheren Glieder ist Null oder doch im allgemeinen von kleinerer Grössenordnung, da $\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}$ keine diagonalen Matrixelemente in A hat.

Fall II: $A_0 \neq A_1$:

Dies ist der Fall, welchen LANDAU⁸⁾ behandelt. Die Kopplung geschieht nur durch das zweite Störungsglied II. Bei $J \gg 1$ kann das erste Glied von II als allein wesentlich betrachtet werden. (Näheres darüber siehe bei KRONIG⁹⁾).

Man kann nämlich, für grosse J , setzen:

$$\left| \int \Theta_{J A_0} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \Theta_{J A_1} d(\cos \vartheta) \right| \sim J.$$

Der Faktor $\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}$ bewirkt:

1. dass $A_1 = A_0 \pm 1$ sein muss, und
 2. Kopplungen nur zwischen $\sin A_0 \varphi$ und $\cos A_1 \varphi$ auftreten.
- Ferner kann die Kopplung nur zwischen Funktionen mit gleichem M (da kein $\frac{\cos}{\sin} \psi$ auftritt) und gleichem J (Erhaltung des Gesamtdrehimpulses) eintreten.

Das Kopplungsglied ist

$$\begin{aligned} & \frac{h^2}{8 \pi^2 M} \cdot \frac{1}{r^2} \cdot \int d\xi \bar{\Phi}_0 \Xi(\xi) \Phi_1 \cdot \int_{\sin}^{\cos} A_0 \varphi \cdot \cos \varphi \cdot \frac{\sin}{\cos} A_1 \varphi \cdot d\varphi \\ & \cdot \int \Theta_{J A_0} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \Theta_{J A_1} d(\cos \vartheta) \simeq \frac{h^2}{8 \pi^2 M} \cdot A(r) \cdot J \cdot \frac{1}{r^2} = W_{01}^{\text{II}}(r) \quad (7) \end{aligned}$$

wo $A(r)$ noch Funktion von r ist. $A(r)$ kann für kleine Distanzen den Wert der Quantenzahl A erreichen.

Das Matrixelement W_{01}^{II} muss selbstverständlich hermitisch sein und, da wir die Φ reell voraussetzen können, ist das Matrixelement der reellen physikalischen Grösse

$$\cos \varphi \cdot \frac{h}{2 \pi i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \cdot \frac{h}{2 \pi i} \frac{\partial}{\partial \vartheta} = \cos \varphi \cdot p_\varphi \cdot p_\vartheta$$

ebenfalls reell. Wir haben also wieder $W_{01}^{\text{II}} = W_{10}^{\text{II}}$, und ebenfalls nur zwei gekoppelte Gleichungen:

$$\begin{aligned} v_{0 J_0 T_0}'' + \frac{8 \pi^2 M}{h^2} \left[T_0 - (E_{0 A_0}(r) - E_{0 A_0 \infty}) - \frac{h^2}{8 \pi^2 M} \cdot \frac{J_0^2}{r^2} \right] v_{0 J_0 T_0} \\ = W_{10}^{\text{II}}(r) \cdot \frac{8 \pi^2 M}{h^2} v_{1 J_0 T_1} \quad (5b) \end{aligned}$$

(und entsprechend für $v_{1 J_0 T_1}$, wenn 1 und 0 vertauscht werden).

Betrachtungen von NEUMANN und WIGNER¹⁾ ergeben (wie LANDAU⁸⁾ zeigte) folgendes:

Ist $A_0 = A_1$, so überschneiden sich Terme nur bei verschiedenem Gesamtspinn, dann sind aber die Wechselwirkungsenergien W_{01}^{I} gering. Die Wechselwirkungsenergien W_{01}^{II} sind im allgemeinen für kleine J kleiner als die W_{01}^{I} , aber, weil $A_0 \neq A_1$, so ist ein Überschneiden der potentiellen Energiekurven möglich. LANDAU⁸⁾

schliesst nun in einer sehr geschickten Weise, dass in Fall I, wo kein Überschneiden für reelle Geschwindigkeiten eintritt, die Übergangswahrscheinlichkeiten mit wachsendem Elektronentermabstand exponentiell verschwinden, während sie im Fall II beim Überschneiden eine andere Form haben.

In §§ 9 und 10 werden diese beiden Fälle nach dem neuen Verfahren ausgewertet. Dabei wird sich zeigen, dass die Landau'sche Behauptung des exponentiellen Verlaufes von Fall I zwar richtig ist, dass aber die Wirkungsquerschnitte von Fall I *bei guter Resonanz* doch wesentlich grösser als die von Fall II trotz Überschneidung, werden können (§ 12).

§ 3. Grenzbedingungen und Wirkungsquerschnitt.

Wir wollen annehmen, dass A klein sei gegen J , dann heissen die Lösungen von (2): (auf 1 normiert)

$$\Theta_{JM, A=0} = \sqrt{\frac{(2J+1)(J-M)!}{4\pi(J+M)!}} \cdot P_J^M(\cos \vartheta).$$

Die Wellenfunktion der Kernbewegung im Zustande 0 soll eine ebene einfallende und eine ausgestrahlte (elastisch reflektierte) Kugelwelle darstellen. Denken wir uns die v_J welche sich ja im ∞ wie Bessel'sche Funktionen verhalten müssen, wie diese normiert d. h.:

$$\lim_{r=0} v_{0J} = r^{\frac{1}{2}} \left[J_{J+\frac{1}{2}} \left(p_0 r + \mu_{0J} \cdot \frac{\pi}{2} \right) + \eta_{0J} H_{J+\frac{1}{2}}^{(1)} \left(p_0 r + \mu_{0J} \cdot \frac{\pi}{2} \right) \right];$$

$$p_0^2 = \frac{8\pi^2 M}{h^2} T_0 \quad (8a)$$

so stellt

$$F_0 = \sum_J A_J \cdot \Theta_{J00} \cdot \frac{1}{r} \cdot v_{0J}(r) \quad (9)$$

mit

$$A_J = \left[\left(J + \frac{1}{2} \right) \frac{(2\pi)^3 M}{h p_0} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot e^{i \frac{\pi}{2} (J + \mu_{0J})}$$

im Unendlichen eine so beschaffene Welle der Stromdichte $1 \text{ cm}^{-2} \text{ sec}^{-1}$ dar. μ_{0J} ist eine Phasenkonstante, welche vom Potentialfeld $E_0(r) - E_{0\infty}$ abhängt und die *elastische Streuung* bedingt (Dispersion).

Bei fehlender Kopplung muss v_{0J} überall eine reelle Funktion sein damit kein von Null verschiedener Strom fliesst, d. h. $\eta_{0J} = 0$.

Für v_{1J} lautet die Grenzbedingung im Unendlichen (nur ausgestrahlte Kugelwelle):

$$\lim_{r=\infty} v_{1J} = \eta_{1J} \cdot r^{\frac{1}{2}} \cdot H_{J+\frac{1}{2}}^{(1)} \left(p_1 r + \mu_{1J} \cdot \frac{\pi}{2} \right); p_1^2 = \frac{8\pi^2 M}{h^2} \cdot T. \quad (8b)$$

Die Funktion

$$F_1 = \sum_J A_J \Theta_{J00} \frac{1}{r} v_{1J} \xrightarrow{r=\infty} \sum_J A_J \Theta_{J00} \cdot \eta_{1J} \cdot \frac{1}{r^{\frac{1}{2}}} H_{J+\frac{1}{2}}^{(1)}$$

stellt dann die auslaufende Kugelwelle dar. Der durch die unendlich weite Kugelfläche fließende Strom von F_1 ist, wegen der Normalisierung von F_0 (Stromdichte $1 \text{ cm}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) gleich dem Wirkungsquerschnitt ($d\omega$ bedeutet das Differential des räumlichen Winkels):

$$q = \frac{h}{8\pi M} \cdot \int \text{imag} (\bar{F}_1 \nabla F_1) d\omega = \frac{8\pi}{p_0^2} \sum_J (J + \frac{1}{2}) \cdot |\eta_{1J}|^2. \quad (10)$$

Es handelt sich also darum die gekoppelten Gleichungen (5), (5a) oder (5b) mit den Grenzbedingungen (8a) und (8b) zu lösen, und so die $|\eta_{1J}|^2$ zu bestimmen. Bei fehlender Kopplung stellt v_0 eine stehende Welle dar ($J_{J+\frac{1}{2}}$), welche als eine Überlagerung zweier fortschreitender ($H_{J+\frac{1}{2}}^{(1)}$ und $H_{J+\frac{1}{2}}^{(2)}$) gedacht werden kann. $|\eta_{1J}|^2$ ist dann identisch Null. Sobald die Kopplung einsetzt, werden $|\eta_{0J}|^2$ und $|\eta_{1J}|^2$ von 0 verschieden, und wir haben fortschreitende Wellen in beiden Fällen. Da $J_n = \frac{1}{2} (H_n^{(1)} + H_n^{(2)})$ ist, so wird der Maximalwert von $|\eta_{1J}| = \frac{1}{2}$; $|\eta_{1J}|^2 = \frac{1}{4}$ bedeutet also „Übergangswahrscheinlichkeit = 1“ (siehe § 1).

§ 4. Die Formulierung des Problems nach der Born-Dirac'schen Stosstheorie.

Einschaltungsweise legen wir hier nicht das zweiatomige Molekül unseren Betrachtungen zugrunde, sondern gehen (mit Rücksicht auf eine spätere Anwendung) vom Grenzfall der getrennten Atome aus. Wir setzen wieder in nullter Näherung die Wellenfunktion gleich einem Produkt aus den Wellenfunktionen der Elektronenbewegung und derjenigen der Kernbewegung. Diese beiden Funktionen, mit $\chi(\xi)$ und $\frac{1}{r} \cdot u(r)$ bezeichnet, haben aber ganz andere Bedeutungen als die mit $\Phi(\xi, r)$ und $\frac{1}{r} v(r)$ bezeichneten des § 2.

$$\Psi_{\sigma J \Lambda M T} = \frac{1}{r} u_{\sigma J \Lambda M T}(r) \cdot \Theta_{J \Lambda \Lambda}(\vartheta) e^{i M \varphi} \cdot \frac{\sin}{\cos} \Lambda \varphi \cdot \chi_{\sigma \Lambda}(\xi) \\ \cdot \exp \left[-\frac{2 \pi i}{h} (E_{\sigma \Lambda \infty} + T) t \right]$$

wo χ die Gleichung

$$\left\{ \Delta_{\xi_i \eta_i \zeta_i \dots \varphi} + \frac{8 \pi^2 m}{h^2} [E_{\sigma \Lambda \infty} - V(\xi_i \eta_i \zeta_i \dots, r = \infty)] \right\} \\ \chi_{\sigma \Lambda}(\xi_i \eta_i \zeta_i \dots) \frac{\sin}{\cos} \Lambda \varphi = 0 \quad (1a)$$

befriedigt. Die dem ersten Störungsglied I in (4) entsprechende Wechselwirkungsenergie heisst jetzt:

$$W^I(\xi_i \eta_i \zeta_i, r) = V(\xi_i \eta_i \zeta_i, r) - V(\xi_i \eta_i \zeta_i, r = \infty). \quad (4a)$$

An Stelle des Operators haben wir jetzt eine gewöhnliche Funktion. Es treten natürlich auch noch dem Gliede II in (4) analoge Operatoren auf, welche $\frac{\partial}{\partial \varphi}$ und $\frac{\partial}{\partial \vartheta}$ enthalten. Die χ sind natürlich die Eigenfunktionen der getrennten Atome*).

An Stelle von (5) steht jetzt im Falle I

$$u''_{0 J_0 T_0} + \frac{8 \pi^2 M}{h^2} (T_0 - W_{00}^I(r)) u_{0 J T_0} = \frac{8 \pi^2 M}{h^2} W_{01}^I(r) u_{1 J T_1} \quad (5a)$$

und die entsprechende Gleichung für $u_{1 J T_1}$, wobei

$$W_{ik}^I = \int d\xi \cdot \bar{\chi}_i(\xi) \cdot W^I(\xi) \cdot \chi_k(\xi) + \frac{h^2}{8 \pi^2 M} \delta_{ik} \frac{J_i^2}{r^2}; \delta_{ik} = \begin{matrix} 0 & i \neq k \\ 1 & i = k \end{matrix}$$

Das Resultat ist auch hier *zwei gekoppelte Gleichungen*, nur haben sie den Vorteil gegenüber (5), dass die Kopplung statisch und nicht dynamisch erscheint. Die gegenseitigen Vorteile dieser zwei Ausgangsgleichungen werden im § 7 diskutiert werden. Die Grenzbedingungen für die u sind selbstverständlich dieselben wie die für die v (§ 3, Gl. (8a) und (8b).

*) Streng genommen⁷⁾ die Eigenfunktionen bei fehlender Wechselwirkung. Diese Definition unterscheidet sich eventuell gegen diejenige im Text. Die Darstellung (4a) hat dann wie (1a), rein formale Bedeutung.

§ 5. Beispiel einer strengen Lösung*).

Da nach Voraussetzung überhaupt nur zwei Elektronenzustände eine Rolle spielen sollen, so müssen die strengen Lösungen der Probleme im § 2 (5) und im § 4 (5a) dasselbe Resultat liefern. Wir wollen in diesen Paragraphen vorübergehend einige weitere einfache Annahmen machen, ohne ihre Beziehungen zur Wirklichkeit zu diskutieren. Wir gehen von Gleichung (5a) aus und nehmen an, dass

$$W_{00}(r) = W_{11}(r) = \frac{\beta^2}{r^2} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 M}$$

sei, ferner dass

$$W_{01} = \text{const} = \frac{h^2}{8\pi^2 M} \cdot \alpha$$

sei für $r < r_0$ und gleich Null für $r > r_0$. Setzt man noch

$$\frac{1}{2}(p_0^2 - p_1^2) = \psi > 0.$$

$$\frac{1}{2}(p_0^2 + p_1^2) = p^2$$

$$p^2 \pm \sqrt{\psi^2 + \alpha^2} = \nu_0^2$$

$$f_0 = \frac{\alpha}{p_0^2 - \nu_1^2}; \quad f_1 = \frac{\alpha}{p_1^2 - \nu_0^2}; \quad f^2 = f_0 f_1$$

dann lauten (5a), wenn $J^2 = J(J+1) - A^2 + \beta^2$

$$\left. \begin{aligned} u_0'' + \left(p_0^2 - \frac{J^2}{r^2}\right) u_0 &= \alpha u_1 \\ u_1'' + \left(p_1^2 - \frac{J^2}{r^2}\right) u_1 &= \alpha u_0 \end{aligned} \right\} \alpha = 0 \text{ für } r > r_0.$$

Die Lösungen, welche im Nullpunkt endlich sind lauten:

$$\text{für: } r < r_0 \quad u_0 = r^{\frac{1}{2}} \cdot [c_0 \cdot J_J(\nu_0 r) + c_1 \cdot f_0 \cdot J_J(\nu_1 r)]$$

$$u_1 = r^{\frac{1}{2}} \cdot [c_0 \cdot f_1 \cdot J_J(\nu_0 r) + c_1 \cdot J_J(\nu_1 r)]$$

und wegen (8a) und (8b).

$$\text{für: } r > r_0 \quad u_0 = r^{\frac{1}{2}} \cdot [J_J(p_0 r) + \eta_{0J} \cdot H_J^{(1)}(p_1 r)]$$

$$u_1 = r^{\frac{1}{2}} \cdot [\eta_{1J} \cdot H_J^{(1)}(p_1 r)].$$

Gleich setzen von beiden Werten u_0 (resp. u_1) in Grösse und Neigung

*) Dieses Beispiel findet sich ausführlich bei: P. M. MORSE, Rev. Mod. Phys. 4, 632 (1932), dem der Verfasser das Beispiel zur Verfügung stellte.

im Punkte $r = r_0$, gibt 4 lineare unhomogene Gleichungen zur Bestimmung der 4 Konstanten c_0, c_1, η_0, η_1 . Die Lösung für η_{1J} schreibt sich in der Form einer Determinante aus Bessel'schen Funktionen und deren Ableitungen. Der Zähler ist:

$$\begin{aligned} & f_1 p_0 \cdot [H_J(p_0 r_0) \cdot J'_J(p_0 r_0) - H'_J(p_0 r_0) \cdot J_J(p_0 r_0)] \\ & \cdot [J_J(v_0 r_0) \cdot v_1 J'_J(v_1 r_0) - v_0 J'_J(v_0 r_0) \cdot J_J(v_1 r_0)] \\ & = \frac{2i f_1}{\pi r_0^2} (v_0^2 - v_1^2) \int_0^{r_0} r dr \cdot J_J(v_0 r) \cdot J_J(v_1 r). \end{aligned}$$

Der Nenner hat für $\alpha^2 \ll \psi^2$ ($|f^2| \ll 1$) den Wert:

$$-\frac{4}{\pi^2 r_0^2}$$

und für $\alpha^2 \gg \psi^2$ ($f^2 = -1$) den Wert:

$$-\frac{8}{\pi^2 r_0^2}$$

(solange als $v_1 r_0$ reell und grösser als J ist).

Man erhält daher, in beiden Fällen wegen der Definition von v_i und f_i :

$$|\eta_{1J}| = \frac{\pi}{2} \cdot \int_0^\infty r dr \cdot \alpha \cdot J_J(v_0 r) \cdot J_J(v_1 r). \quad (12)$$

Unter α ist hier eine Funktion verstanden, welche konstant $= \alpha$ ist für $0 < r < r_0$ und $= 0$ für $r > r_0$. Für imaginäres v_1 , wo $v_1 r_0 > iJ$ ist wird

$$\begin{aligned} |\eta_{1J}|^2 &= \frac{\sin x}{\sqrt{\frac{2\alpha}{p_0 p_1}} \cdot \cos\left(x + \frac{\pi}{4}\right) - i \sqrt{\frac{p_0 + p_1}{p_0 p_1}} \cdot \cos x}; \\ x &= v_1 r - \frac{2J-1}{4}. \end{aligned}$$

§ 6. Die angenäherten Lösungen (Störungsrechnung).

Wir können die Gleichungen (5), (5a), (5b) alle in der Form schreiben:

$$\begin{aligned} y''_0 + K_0(r) y_0 &= L(r) y_1 \\ y''_1 + K_1(r) y_1 &= L(r) y_0 \end{aligned} \quad (13)$$

wo L in (5) ein linearer Operator ist. Für *kleine Störungen* $L(r)$ (schwache Kopplung), setzen wir in erster Näherung $y_1 = 0$ und wählen für y_0 die im Nullpunkte endliche Lösung, welche wir, nach WENTZEL, KRAMERS, BRILLOUIN²⁾ für positive K_0 wie

$$y_0 = y_0^I \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{K_0^{\frac{1}{4}}} \cos \left(\int_{K_0=0}^r K_0^{\frac{1}{2}} dr - \frac{\pi}{4} \right)$$

normieren können. (Im Falle $W_{00} \propto 1/r^2$: $y_0 = r^{\frac{1}{2}} \cdot J_J(p_0 r)$). Die homogene Gleichung für y_1 hat ebenfalls eine im Nullpunkt endliche Lösung y_1^I und eine unendliche Lösung y_1^{II} . Wir wählen die beiden so, dass

$$y_1^I + y_1^{II} \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{1}{K_1^{\frac{1}{4}}} \cdot \exp \left[i \left(\int_{K_1=0}^r K_1^{\frac{1}{2}} dr - \frac{\pi}{4} \right) \right]$$

normiert ist. Wegen (13) gilt streng¹⁰⁾:

$$y_1^I \cdot y_1^{II'} - y_1^{I'} \cdot y_1^{II} = \frac{2}{\pi}.$$

Die Lösung der unhomogenen Gleichung heisst¹⁰⁾:

$$\begin{aligned} y_1 = & \left[c_1 + \frac{\pi}{2} \int_{\infty}^r d\varrho \cdot y_0^I(\varrho) \cdot L(\varrho) \cdot y_1^{II}(\varrho) \right] \cdot y_1^I(r) \\ & + \left[c_2 - \frac{\pi}{2} \int_{\infty}^r d\varrho \cdot y_0^I(\varrho) \cdot L(\varrho) \cdot y_1^I(\varrho) \right] \cdot y_1^{II}(r). \end{aligned}$$

Die Grenzbedingungen im Unendlichen geben $c_2 = ic_1 = i\eta_{1J}$. Für $r = 0$ müssen wir verlangen, dass

$$\lim_{r=0} \left[\int_{\infty}^r d\varrho \cdot y_0^I \cdot L \cdot y_1^{II} \right] \cdot y_1^I(r) = 0,$$

was eine gewisse Beschränkung auf die Störungsfunktion $L(r)$ auferlegt. Da aber die Lösungen y_0^I für $r = 0$ stark verschwinden (Abstossung der Kerne), so wird dieser Bedingung im ganzen genügt werden. Ferner muss der Faktor von $y_1^{II}(r)$ für $r = 0$ zu null werden. Wegen (8b) gibt das:

$$-ic_2 = \eta_{1J} = +i \frac{\pi}{2} \int_0^{\infty} dr \cdot y_1^I \cdot L \cdot y_0^I. \quad (14)$$

¹⁰⁾ FRANCK und R. v. MISES, Dif. Gleich. d. Phys. p. 299 und p. 300 (1930).

Auf den Fall des vorhergehenden Paragraphen angewandt, gibt (14):

$$\eta_{1J} = \frac{\pi}{2} \int_0^\infty \alpha \cdot r dr \cdot J_J(p_0 r) \cdot J_J(p_1 r). \quad (15)$$

Der Unterschied zwischen (12) und (15) besteht darin, dass der Näherungsausdruck andere Frequenzen p_i enthält, an Stelle von v_i im exakten Ausdruck (12). Da das Integral im wesentlichen von der Resonanzschärfe $\frac{1}{2}(p_0^2 - p_1^2) = \psi$ abhängt, so entspricht der Fehler in (15) der Verwendung von ψ an Stelle von $\sqrt{\psi^2 + \alpha^2}$. Wir wollen das nun noch allgemeiner beweisen.

§ 7. Vergleich der London'schen mit der Born-Dirac'schen Näherung.

Dazu wendet man das im vorangehenden Paragraphen beschriebene Verfahren auf die Gleichung (5) (LONDON⁷) und (5a) (MORSE und STUECKELBERG⁶) an. Die Lösungen von (1a) seien als bekannt vorausgesetzt. Haben wir nur zwei Zustände in Betracht zu ziehen, so können die beiden (1) genügenden *adiabatischen molekularen Wellenfunktionen* $\Phi_\sigma(r, \xi)$ durch die beiden Funktionen $\chi_\sigma(\xi)$ (1a) exakt ausgedrückt werden ($\sigma = 0, 1$). Wir machen mit LONDON⁷) den, vorerst willkürlichen Ansatz.

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= \chi_0 \cos g + \chi_1 \sin g \\ \Phi_1 &= -\chi_0 \sin g + \chi_1 \cos g \end{aligned} \quad (16)$$

Die χ_σ hängen definitionsgemäss nur von ξ ab. (Dabei stellen wir uns vor, dass die ξ_i eines zum Atom I gehörenden Elektrons vom Schwerpunkt des Atoms I aus gezählt werden usw. Näheres darüber siehe bei LONDON⁷) in seinem § 2 und bei MORSE, STUECKELBERG⁶) in ihrem § 3). Die vorerst noch unbestimmte Funktion g hänge nur von r ab. Setzen wir die χ_σ als normiert und orthogonal voraus, so sieht man leicht, dass auch die beiden Φ_σ für jeden beliebigen reellen Wert von $g(r)$ normal und orthogonal sind. Das gilt selbstverständlich nur solange als man annehmen darf, dass nur zwei Elektronenzustände existieren.

Der Hamilton'sche Operator der Wellengleichung der Elektronen für getrennte Atome lautet ((1a) in § 4):

$$H(\xi_1 \dots \xi_n, \varphi) = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta_{\xi_1 \dots \xi_n, \varphi} + V(\xi_1 \dots \xi_n, r = \infty).$$

Der entsprechende Operator der Molekülgleichung (1) im § 2 ist dann

$$H(\xi_1 \dots \xi_n, \varphi) + W(\xi_1 \dots \xi_n, r),$$

wobei W durch Gleichung (4a) im § 4 plus die dort erwähnten von $\frac{\partial}{\partial \varphi}$ und $\frac{\partial}{\partial \vartheta}$ abhängigen Operatoren definiert ist. Die Φ_σ müssen der folgenden Gleichung genügen. (Die χ_σ und daher die Φ_σ seien reell.):

$$\begin{aligned} \int \Phi_i (H + W) \Phi_k d\xi_1 \dots d\xi_n &= \delta_{ik} E_i(r) \\ \int \chi_i H \chi_k d\xi_1 \dots d\xi_n &= \delta_{ik} E_i(\infty) = \delta_{ik} E_{i\infty}. \end{aligned}$$

Die Indizes i und k stehen an Stelle der Indices $\sigma_0 = 0$ und $\sigma_1 = 1$ in §§ 2 und 4. Der hier belanglose Index λ ist weggelassen. Ausser $E_i(r)$ und $E_{i\infty}$ tritt noch das (für den Fall I (W_{01}^I) bereits im § 4 definierte) Integral (Gleichung 5a)) auf*):

$$W_{ik}(r) = \int \chi_i W(\xi_1 \dots \xi_n, r) \chi_k d\xi_1 \dots d\xi_n.$$

Aus der Gleichung für $i \neq k$ d. h. $\delta_{ik} = 0$ erhält man

$$\text{tang } 2g(r) = \frac{2W_{01}(r)}{[E_{0\infty} + W_{00}(r)] - [E_{1\infty} + W_{11}(r)]}$$

und aus den beiden Gleichungen für $i = k = 0$ resp. $= 1$, d. h. $\delta_{ik} = 1$ bestimmen sich die Termwerte zu:

$$\begin{aligned} E_{\frac{1}{2}}(r) &= \frac{[E_{0\infty} + W_{00}] + [E_{1\infty} + W_{11}]}{2} \\ &\pm \sqrt{\frac{\{[E_{0\infty} + W_{00}] - [E_{1\infty} + W_{11}]\}^2}{4} + W_{01}^2}. \end{aligned}$$

Die beiden Termwerte (Franck'sche Kurven) können sich also in dieser Betrachtungsart bei von Null verschiedenen W_{01} für reelle Abstände r nicht überschneiden, sondern sich nur nahe kommen (siehe ¹⁾). Wie in § 5 erleichtern folgende Abkürzungen die Schreibweise (W_{01} steht für W_{01}^I oder W_{01}^{II}):

$$\frac{8\pi^2 M}{h^2} \cdot \frac{[E_{0\infty} + W_{00}] - [E_{1\infty} + W_{11}]}{2} = \psi(r); \quad \psi(\infty) \geq 0;$$

*) In Gl. (5a) enthalten die Diagonalelemente W_{ii} noch das von der Rotation der Kerne herrührende Zusatzglied $h^2 J^2 / 8\pi^2 M r^2$. In der Schreibweise dieses Paragraphen sind diese Glieder *nicht* enthalten, sondern sie werden erst in (17) explicite aufgeführt.

$$\frac{8 \pi^2 M}{h^2} W_{01} = \alpha(r);$$

$$\frac{8 \pi^2 M}{h^2} T_i = p_i^2; \quad p^2 = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_0^2);$$

$$g(r) = \frac{1}{2} \operatorname{tang}^{-1} \frac{\alpha}{\psi}$$

$$v_0^2 = p^2 - \frac{8 \pi^2 M}{2 h^2} [W_{00}(r) + W_{11}(r)] - \frac{J^2}{p^2} \pm \sqrt{\psi^2(r) + \alpha^2(r)};$$

$$\mu_0^2 = p_0^2 - \frac{8 \pi^2 M}{h^2} W_{00}(r) - \frac{J^2}{r^2} = \varphi_0.$$

Wie bereits erwähnt, sind die Φ_i orthogonal und normal, wenn die χ_i es waren. Es ist weiter noch:

$$\int d\xi \Phi_0 \Phi_0' = 0; \quad \int d\xi \Phi_0 \Phi_1' = \mp g'$$

$$\int d\xi \Phi_0 \Phi_0'' = -g'^2; \quad \int d\xi \Phi_0 \Phi_1'' = \mp g''$$

(5) wird, wenn man die Glieder mit g'^2 gegen v_i^2 vernachlässigt:

$$v_0'' + v_0^2 v_0 = 2 g' v_1' + g'' v_1 \quad (18)$$

$$v_1'' + v_1^2 v_1 = -2 g' v_0' - g'' v_0$$

entsprechend wird (5a):

$$u_0'' + \mu_0^2 u_0 = \alpha u_1 \quad (18a)$$

$$u_1'' + \mu_1^2 u_1 = \alpha u_0$$

Die Gleichungen (18) und (18a) sind äquivalent. Die angenäherte Bestimmung von $|\eta_{1J}|^2$ (14) auf (18) und (18a) angewandt kann natürlich trotzdem zu zwei verschiedenen Resultaten führen.

Aus (18) folgt durch partielle Integration, da g und alle vorkommenden Ableitungen von g für $r = \infty$ zu Null werden, und v_i und alle vorkommenden Ableitungen von v_i für $r = 0$ Null sind*):

$$\int_0^\infty v_0 v_1 g'' dr = \int_0^\infty g dr [v_0'' v_1 + 2 v_0' v_1' + v_0 v_1'']$$

$$2 \int_0^\infty v_0' v_1 g' dr = \int_0^\infty g dr [-2 v_0'' v_1 - 2 v_0' v_1']$$

*) Unter v_i und u_i sind hier, der Anwendung von § 6, Gl. (14) entsprechend, die Lösungen der homogenen Gleichungen verstanden, welche im Nullpunkt endlich sind, d. h. y_i^I .

Wegen (14):

$$|\eta_{1J}| = \frac{\pi}{2} \int_0^\infty \frac{1}{2} \cdot \operatorname{tg}^{-1} \frac{\alpha}{\psi} \cdot (v_0 v_1'' - v_0'' v_1) \cdot dr$$

oder wegen (18), und weil $\frac{1}{2} (v_0^2 - v_1^2) = \sqrt{\psi^2 + \alpha^2}$:

$$|\eta_{1J}| = \frac{\pi}{2} \int_0^\infty \sqrt{\psi^2 + \alpha^2} \operatorname{tg}^{-1} \frac{\alpha}{\psi} \cdot v_0 v_1 \cdot dr. \quad (19)$$

Entsprechend erhält man aus (18a)

$$|\eta_{1J}| = \frac{\pi}{2} \int_0^\infty \alpha \cdot u_0 u_1 dr. \quad (19a)$$

In (19) ist aber: $\sqrt{\psi^2 + \alpha^2} \operatorname{tg}^{-1} \frac{\alpha}{\psi} \simeq \alpha$ für $\alpha^2 < \psi^2$ und $\simeq \frac{\pi}{2} \alpha$ für $\alpha^2 \gg \psi^2$ oder $\sqrt{\psi^2 + \alpha^2} \operatorname{tg}^{-1} \frac{\alpha}{\psi} = \delta \cdot \alpha$, wo δ ein Faktor der Grössenordnung 1 ist ($1 < \delta < 1.57$), eine genügende Annäherung. Der Unterschied zwischen (19) und (19a) ist also von derselben Art, wie derjenige zwischen der exakten Lösung (12) und der angenäherten (15). Wie LONDON⁷⁾ zeigte, stellt (19a) die Summe von adiabatischer und nicht adiabatischer Zustandsänderung ($0 \rightarrow 1$) dar, während das wegen schlechterer Resonanz kleinere (19) allein die, von uns gesuchten, nicht adiabatischen Übergänge $0 \rightarrow 1$ enthält. Ist also im Bereiche, wo u_{1J} von Null verschieden ist $\alpha \ll \psi$, so gibt die dem (Born-Dirac'schen) Näherungsverfahren von MORSE und dem Verfasser⁶⁾ zugrunde gelegte Gleichung (19a) schon die richtige Antwort.

Da q in eine Summe über J zerfällt, so darf für alle Glieder J , wo

$$|\alpha_{\max}(r)| = |\alpha(r_{\min})| = \left| \alpha \left(\frac{J}{p_0} \right) \right| \ll |\psi|,$$

das Verfahren von MORSE und STUECKELBERG⁶⁾ angewandt werden*).

*) In Gl. (17) dieses Paragraphen steht W_{01} für W_{01}^I und W_{01}^{II} . Wird dieser Paragraph als logische Entwicklung der Paragraphen 2 und 4 gelesen, so darf das in (17) und weiter oben vorkommende W_{01} nur W_{01}^I bedeuten. Für das Folgende wollen wir eine etwas andere Übereinkunft treffen:

Die Parallelität zwischen u_i mit den Frequenzen μ_i und mit v_i mit den Frequenzen ν_i , wollen wir so verallgemeinern, dass die μ_i^2 jeweils ein Mass für die Termgrössen ohne die für die Übergänge verantwortliche Störung $\alpha = 8\pi^2 MW_{01}^I/h^2$ oder $8\pi^2 MW_{01}^{II}/h^2$ bedeuten, während die ν_i^2 die Termgrössen mit eingeschalteter Störung darstellen.

Wir werden daher im folgenden von der *exakten adiabatischen Lösung* (Gl. (5) für Fall I und Gl. (5b) für Fall II) ausgehen, soweit sich das als möglich erweist. Beim Fall II wird das immer möglich sein, während beim Fall I eine Schwierigkeit auftreten wird, die darin besteht, dass die nicht-adiabatische Wechselwirkung, welche die Übergänge induziert, nicht lediglich eine Funktion sondern ein Operator ist. Dieser Schwierigkeit können wir nur entgehen, wenn wir eine London'sche Näherung einschalten, die in der Tat (siehe (18)) die dynamische in eine statische Wechselwirkung überführt.

§ 8. Das Anschlussverfahren der Näherungsfunktionen in den Umkehrpunkten.

Wenn man versucht das Problem der gekoppelten Gleichungen streng zu lösen, so ist es wie in § 5 methodisch gleichgültig, ob man (5), (5a) oder (5b) betrachtet, sofern nur die Kopplung durch eine Funktion, nicht einen Operator dargestellt wird. Beide Gleichungspaare sind von Typus:

$$\begin{aligned} u_0'' + \varphi_0 u_0 &= \alpha u_1 \\ u_1'' + \varphi_1 u_1 &= \alpha u_0, \end{aligned}$$

wo α im Fall I die Funktion $8 \pi^2 M W_{01}^I / h^2$ und im Fall II die Funktion $8 \pi^2 M W_{01}^{II} / h^2$ darstellt. Im Fall II legen wir unseren Rechnungen also die exakten adiabatischen Näherungsfunktionen zugrunde. Im Fall I können wir das nicht tun, weil die folgende Auflösungsmethode des Gleichungspaares nicht auf Operatorenkopplung anwendbar ist. Wir gehen daher von den Gleichungen (18a) aus, in welchen die Operatorenkopplung durch eine Funktionenkopplung ersetzt ist. Wie im § 7 gezeigt wurde, bedeutet das, dass die exakten adiabatischen Näherungsfunktionen durch die London'schen Näherungsfunktionen ersetzt sind.

Durch Elimination erhalten wir in beiden Fällen:

$$\begin{aligned} u_0^{IV} - 2 \frac{\alpha'}{\alpha} \cdot u_0^{III} + \left[\varphi_0 + \varphi_1 - \frac{\alpha''}{\alpha} - 2 \frac{\alpha'^2}{\alpha^2} \right] \cdot u_0'' \\ + \left[2 \varphi_0' - 2 \frac{\alpha' \varphi_0}{\alpha} \right] \cdot u_0' + \left[\varphi_0 \varphi_1 - \alpha^2 - 2 \alpha' \left(\frac{\varphi_0}{\alpha} \right)' - \alpha'' \frac{\varphi_0}{\alpha} \right] \cdot u_0 = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

und

$$u_1 = \frac{1}{\alpha} \cdot [u_0'' + \varphi_0 u_0]. \quad (21)$$

Wir erinnern uns, dass φ_i und α Grössen bedeuten, welche mit $\frac{1}{h^2}$ multipliziert sind. Wir schreiben deshalb statt (20), (20a).

$$u_0^{IV} + D \cdot u_0^{III} + \frac{A}{h^2} \cdot [1 + h^2 \cdot A_2 + \dots] \cdot u_0'' + \frac{B}{h^2} \cdot u' + \frac{C}{h^4} \cdot [1 + h^2 \cdot C_2 + \dots] \cdot u_0 = 0, \quad (20a)$$

wo

$$A \cdot \frac{1}{h^2} = \varphi_0 + \varphi_1 = 2\varphi \quad A_2 = \dots$$

$$B \cdot \frac{1}{h^2} = 2 \cdot \left[\varphi_0' - \frac{\varphi_0}{\alpha} \alpha' \right]$$

$$C \cdot \frac{1}{h^4} = \varphi_0 \varphi_1 - \alpha^2 \quad C_2 = \dots$$

$$D = -2 \frac{\alpha'}{\alpha} \quad \text{ist.}$$

Entsprechend dem W. K. B.²⁾ Verfahren, setzt man auch hier

$$u_0 = e^{\frac{1}{h} \cdot (S_0 + h S_1 + h^2 S_2 + \dots)}$$

und findet für die erste Näherung:

$$S_0'^4 + A S_0'^2 + C = 0; \quad \frac{S_0'^2}{h^2} = i^2 \nu^2 = i^2 [\varphi \pm \sqrt{\varphi^2 + \alpha^2}];$$

$$S_1' = -\frac{1}{2} \frac{\nu'}{\nu} - \frac{1}{2} \frac{(\nu^2 - \varphi_0)' - \frac{\alpha'}{\alpha} (\nu^2 - \varphi_0)}{\nu^2 - \varphi}$$

usw.*). Es treten also die gleichen Frequenzen ν_0 und ν_1 auf, wie im § 5 Gl. (17). In zweiter Näherung lautet daher die Lösung von (24) oder von (18a) nach einigem Umformen, wenn $t = \frac{\nu}{\alpha}$:

$$u_0 \sim \left[(c_+ \cdot e^{i \int r_0 dr} + c_- \cdot e^{-i \int r_0 dr}) \cdot \exp \frac{1}{2} \left(- \int \frac{d\nu_0}{\nu_0} + \int \frac{dt}{\sqrt{1+t^2}} \right) + (d_+ \cdot e^{i \int r_1 dr} + d_- \cdot e^{-i \int r_1 dr}) \cdot \exp \frac{1}{2} \left(- \int \frac{d\nu_1}{\nu_1} - \int \frac{dt}{\sqrt{1+t^2}} \right) \right] \cdot e^{-\frac{1}{2} \int \frac{t dt}{1+t^2}} \quad (26)$$

*) Wenn man die Glieder D und B/h^2 schon in nullter Näherung berücksichtigt, so erhält man vier voneinander verschiedene komplexe Grundfrequenzen, wo nicht $\nu_{0+} = -\nu_{0-}$ ist. Das bedeutet für das Folgende, dass die Umkehrpunkte $\nu_{0+} = \nu_{0-}$ im Komplexen liegen. Die übrige Behandlung bleibt sich aber gleich.

resp., wenn $z = \frac{\alpha}{\psi}$:

$$u_0 \approx \left[(c_+ \cdot e^{i \int v_0 dr} + c_- \cdot e^{-i \int v_0 dr}) \cdot \exp \frac{1}{2} \left(- \int \frac{dv_0}{v_0} - \int \frac{dz}{z \sqrt{1+z^2}} \right) \right. \\ \left. + (d_+ \cdot e^{i \int v_1 dr} + d_- \cdot e^{-i \int v_1 dr}) \cdot \exp \frac{1}{2} \left(- \int \frac{dv_1}{v_1} \right. \right. \\ \left. \left. + \int \frac{dz}{z \sqrt{1+z^2}} \right) \right] \cdot e^{\frac{1}{2} \int \frac{dz}{z(1+z^2)}}$$

Die Annäherung ist überall gut, ausser in der Nähe der Punkte $v_0 = 0$, $v_1 = 0$, $v_0 \cong v_1$, da dort die von v_i oder t resp. z abhängigen Amplituden rasch variieren. Beim Durchgang resp. Umfahren von diesen Punkten treten sprungweise Änderungen in den Konstanten c_+ , c_- , d_+ , d_- auf. Für eine Gleichung zweiten Grades (Punkte $v_i = 0$) wurde das Problem von KRAMERS²⁾ für den Durchgang auf der reellen Axe, und von ZWAAN¹¹⁾ für die Umfahrung auf der komplexen r -Ebene durchgeführt. Wir wollen hier ein dem Zwaan'schen ähnliches Verfahren anwenden, welches sich auch auf die Punkte $v_0 = v_1$ ausdehnen lässt. Dazu muss angenommen werden, dass die Funktionen φ_0 , φ_1 und α im betrachteten kleinen Gebiet analytisch sind. Dann muss auch u_0 analytisch sein. Beim Umfahren jedes Punktes $v_0 = 0$, $v_1 = 0$, $v_0 = v_1$ muss darum u_0 auf seinen Anfangswert zurückkehren. Die Näherungsausdrücke tun das aber nicht. Darum müssen die Konstanten sich sprungweise an bestimmten Stellen ändern. Da sich v_0 mit $-v_0$ beim Umfahren von $v_0 = 0$, und $v_0 - v_1$ mit $-(v_0 - v_1)$, d. h. v_0 mit v_1 beim Umfahren von $v_0 = v_1$ vertauscht, so können diese Sprünge nur proportional den vorhandenen Konstanten c_+ , d_+ , c_- , d_- sein (siehe STOKES¹²⁾).

Beim Umfahren von $v_0 = 0$ betrachtet man

$$v_0^{-\frac{1}{2}} \cdot \left[c_+ \cdot e^{i \int_0^x v_0 dx} + c_- \cdot e^{-i \int_0^x v_0 dx} \right].$$

Da v_0 die Wurzel aus einer im Punkte $v_0 = 0$, $x = 0$ verschwindenden analytischen Funktion ist, so muss, wenn c'_+ , c'_- die Konstanten nach der Umfahrung bedeuten:

$$c'_+ = c_- \cdot e^{i \frac{\pi}{2}}; \quad c'_- = c_+ \cdot e^{i \frac{\pi}{2}}.$$

¹¹⁾ A. ZWAAN, Diss., Utrecht 1929.

¹²⁾ STOKES, Collected papers, siehe auch G. N. WATSON, Theory of Bessel Functions, Cambridge 1922.

Es stellt sich jetzt die Frage, wo die Konstanten springen können. STOKES¹¹⁾¹²⁾ zeigt, dass die verwendeten Näherungen, welche den asymptotischen Darstellungen entsprechen, in den Richtungen vom Punkte $x = 0$ aus, wo das Verhältnis der beiden Funktionen

$$\exp\left(\pm i \int_0^x \nu_0 dx\right)$$

ein Extremum wird, der Fehler in der grösseren Funktion grösser ist, als der absolute Betrag der Kleinern. Die Konstante der Kleinern darf sich also dort sprungweise ändern. *Dies gilt nur, wenn die betrachteten Unstetigkeitslinien, ohne von andern Punkten kommende Unstetigkeitslinien zu durchkreuzen, sich zu solchen Entfernungen verfolgen lassen, wo*

$$\exp\left(\pm i \int_0^x \nu_0 dx\right)$$

beliebig gross resp. klein wird. Die Gleichung der Unstetigkeitslinien von c_+ ist):*

$$\arg\left(+i \int_0^x \nu_0 dx\right) = \pi + (\text{ganze Zahl} \times 2\pi).$$

Bezeichnet $\lambda(x)$ das Argument von $\nu_0(x)$ und φ' das Argument von dx , so führt (wenn $x = \varrho \cdot e^{i\varphi}$ ist),

$$\lambda(\varrho, \varphi) + \varphi' = \pi + (\text{ganze Zahl} \times 2\pi)$$

auf die Differentialgleichung:

$$\text{tang}^{-1}\left(\frac{\varrho d\varphi}{d\varrho}\right) + \varphi + \lambda(\varrho, \varphi) - \pi = (\text{ganze Zahl} \times 2\pi) + 0.$$

Man sieht leicht, dass die Extremalrichtungen den Punkt $x = 0$ unter den Winkeln

$$\varphi = \frac{\pi}{3} \text{ und } \frac{5\pi}{3}$$

für Sprünge von c_+ , und unter $\varphi = \pi$ für Sprünge von c_- verlassen (siehe Fig. 2). Wir nehmen jetzt an, dass beim Überschreiten dieser Richtungen c_+ sich proportional c_- ändert und umgekehrt.

¹⁾ Ist a eine komplexe Zahl $a = |a| \cdot e^{i\varphi}$, so bedeutet

$$\arg a = (\log a - \log |a|)/i = \varphi.$$

In diesem und in folgenden § sind die Buchstaben φ , ψ und ϑ als Argumente von komplexen Zahlen gebraucht. Eine Verwechslung mit den Grössen φ und ψ , definiert in Gleichung (17) § 7, welche Termwerte resp. -differenzen darstellen, ist nicht zu befürchten; ebensowenig eine mit den Eulerschen Winkeln der § 2 u. § 4.

(Würde man die Sprünge noch proportional sich selbst und proportional den Konstanten d_+ und d_- annehmen, so erhalten nämlich diese weiteren Proportionalitätskonstanten den Wert Null.)

Wir haben daher: Anfangswert: c_+ ; c_-
nach Überschreiten von $\varphi = \pi/3$:

$$c_+ + \alpha c_-; c_-^*)$$

nach Überschreiten von $\varphi = \pi$:

$$c_+ + \alpha c_-; \beta c_+ + (1 + \alpha \beta) c_-$$

nach Überschreiten von $\varphi = 5\pi/3$:

$$c_+ (1 + \beta \gamma) + c_- (\alpha + \gamma + \alpha \beta \gamma); \beta c_+ + (1 + \alpha \beta) c_-$$

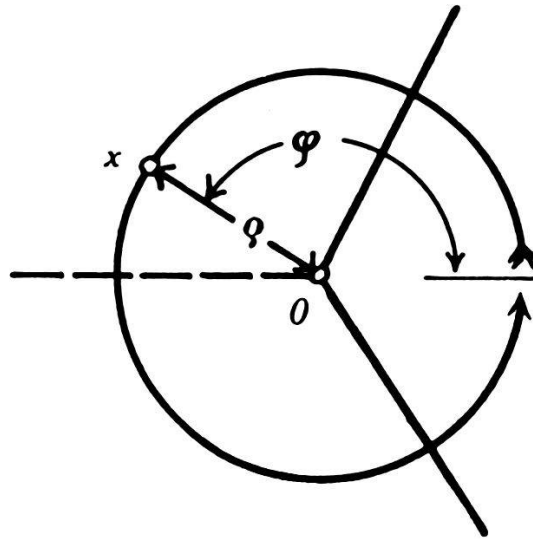


Fig. 2.

x -Ebene in der Umgebung von $x = 0$. Die Unstetigkeitslinien verlassen den Punkt $x = 0$ unter den Winkeln: $\pi/3$, π , $5\pi/3$.

Die letzten Werte müssen gleich $c_- \cdot e^{i \frac{\pi}{2}}$ resp. $c_+ \cdot e^{i \frac{\pi}{2}}$ sein. Die Konstanten α , β , γ sind also bis auf den belanglosen Faktor $e^{i \frac{\pi}{2}}$ bestimmt zu:

$$\alpha = \beta = \gamma = e^{i \frac{\pi}{2}}.$$

Verlangt man jetzt, dass auf der negativen reellen x -Axe, wo v_0 imaginär ist, nur der negative reelle Exponent auftritt ($c_+ = 0$, $c_- = c$), so lautet die Lösung auf der positiven x -Axe, nach Überschreiten von $\varphi = 5\pi/3$:

$$v_0^{-\frac{1}{2}} \cdot c \left[e^{i \int_0^x v_0 dx - i \frac{\pi}{2}} + e^{-i \int_0^x v_0 dx + i \frac{\pi}{2}} \right].$$

*) Die Grösse $\alpha = 8\pi^2 MW_{01}/h^2$ darf nicht mit den hier verwendeten Zeichen α , β , γ für die Sprungkonstanten verwechselt werden.

Auf der reellen Axe tritt noch die Nullstelle von v_1 auf. Dieselbe behandelt sich in gleicher Weise. Sähe man von den Nullstellen von $\psi^2 + \alpha^2$, die im Komplexen liegen, ab, so wäre u_0 im Unendlichen gleich dem obigen Ausdruck, und u_1 gleich einem analogen. Die Grenzbedingungen (8a) und (8b) lassen sich also nur für $\eta_0 = \eta_1 = 0$ (d. h. beide Ströme = 0) erfüllen. *Das Stossphänomen muss also durch die Punkte $v_0 = v_1$, die immer im Komplexen, aber für kleine Störung nahe reellen Axe liegen, erklärt werden.*

Da sich die Behandlung des Falles II (LANDAU⁸)) übersichtlicher gestaltet, so betrachten wir diesen im folgenden Paragraphen zuerst.

§ 9. Das Anschlussverfahren der Näherungsfunktionen in der Überschneidungsgegend (Fall II).

In einem kleinen Bereich um die Überschneidungsstelle $\psi = 0$, $r = r_0$ dürfen wir $\alpha = \text{konstant}$ und $\psi = \psi' \cdot (r - r_0)$ setzen. Dann sieht man, dass die Punkte $v_0 - v_1 = 0$ symmetrisch um und nahe bei der reellen r -Axe liegen. Die Unstetigkeitslinien liegen, wie weiter unten gezeigt wird so, dass nur eine von je drei Linien die reelle Axe schneidet und die beiden Punkte verbindet. Die vier andern laufen in Paaren in die positiv und negativ imaginäre Halbebene. In Fig. 3 ist dieser Fall II dargestellt. Zum Anschlussverfahren müssen wir das kleine Gebiet etwa in der gezeichneten Art umfahren. Die Ausführungen dieses § haben aber auch, wie sich zeigen wird, noch in vielen Fällen Geltung wo α nicht klein ist. (Also auch wenn sich die Kurven nach dem in der Einleitung und im § 7 skizzierten Verfahren von NEUMANN und WIGNER¹) nicht schneiden.) Die Bedingung ist nur, dass α und ψ sich in dem jetzt benötigten Gebiet durch eine analytische Funktion darstellen lassen. Um diesen Fall gleich einzuschliessen nehmen wir $t = \frac{\psi}{\alpha}$ als unsere unabhängige Variable. Ist das Gebiet dann klein, so bedeutet das nur eine Masstabänderung, da dann $t = \frac{\psi'}{\alpha} \cdot (r - r_0) = \text{konstant} \cdot (r - r_0)$. Die untere Grenze der Integrale in den Exponenten von (22) kann durch Abspaltung eines in die Konstanten eingehenden Faktors beliebig gewählt werden. Wir wählen z. B. den in Fig. 4 gezeichneten Punkt B. Dann zerlegt man noch

$$\int_B^t v_0 dr = \int_B^t \frac{v_0 + v_1}{2} dr - \int_B^t \frac{v_0 - v_1}{2} dr$$

und entsprechend auch $\int_B^t v_1 dr$.

Das erste Integral hat keine Extremalrichtungen, welche von der Überschneidungsstelle ausgehen und kehrt nach der Umfahrung *jedes einzelnen* der beiden Punkte auf seinen Anfangswert zurück. Das zweite aber hat Extremalrichtungen und sein Vorzeichen ändert sich nach der Umfahrung eines der Punkte $t = \pm i$.

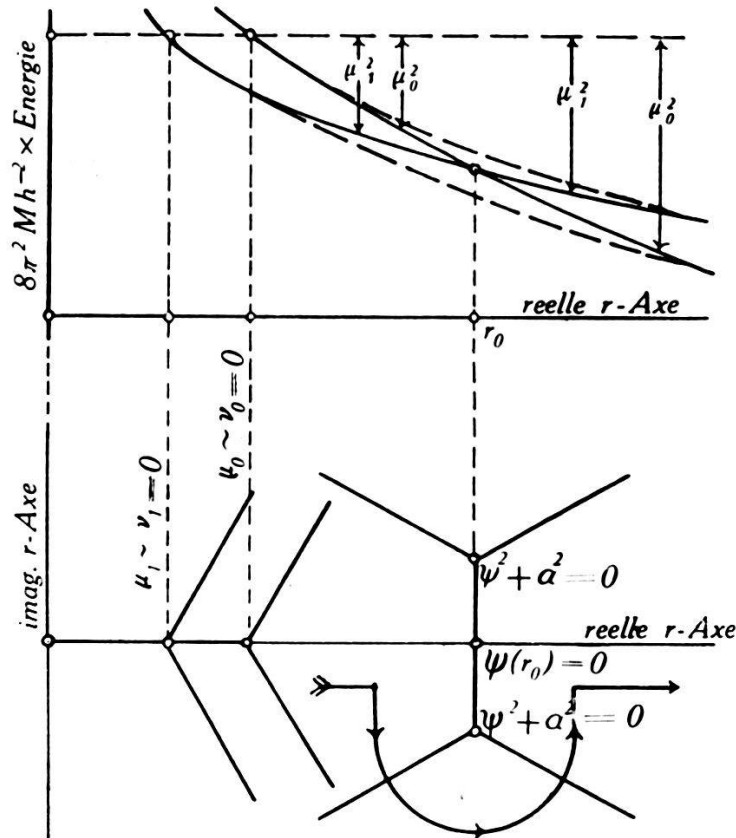


Fig. 3.

Die obere Hälfte der Figur stellt das bei Vernachlässigen der Kopplung α auftretende Überschneiden der potentiellen Energiekurven μ_0^2 und μ_1^2 dar. Die gestrichelten Kurven stellen ν_0^2 und ν_1^2 dar. Sie überschneiden sich nicht, sondern kommen sich nur nahe. Da $\nu_0 \sim \mu_0$ und $\nu_1 \sim \mu_1$ werden soll, wenn wir weit vom Schnittpunkt der μ_i entfernt sind, so verlieren die ν_i ihre Identität am Schnittpunkte.

Die untere Hälfte stellt die dazugehörige komplexe r -Ebene für kleine Störungen α dar. Beschreibt man die gezeichnete Umfahrung, so ändert sich das Vorzeichen von $\sqrt{\psi^2 + \alpha^2}$. Das auf der linken Seite kleinere ν_0 wird jetzt auf der rechten Seite grösser als ν_1 . Die in der oberen Figurenhälfte verlangte Zuordnung ergibt sich also zwanglos. Die Unstetigkeitslinien der Umkehr- und der Überschneidungspunkte sind (starke Linien) eingezeichnet.

Wir haben jetzt vier Glieder mit den Exponenten

$$\pm i \int_{-t}^t \frac{\nu_0 - \nu_1}{2} dr = \pm i \int_{-t}^t T(t) \cdot \sqrt{1 + t^2} \cdot dt,$$

$$\text{wo } T(t) = \frac{\alpha}{t'(\nu_0 + \nu_1)} \text{ ist.}$$

Die Grössen α , t' , v_0 und v_1 sind als Funktionen von t gedacht. Nimmt man $T(t)$ als im zur Umfahrung der Punkte $t = \pm i$ benötigten Gebiet konstant an, so erhält man Fig. 4. Die ausgezogenen Linien stellen die Kurven

$$\arg \left(+i \int_{\pm i}^t \sqrt{1+t^2} \cdot dt \right) = \pi + m \cdot 2\pi,$$

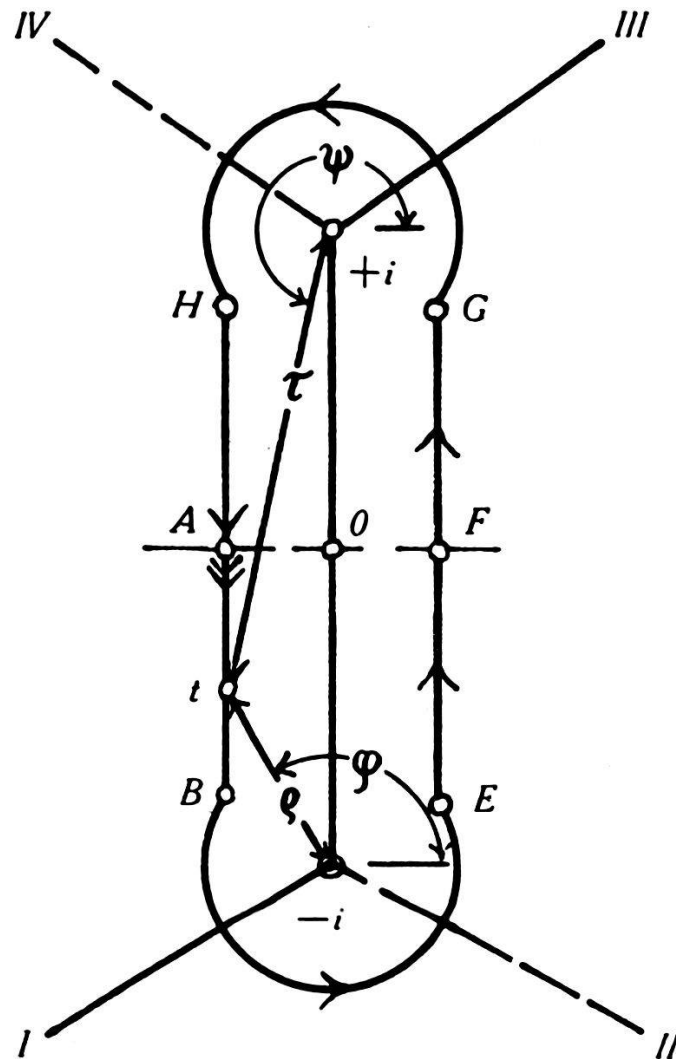


Fig. 4.

$t \cdot (\psi/\alpha)$ -Ebene in der Nähe von $t = 0$ für ψ' und α konstant. Die Unstetigkeitslinien verlassen die Punkte $\pm i$ unter Winkeln, die um je $2\pi/3$ voneinander entfernt sind.

und die Gestrichelten die Kurven

$$\arg \left(-i \int_{\pm i}^t \sqrt{1+t^2} dt \right) = \pi + m \cdot 2\pi$$

dar. Dabei ist festgesetzt

mit
$$\sqrt{1+t^2} = \sqrt{(t - (-i)) \cdot (t - (+i))} = \varrho^{\frac{1}{2}} \cdot e^{i \frac{\varphi}{2}} \cdot \tau^{\frac{1}{2}} \cdot e^{i \frac{\psi}{2}} *$$

$$\frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{5\pi}{2}$$

und

$$\frac{3\pi}{2} < \psi < \frac{7\pi}{2}$$

(siehe Fig. 4). Die Bestimmung der Sprungkoeffizienten lässt sich streng durchführen, gestaltet sich aber ziemlich kompliziert. Es zeigt sich dabei, dass die Konstante von $\exp(+i \int v_0 dx)$ nur proportional der Konstanten von $\exp(+i \int v_1 dx)$ springen usw. Die Bestimmung gestaltet sich wesentlich einfacher, wenn man dieses Resultat voraussetzt. Zur Vereinfachung der Schreibweise lassen wir die belanglose Funktion

$$\exp\left(i \int \frac{v_0 + v_1}{2} dr\right)$$

weg. Dann haben wir nur die Kopplung zwischen den beiden Summanden in

$$\left[v_0^{-\frac{1}{2}} \cdot C_+ \cdot e^{i \int_B^t dt \cdot T \cdot \sqrt{1+t^2} + \frac{1}{2} \int_B^t \frac{dt}{\sqrt{1+t^2}}} - i \int_B^t dt \cdot T \cdot \sqrt{1+t^2} - \frac{1}{2} \int_B^t \frac{dt}{\sqrt{1+t^2}}} \right] \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \int_B^t \frac{t dt}{1+t^2}\right) + v_1^{-\frac{1}{2}} \cdot D_+ \cdot e$$

wo

$$C_+ = c \cdot e^{i \int_0^B v_0 dx - i \frac{\pi}{2}} \quad \text{und} \quad D_+ = d \cdot e^{i \int_0^B v_1 dy - i \frac{\pi}{2}}$$

ist, zu betrachten. Die Linie, welche i mit $-i$ verbindet, darf aber nicht zur Umfahrung benützt werden, da dort

$$\left[i \int_{t=\pm i}^x \frac{v_0 - v_1}{2} dx \right]$$

nicht beliebig gross werden kann. Der in Fig. 4 gezeichnete Weg

*) Siehe Anmerkung auf Seite 390.

$A-B-E-F-G-H-A$ ist erlaubt, wenn die Unstetigkeitslinien der Punkte v_0 und $v_1 = 0$ die gezeichneten Linien I, II, III und IV *nicht* oder erst (bei x_∞) für sehr grosse Werte der Exponenten schneiden. Dann ist der Fehler von der Grössenordnung

$$\exp\left(-\left|i \int_{t \pm i}^{x_\infty} (v_0 - v_1) dx\right|\right).$$

Beschreibt die Lösung den Weg von B nach E (in Fig. 4), so springt zuerst C_+ auf $C_+ + aD_+$, und dann D_+ auf $bC_+ + (1 + ab)D_+$. Auf dem Weg von B über F nach G multipliziert sich das erste Glied ausserdem mit

$$M_1 = \exp\left(i \int_B^G T \cdot dt \cdot \sqrt{1+t^2} + \int_B^G \frac{dt}{2\sqrt{1+t^2}}\right)$$

und das zweite Glied mit $N_1 = M_1^{-1}$, so dass die Lösung bei C lautet:

$$\left[v_0^{-\frac{1}{2}} \cdot \Gamma_+ \cdot e^{i \int_G^t dt \cdot T \cdot \sqrt{1+t^2} + \frac{1}{2} \int_G^t \frac{dt}{\sqrt{1+t^2}}} + v^{-\frac{1}{2}} \cdot \Delta_+ \cdot e^{-i \dots} \right] \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \int_B^t \frac{t dt}{1+t^2}\right)$$

$$\Gamma_+ = (C_+ + aD_+) \cdot M_1; \quad \Delta_+ = (bC_+ + (1 + ab)D_+) \cdot N_1.$$

Beim Umfahren von $+i$ von G nach H ändert sich Γ_+ in $\Gamma_+ + \alpha \Delta_+$ und Δ_+ in $\beta \Gamma_+ + (1 + \alpha \beta) \Delta_+^*$. Auf dem Wege von G nach B über A , treten entsprechende Faktoren M_2 und N_2 hinzu.

Es ist:

$$\log M_1 M_2 = \log N_1 N_2 = \frac{1}{2} \oint \frac{dt}{\sqrt{1+t^2}} + i \oint T \sqrt{1+t^2} \cdot dt = i\pi - 2\delta;$$

$$\log M_1 N_2 = \log M_2 N_1 = 0$$

$$\frac{1}{2} \oint \frac{t dt}{1+t^2} = i\pi.$$

($\oint$ bedeutet das Linienintegral auf dem Weg $A-B-E-F-G-H-A$)

*) Siehe Anmerkung auf Seite 391.

Die positiv reelle Grösse δ bestimmt sich folgendermassen:

Das Integral $i \oint T \cdot \sqrt{1+t^2} \cdot dt$ ist, da T analytisch $= T_0 + t T_0' + \dots$,

$$i \oint T \cdot \left(t + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{t} + \dots \right) \cdot dt = i \oint T_0 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{dt}{t} = -\pi \cdot T_0 = -2 \delta,$$

da $|t| > 1$ auf dem ganzen Weg gewählt werden kann. Nach der Umfahrung gehen v_0 und v_1 ebenso $v_0 - v_1$ (im Gegensatz zum Punkte $v_0 = 0$) auf ihre Anfangswerte zurück. Man erhält die beiden Bestimmungsgleichungen:

$$\begin{aligned} -[C_+ (\alpha b - e^{-2\delta}) + D_+ (\alpha (1 + a b) - a e^{-2\delta})] &= C_+ \\ -[C_+ (\beta - b (1 + \alpha \beta) e^{+2\delta}) \\ + D_+ (\beta a - (1 + a b) (1 + \alpha \beta) e^{+2\delta})] &= D_+. \end{aligned}$$

Dies gibt vier Gleichungen zur Bestimmung der vier Konstanten. Man findet (bis auf den Faktor $e^{2\pi i}$):

$$\alpha = \beta = a = b = e^{i \frac{\pi}{2}} \cdot \sqrt{1 - e^{-2\delta}}.$$

(Hätte man das strenge Problem durchgeführt, so hätten wir im ganzen $4 \times 4 = 16$ Konstanten zu bestimmen, von denen die 8 Null sind, welche v_0 mit $-v_1$ und umgekehrt koppeln.)

Die Konstanten, welche C_- und D_- koppeln, haben denselben Wert wie α, β, a, b .

Ist $e^{-2\delta} \ll 1$, so heissen wir die Punkte weit voneinander getrennt oder *isoliert*. Der isolierte Punkt hat also 3 Unstetigkeitslinien, und die Sprungkoeffizienten sind $e^{i \frac{\pi}{2}}$. Das deckt sich mit dem für $v_0 = 0$ (Fig. 2) gefundenen Werte. *Fallen die Punkte zusammen* ($T_0 = \frac{\delta}{2\pi} = 0$), so sind die Sprungkoeffizienten alle $= 0$. ($T_0 = 0$ bedeutet aber $\alpha = 0$, d. h. keine Wechselwirkung.) Wir kennen die Lösung links von $\psi = 0$, d. h. auf der negativen reellen t -Axe; sie ist gegeben durch Gleichung (22), wenn $c_{\pm} = c \cdot e^{\mp i \frac{\pi}{4}}$ und $d_{\pm} = d \cdot e^{\mp i \frac{\pi}{4}}$ gesetzt wird. Beschreibt man jetzt den Weg $A-B-E-F$, und berücksichtigt, dass aus Symmetriegründen:

$$i \int_A^F \frac{v_0 - v_1}{2} dr = \frac{i}{2} \oint T(r) \cdot \sqrt{1+t^2} \cdot dt = -\delta$$

ist, so lautet die Lösung auf der reellen Axe rechts von $\psi = 0$ (siehe Fig. 4), d. h. auf der positiven reellen t -Axe:

$$\begin{aligned}
 u_0 = & \frac{1}{\nu_0^{\frac{1}{2}}} \cdot \left[\frac{\psi + \sqrt{\psi^2 + \alpha^2}}{\sqrt{\psi^2 + \alpha^2}} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \left[(c \cdot e^{-\delta} + d \cdot \sqrt{1 - e^{-2\delta}} \cdot e^{-i\tau}) e^{i \int_0^x \nu_0 dx - i \frac{\pi}{4}} \right. \\
 & \left. + (c \cdot e^{-\delta} + d \cdot \sqrt{1 - e^{-2\delta}} \cdot e^{+i\tau}) e^{-i \int_0^x \nu_0 dx + i \frac{\pi}{4}} \right] \\
 - & \frac{1}{\nu_1^{\frac{1}{2}}} \left[\frac{\alpha^2}{\psi \sqrt{\psi^2 + \alpha^2} + \psi^2 + \alpha^2} \right] \cdot \left[(-c \cdot \sqrt{1 - e^{-2\delta}} \cdot e^{i\tau} + d \cdot e^{-\delta}) e^{i \int_0^y \nu_1 dy - i \frac{\pi}{4}} \right. \\
 & \left. + (-c \cdot \sqrt{1 - e^{-2\delta}} \cdot e^{-i\tau} + d \cdot e^{-\delta}) e^{-i \int_0^y \nu_1 dy + i \frac{\pi}{4}} \right]; \quad (24)
 \end{aligned}$$

darin bedeutet

$$\int_{\nu_0=0}^r \nu_0 dr = \int_{\nu_1=0}^A \nu_0 dr + \int_A^r \frac{\nu_0 + \nu_1}{2} dr \pm \int_A^r \frac{\nu_0 - \nu_1}{2} dr.$$

Die Schreibweise $\int$ deutet an, dass der Integrand ν_0 resp. ν_1 sich an der Stelle A — F sprungweise von

$$\sqrt{\varphi \mp |\sqrt{\psi^2 + \alpha^2}|} \quad \text{in} \quad \sqrt{\varphi \pm |\sqrt{\psi^2 + \alpha^2}|}$$

verändert. Diese Definition der Identität der ν_i vor und nach der Überschneidung bedeutet, dass für negative t resp. $(r - r_0)$, $\nu_0 < \nu_1$ und für positive t resp. $(r - r_0)$, $\nu_0 > \nu_1$ ist, d. h. wir folgen der Bezeichnungsweise, welche in nullter Näherung eine reelle Überschneidung darstellt. (Wählte man die andere Möglichkeit: ν_0 überall $> \nu_1$, so hätte man einen kontinuierlichen Integranden, aber in nullter Näherung nur ein Nahekommen der Kurven, siehe ²⁾ und Fig. 3). Ferner ist τ die reelle Grösse:

$$\tau = \int_{\nu_0=0}^A \nu_0 dr - \int_{\nu_1=0}^A \nu_1 dr \quad (\tau < 0, \text{ da } \nu_0 < \nu_1 \text{ für negative reelle } t).$$

Für grosse Werte von $\frac{\psi}{\alpha}$ wird der Faktor des ersten (ν_0)-Gliedes zu $\sqrt{2}$ und der des zweiten (ν_1) zu $\left(\frac{\alpha}{\psi \sqrt{2}} \right)$. Die Grössen ν_0

und v_1 sind dort schon praktisch konstant. Dann gilt auch in (21):

$$e^{\pm i \int_0^r v_i dr} \cdot \frac{1}{\alpha} \cdot \left(\frac{d^2}{dr^2} + \varphi_0 \right) e^{\pm i \int_0^r v_i dr} = \frac{\varphi_0 - v_i^2}{\alpha} = \begin{matrix} -\frac{1}{2} \frac{\alpha}{\psi} & i=0 \\ +2 \frac{\psi}{\alpha} & i=1 \end{matrix} \text{ für}$$

Geht man jetzt zur Grenze $\frac{\psi}{\alpha} = \infty$ über, was ja bei fehlender Resonanz ($\alpha(r = \infty) = 0, \psi(r = \infty) > 0$) immer möglich ist, so hat man:

$$u_0 = \sqrt{\frac{2}{v_0}} \cdot \left[(c \cdot e^{-\delta} + d \cdot \sqrt{1 - e^{-2\delta}} \cdot e^{-i\tau}) \cdot e^{i \int_0^x v_0 dx - i \frac{\pi}{4}} \right. \\ \left. (c \cdot e^{-\delta} + d \cdot \sqrt{1 - e^{-2\delta}} \cdot e^{+i\tau}) \cdot e^{-i \int_0^x v_0 dx + i \frac{\pi}{4}} \right] \quad (25)$$

und wegen (21)

$$u_1 = - \sqrt{\frac{2}{v_1}} \cdot \left[(-c \cdot \sqrt{1 - e^{-2\delta}} \cdot e^{+i\tau} + d \cdot e^{-\delta}) e^{i \int_0^y v_1 dy - i \frac{\pi}{4}} \right. \\ \left. (-c \cdot \sqrt{1 - e^{-2\delta}} \cdot e^{-i\tau} + d \cdot e^{-\delta}) e^{-i \int_0^y v_1 dy + i \frac{\pi}{4}} \right]. \quad (26)$$

Die Grenzbedingungen (8a) und (8b) lauten, wenn statt der Bessel'schen Funktionen die W.K.B.²⁾-Näherungen verwendet werden (die im ∞ natürlich asymptotisch in Bessel- und Hankelfunktionen übergehen), und wenn

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \left(\int_{v_0=0}^r v_0 dr - \int_{\mu_0=0}^r \mu_0 dr \right) = \beta \quad \left| \right. \\ \lim_{r \rightarrow \infty} \left(- \int_{v_1=0}^r v_1 dr + \int_{\mu_1=0}^r \mu_1 dr \right) = \gamma \quad \left. \right| \quad (27)$$

gesetzt wird:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi p_0}} \cdot \left[(\eta_0 + \frac{1}{2}) \cdot e^{i\beta} \cdot e^{i \int_0^x v_0 dx - i \frac{\pi}{4}} \right. \\ \left. + \frac{1}{2} e^{-i\beta} \cdot e^{-i \int_0^x v_0 dx + i \frac{\pi}{4}} \right] \quad (28a)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_1 = \sqrt{\frac{2}{\pi p_1}} \cdot \left[\eta_1 \cdot e^{-i\gamma} \cdot e^{i \int_0^y v_1 dy - i \frac{\pi}{4}} \right]. \quad (28b)$$

Es gilt ferner für $r = 0$: $\lim v_0 = \lim \mu_0 = p_0$ und $\lim v_1 = \lim p_1$. Setzt man (29) resp. (30) gleich (32a) resp. (32b) in Grösse und Ableitung nach r (oder x resp. y), so erhält man vier Gleichungen zur Bestimmung der vier Unbekannten c, d, η_0, η_1 . Sie bestimmen sich zu

$$\begin{aligned} \eta_0 &= i \cdot e^{-i(2\beta + \gamma)} \cdot a^2 \cdot \sin \tau - i \cdot e^{-i\beta} \cdot \sin \beta \\ \eta_1 &= -e^{i(\beta - \gamma)} \cdot a \cdot e^{-\delta} \cdot \sin \tau, \quad \text{wo } a = i \cdot \sqrt{1 - e^{-2\delta}}. \end{aligned}$$

(Die Grössen a^2, β, γ, τ sind reell, a^2 bedeutet $(e^{-2\delta} - 1)$). Der Strom der Funktion u_0 ist proportional*)

$$\frac{2}{\pi} \cdot u_0' \bar{u}_0 = \text{Realteil von } (\eta_0 + \eta_0 \bar{\eta}_0) = -(1 - e^{-2\delta}) \cdot e^{-2\delta} \cdot \sin^2 \tau,$$

und der Strom der Funktion u_1 proportional

$$\frac{2}{\pi} \cdot u_1' \bar{u}_1 = \eta_1 \bar{\eta}_1 = (1 - e^{-2\delta}) \cdot e^{-2\delta} \cdot \sin^2 \tau.$$

Mittelt man über τ , so erhält man für $|\eta_1|^2$:

$$\left\{ \begin{aligned} |\eta_1|^2 &= \frac{1}{2} \cdot e^{-2\delta} \cdot (1 - e^{-2\delta}) \\ 2\delta &= \pi \cdot T_0 = \frac{\alpha^2}{\psi' \nu} \cdot \frac{\pi}{2} \\ \nu &= \frac{\nu_0 + \nu_1}{2}. \end{aligned} \right. \quad (33)$$

Die Funktionswerte α^2, ψ' und ν sind an der Stelle $\psi = 0$ verstanden. Für Werte von $2\delta \ll 1$ erhält man

$$|\eta_1|^2 = \frac{\pi}{4} \cdot \frac{\alpha^2}{\psi' \nu} = \frac{1}{2} \cdot 2\delta \quad (29a)$$

in Übereinstimmung mit der Landau'schen Formel⁸⁾. LANDAU integriert aber in seiner ersten Arbeit⁸⁾ später über die $|\eta_{1J}|^2$ in solcher Weise, dass er eine beträchtliche Anzahl von $|\eta_{1J}|^2$ erhält, wo $|\eta_{1J}|^2 > 1/4$ ist, da er bis zu J_m geht, wo an der Überschneidungsstelle

$$\nu_{J_m} = \sqrt{p^2 - \frac{J_m^2}{r_0^2}} = 0.$$

Die vorliegende Methode gilt allerdings auch nicht mehr streng, wenn $\nu \simeq 0$ wird, weil dann die Unstetigkeitslinien von $\nu_0 = 0$ sich mit denen von $t = \pm i$ überkreuzen. Immerhin ist (29) länger richtig als (29a), da $|\eta_{1J}|^2$ immer $< 1/4$ ist. (Das Maximum von

*) Die Grössen β und γ sind selbstverständlich hier und im Folgenden diejenigen aus Gleichung (27) und nicht etwa die Springkonstanten.

$e^{-2\delta} (1 - e^{-2\delta})$ liegt bei $e^{-2\delta} = \frac{1}{2}$ und beträgt $\frac{1}{4}$.) Wird $\delta \geq 1$, so eignet sich die Darstellung des Nahekommens der Kurven besser als die Darstellung des Überschneidens. $|\eta_{1J}|^2$ wird dann gleich $\frac{1}{2} \cdot e^{-2\delta}$. Diesen andern Grenzfall erhält nun LANDAU in seiner neuen Arbeit¹³⁾ auch, jedoch auf eine andere, wie mir scheint weniger übersichtliche Weise.

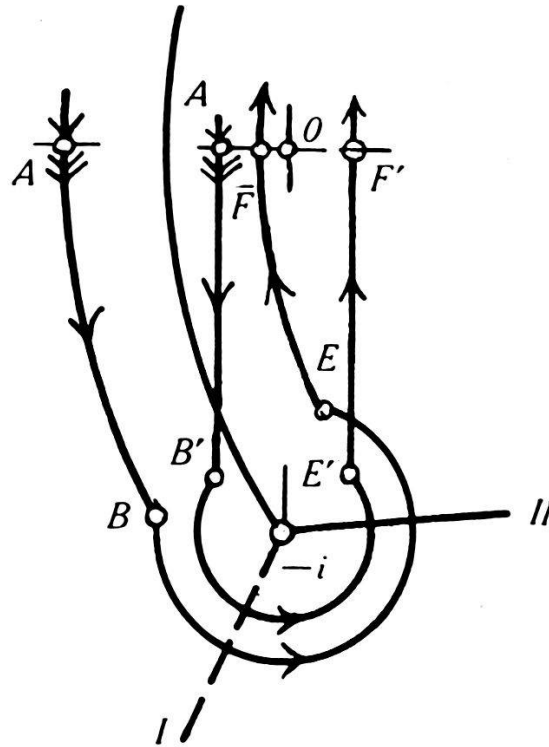


Fig. 4a.

t -(ψ/α)-Ebene in der Nähe von $t = 0$ für nicht konstante ψ' und α .

Die Voraussetzung $T(t) = \text{konstant}$, welche wir zur Zeichnung der Figur 4 annahmen, ist übrigens nicht nötig. Man muss nur $T(t)$ im benötigten Gebiet als überall von 0 verschiedene analytische Funktionen von t approximieren können. Für

$$\int^t t dt / (1 + t^2) \quad \text{und} \quad \int^t dt / \sqrt{1 + t^2}$$

wählt man A' oder F' , statt A und F als untere Grenze (siehe Fig. 4a) und beschreibt den Weg $A' - B' \dots$ usw., während für

$$\int^t dt \cdot T(t) \cdot \sqrt{1 + t^2}$$

der alte Weg $A - B \dots$, welcher jetzt deformiert ist, genommen wird.

¹³⁾ L. LANDAU. Sow. Phys. **2**, 46 (1932). Zu ähnlichem Resultat für grosse α^2 kommt auch C. ZENER (Proc. Roy. Soc. **137** A, 696 (1932)) durch eine ganz verschiedene Betrachtungsweise.

§ 10. Das Anschlussverfahren der Näherungsfunktion für den Fall I
(ψ auf der reellen Axe überall > 0).

Im Fall I trete im ganzen reellen Geschwindigkeitsbereich auf der reellen Axe keine Überschneidung auf. Es wird sich dann zeigen, dass die Gegend, wo $W_{01}^I = \frac{1}{2} (E_0 - E_1)$ d. h. wo $|\alpha| = \psi$ wird, ähnliche Eigenschaften hat, wie die Überschneidungsstelle im vorhergehenden Paragraphen. Das ist verständlich, denn dort beginnen die potentiellen Energiekurven für $\alpha = 0$ (entsprechend den Grössen μ_1^2 und μ_2^2 in Gl. (17) im § 7) sich wesentlich von denjenigen mit $\alpha \sim \psi$ (entsprechend den Grössen ν_0^2 und ν_1^2 in Gl. (17) § 7) zu unterscheiden. Die letztgenannten Kurven (ν_0^2 und ν_1^2) haben nämlich dort bereits den nahezu doppelten Termabstand $2\sqrt{\psi^2 + \alpha^2} \simeq 2\sqrt{2}\psi$ als die ungestörten Kurven. Für kleinere Abstände, wo $|\alpha| > \psi$ wird, wächst der Termabstand wie 2α und für grössere Abstände der Atome ($\alpha \rightarrow 0$) wird er konstant $= 2\psi$. Die potentiellen Energiekurven verlieren also auch in dieser Gegend in beiden Fassungen (ν_i oder μ_i Identifizierung) ihren Sinn. Das Bild ähnelt etwa dem des vorigen Paragraphen, wenn man α und damit δ sehr gross werden lässt, so dass die Neumann-Wigner'sche Darstellung des Nahekommens vorteilhafter als die der Überschneidung wird. Das bedeutet die am Schluss von § 9 in Klammern erwähnte Identifizierung der Kurven. Das Schlussresultat dieses Paragraphen wird auch dem des vorhergehenden sehr ähnlich (Gl. (30)), wenn man annimmt, dass α und ψ ihre Rollen vertauscht haben. Dies zeigt sich schon darin, dass wir die Betrachtung nicht in der doch in roher Weise r ähnlichen t -Ebene durchführen können, sondern von vorne herein die abstrakte zu t reziproke Grösse z heranziehen müssen. Wir verwenden die Form (23) der Lösung des § 8. Der Punkt $z = \frac{\alpha}{\psi} = 0$ entspricht dann dem Ort $r = \infty$. Die Punkte $z = \pm i$ behandelt man gleich wie oben und bestimmt die Unstetigkeitslinien:

$$\arg \left(\pm i \int_{\pm i}^z Z(z) \cdot \sqrt{1+z^2} \cdot dz \right) = \pi; \quad Z = \frac{\psi}{2 \nu z'}; \quad \nu = \frac{\nu_0 + \nu_1}{2}.$$

Der Fall I lässt sich aber nicht so allgemein behandeln wie Fall II. Die Wechselwirkungsenergien $W_{01}^I = \frac{h^2}{8\pi M} \cdot \alpha(r)$ müssen genauer betrachtet werden. Die Änderung der Elektronenkonfiguration für $r = \infty$ von $\Phi_0 = \chi_0$ nach $\Phi_1 = \chi_1$ gibt uns das Kriterium für den stattgehabten Stoss. χ_0 bedeutet aber: Atom I im Zustand m , Atom II im Zustand n . χ_1 in gleicher Weise: Atom I im

Zustand m' und II in n' . Die Wechselwirkungsenergie W_{01}^I lässt sich dann in vielen Fällen für grosse Distanzen nach Potenzen von $1/r$ entwickeln. Für beiderseits neutrale Systeme ist das erste Glied

$$\frac{d_I \cdot d_{II}}{r^3},$$

das zweite Glied

$$\frac{d_I \cdot q_{II} + q_I \cdot d_{II}}{r^4}$$

usw., worin d_I , q_I etc. das mit dem Übergang $m \rightarrow m'$ verbundene Dipolmoment bzw. Quadrupolmoment des Atoms I bedeutet und entsprechend für Atom II. Für beiderseits optisch erlaubte Übergänge wird das Glied mit $1/r^3$ für grosse Distanzen ausschlaggebend sein usw. Dieses Resultat erhält man durch klassische Überlegungen. (Näheres über die wellenmechanische Begründung findet sich in der ersten Arbeit von MORSE und dem Verfasser⁶) im § 3.) Wir beschränken uns im folgenden auf Funktionen α , welche für grosse r wie $\varepsilon \cdot r^{-(\lambda+1)}$ verlaufen, wo $\lambda \geq 2$ ist.

Dann ist, wenn

$$v = \frac{v_0 + v_1}{2}$$

und ψ im Bereiche $|z| < 2$ konstant sind:

$$\alpha' = -(\lambda + 1) \cdot \frac{1}{r} \alpha; \quad r = \left(\frac{\varepsilon}{\alpha} \right)^{\frac{1}{\lambda+1}}$$

$$\text{oder } z' = -\frac{\lambda + 1}{r} \cdot z = -(\lambda + 1) \cdot \frac{\psi^{\frac{1}{\lambda+1}} \cdot z^{1 + \frac{1}{\lambda+1}}}{\frac{1}{\varepsilon^{\frac{1}{\lambda+1}}}}.$$

Wir setzen $n = 1 + \frac{1}{\lambda+1}$ und haben:

$$Z(z) = -\frac{\psi^{1 - \frac{1}{\lambda+1}}}{(\lambda + 1) \cdot \frac{1}{\varepsilon^{\frac{1}{\lambda+1}}}} \cdot \frac{1}{z^n}; \quad 1 < n < 1.5.$$

Unter der z -Ebene müssen wir, da n eine nicht ganze Zahl ist, eine Riemann'sche Fläche verstehen, welche der negativen reellen

Axe entlang aufgeschnitten ist. Die Richtungen der Unstetigkeitslinien bestimmen sich, wenn $z = |z| \cdot e^{i\vartheta}$, $z - (+i) = \varrho \cdot e^{i\varphi}$,

$$z - (-i) = \tau \cdot e^{i\psi} \quad \text{und} \quad dz = |dz| \cdot e^{i\vartheta'} \text{ ist,*)}$$

aus:

$$\arg \left(\pm i \int_{z=+i}^z \frac{v_0 - v_1}{2} dr \right) \\ = \arg \left[\mp i \int_{+i}^z \frac{dz}{z^n} \cdot (z - (+i))^{\frac{1}{2}} \cdot (z - (-i))^{\frac{1}{2}} \right] = \pi + m \cdot 2\pi$$

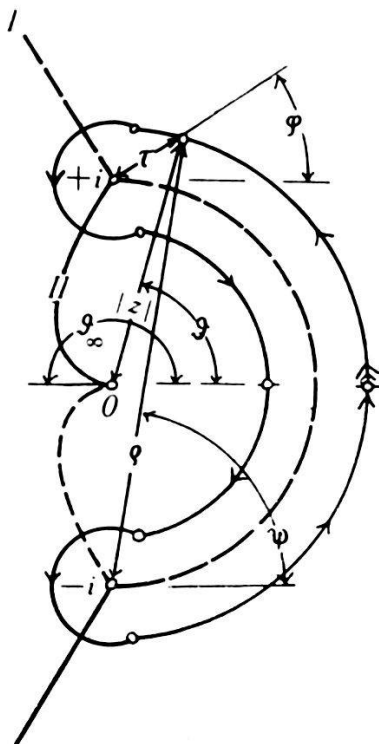


Fig. 5.

$z-(\alpha/\psi)$ -Ebene in der Nähe von $z = 0$ für ψ konstant und $\alpha = \varepsilon/r^2$. Die z -Ebene ist eine Riemann'sche Fläche, welche der negativen reellen Axe entlang aufgeschnitten ist.

oder, wenn $\lambda_{\mp}$ das Argument von $\pm i \int_{+i}^z (v_0 - v_1) dr/2$ bedeutet:

$$\lambda_{\mp} + \varphi' = \pi + m \cdot 2\pi,$$

wo $\lambda_{\mp} = \frac{1}{2} \cdot (\varphi + \psi - 2n\vartheta \pm \pi)$ ist.**)

Wir setzen fest $0 \leq \varphi, \psi < 2\pi$, und auf dem nullten Blatt der Riemann'schen Fläche $-\pi < \vartheta < \pi$. Für die Ausgangsrichtungen

*) Siehe Anmerkung auf S. 390.

**) λ_+ und λ_- ist nicht mit dem Exponenten λ ohne Index in $\alpha = \varepsilon \cdot r^{-(\lambda+1)}$ zu verwechseln.

ist $\varphi' = \varphi \equiv \varphi_0$ zu wählen. Das gibt für φ_0 , da $\vartheta_0 = \psi_0 = \frac{\pi}{2}$ ist: für D_+ und C_- Sprünge (λ_-):

$$\varphi_0 = \frac{1 + 8m + 2n}{6} \pi.$$

Das Bild für $\alpha = \frac{\varepsilon}{r^2}$, $\lambda = 1$ und $n = 1.5$ ist in Fig. 5 gegeben: Bezeichnet man φ_0 , für D_+ Sprünge und $m = 1$, mit

$$\varphi_0 = 2\pi - \sigma, \text{ und } \sigma = \frac{2n - 3}{6} \pi > 0$$

so ist $\sigma = 0$ für $n = 1.5$. Der Halbkreis $|z| = 1$ von $-\frac{\pi}{2} < \vartheta < \frac{\pi}{2}$ genügt der Gleichung, da dort $\varphi + \psi = \frac{3\pi}{2} + 2\psi$, und $\psi = \frac{\vartheta}{2} + \frac{\pi}{4}$. Daher $\varphi + \psi = 2\pi + \vartheta$ und $\lambda_- = \frac{3\pi}{2} + \vartheta$. Der Tangentenwinkel ist aber in jedem Punkte $\varphi' = \frac{3\pi}{2} - \vartheta$, so dass $\lambda_- + \varphi' = \pi + 2\pi$ ist. Die Kurve $\lambda_- + \varphi' = \pi$, wo C_- und D_+ springen (I) geht nach $z = \infty$ mit der asymptotischen Richtung $\varphi'_\infty = \pi$. Die Kurve $\lambda_+ + \varphi' = \pi$, wo C_+ und D_- springen, (II) nähert sich $z = 0$ von der Richtung $\vartheta_\infty = \pi$ her. Wir können also I sowohl wie II an einer Stelle überschreiten, wo

$$\pm i \int_{z=i}^r \frac{v_0 - v_1}{2} dr$$

über alle Grenzen wächst, wenn die Punkte v_1 und $v_0 = 0$ weit entfernt sind. Die Verhältnisse um den Punkt $-i$ sind spiegelbildlich*) wie sich leicht nachweisen lässt. Zur Bestimmung der Sprungkonstanten wählen wir wie im vorhergehenden Fall den Weg $A-B-E-F-G-H-A^{**})$.

Da uns die Lösung für $\lim r = \infty$, d. h. für $\lim z = +0$ interessiert, so wählen wir, nach Bestimmung der Sprungkonstanten den Weg $A-B-E-F$ zum Anschlussverfahren.

Ist $\alpha = \frac{\varepsilon}{r^{\lambda+1}}$ und $\lambda > 1$, $1 < n < 1.5$, so ändert sich das Bild nur wenig. (Fig. 6). Der Halbkreis wird zu einer Kurve K_w , die vom Punkte i unter dem Winkel $2\pi - \sigma$ ($\sigma = (2n - 3)\pi/6 > 0$) verlässt. Wir zeichnen den Kreis K_a für $\sigma = 0$ aus Fig. 5 in Fig. 6 ein, und einen Kreis K_i , welcher in den Punkten $z = \pm i$ die gleichen Tangenrichtungen wie K_w ($2\pi - \sigma$ resp. $3\pi - \sigma$) hat. Be-

*) Spiegelbildlich in dem Sinne, dass die Kurven spiegelbildlich verlaufen, aber I und II ihre Bedeutung vertauscht haben, wenn man den gezeichneten (Fig. 5) Weg einschlägt.

**) Der Übersichtlichkeit halber sind die Buchstaben $A-B \dots -F$ in Fig. 5 nicht eingezeichnet, sondern nur die Punkte und der Weg durch einen geschlossenen gefiederten Pfeil (wie in Fig. 4).

zeichnet man mit φ_i' und φ_a' die Tangenrichtungen der Kreise K_i und K_a als Funktion von ϑ ($\frac{\pi}{2} > \vartheta > -\frac{\pi}{2}$), und bezeichnet man mit φ' die Richtung, wie sie sich aus $\lambda_- + \varphi' = 3\pi$ ergibt, so ist:

$$\begin{aligned}\varphi' - \varphi_i' &= 3\sigma \left[\frac{1}{2\sigma} \sin^{-1}(\sin \sigma \cdot \sin \vartheta) - \frac{\vartheta}{\pi} \right] \\ &\simeq 3\sigma \left[\frac{\sin \vartheta}{2} - \frac{\vartheta}{\pi} \right] > 0\end{aligned}$$

und

$$\varphi' - \varphi_a' = -3\sigma \left[\frac{\vartheta}{\pi} \right] < 0.$$

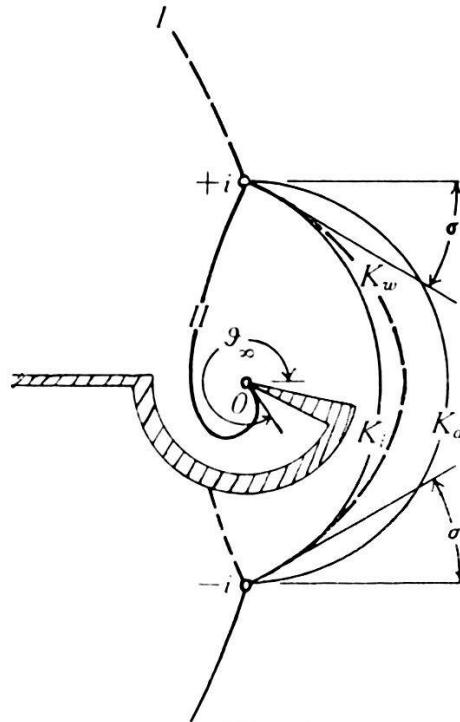


Fig. 6.

z -(α/p)-Ebene in der Nähe von $z = 0$ für $\alpha = \varepsilon/r^{\lambda+1}$, ($\lambda > 1$). Die z -Ebene ist eine der negativen reellen Axe entlang aufgeschnittene Riemann'sche Fläche. In der Figur ist das nullte Blatt ($-\pi < \vartheta < +\pi$) und ein Stück des plus ersten Blattes ($+\pi < \vartheta < 3\pi$) gezeichnet. Die schraffierte Fläche stellt den Aufschnitt dar.

Die wahre Kurve K_w , auf welcher $\varphi' - \varphi_w' \stackrel{id}{=} 0$, muss also zwischen K_i und K_a liegen, und zwar, da der Absolutwert des ersten Ausdruckes überall kleiner ist als der des zweiten, nahe bei K_i . Die Kurve I läuft nach wie vor ins Unendliche mit einer Asymptotenrichtung $\varphi_\infty = (n - \frac{1}{2})\pi$. Die Kurve II nähert sich spiralförmig auf der Riemann'schen Fläche dem Punkte $z = 0$ mit der Asymptotenrichtung

$$\vartheta_\infty = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{1}{n-1} = (\lambda+1) \cdot \frac{\pi}{2}.$$

Die Ausführung der Sprungkonstantenbestimmung und des Anschlusses geht genau gleich wie im Fall II. Man erhält für $|\eta_1|^2$ nach der Phasenmittelung wieder:

$$|\eta_1|^2 = \frac{1}{2} \cdot e^{-2\delta} (1 - e^{-2\delta})$$

$$\delta = \left| i \int_{-i}^{+i} Z(z) \cdot \sqrt{1+z^2} \cdot dz \right| = \frac{\psi^2}{2\nu\alpha'} \cdot M_\lambda$$

wo unter α' der Absolutwert der Ableitung von α an der Stelle $\alpha^2 = \psi^2$ verstanden ist, und wo

$$M_\lambda = \left| i \int_{-i}^{+i} \frac{1}{z^{1+\frac{1}{\lambda+1}}} \cdot \sqrt{1+z^2} \cdot dz \right|$$

eine Zahl der Grössenordnung 1 ist. (Für $\lambda = 1$ beträgt der Wert 3,41.) Wir haben also:

$$|\eta_1|^2 = \frac{1}{2} \cdot \left(e^{-M_\lambda \frac{\psi^2}{\nu\alpha'}} - e^{-2M_\lambda \frac{\psi^2}{\nu\alpha'}} \right). \quad (30)$$

Diese Formel gilt nur, wenn im Bereiche, wo $|\alpha| \simeq |\psi|$ wird, ν reell und nahezu konstant ist d. h. wenn $\nu_0 = 0$ weit entfernt ist. Mit Annäherung gilt (34) überall wo $|\alpha_{\max}| > |\psi|$.

Wie in der Einleitung zu diesem Paragraphen bemerkt, entspricht diese Gleichung (30) abgesehen vom Zahlenfaktor M_λ genau Gleichung (29), wenn man die Bedeutungen von α und ψ vertauscht.

§ 11. Abschätzung der Matrixelemente $|\eta_{1J}|^2$ nach dem Störungsverfahren.

Ist die *Kopplung sehr schwach*, so müssen die durch das Anschlussverfahren ermittelten Übergangswahrscheinlichkeiten $|\eta_{1J}|^2$ ((29) im § 9 und (30) im § 10) in die nach der Störungstheorie ((14) § 6) ermittelten Werte übergehen.

Im Fall I können wir diesen Übergang allerdings *nicht* verfolgen, da die im § 10 gegebene Ableitung nur für den Fall gilt, wo $|\alpha_{\max}| > |\psi|$. In diesem Fall ist aber die Kopplung nicht mehr schwach.

Ist $|\alpha|$ im ganzen reellen Geschwindigkeitsbereich $> |\psi|$, so gilt auch, wenigstens für grosse J ; näherungsweise

$$v_i = u_i \simeq \sqrt{r} \cdot J_J(p_i r).$$

Beschränkt man sich wieder auf $\alpha = \varepsilon \cdot r^{-(\lambda+1)}$ und ist $p_1 < p_0$, so gilt (14):

$$\eta_{1J} = \frac{\pi \varepsilon}{2} \int_0^\infty \frac{J_J(p_0 r) \cdot J_J(p_1 r) \cdot dr}{r^\lambda} = \frac{\pi \varepsilon}{2} \frac{1}{2^\lambda \cdot \Gamma\left(\frac{\lambda+1}{2}\right)} \cdot \frac{\Gamma\left(J - \frac{\lambda-1}{2}\right)}{\Gamma(J+1)} \cdot \left(\frac{p_1}{p_0}\right)^J \cdot F\left(-\frac{\lambda-1}{2}, J - \frac{\lambda-1}{2}, J+1, \left(\frac{p_1}{p_0}\right)^2\right).$$

Für die Γ -Funktionen verwenden wir (grosse J) Stirlings Formel, und setzen ferner⁶):

$$F \simeq \left[1 - \frac{J}{J + \left(\frac{\Gamma(\lambda)}{\Gamma\left(\frac{\lambda+1}{2}\right)}\right)^{\frac{2}{\lambda-1}}} \cdot \left(\frac{p_1}{p_0}\right)^2 \right]^{\frac{\lambda-1}{2}}, \quad c_1 = \frac{\pi^2 \cdot \Gamma(\lambda)^2}{4^{\lambda+1} \cdot \Gamma\left(\frac{\lambda+1}{2}\right)^4}$$

$$c_2 = \left[\frac{\Gamma\left(\frac{\lambda+1}{2}\right)}{\Gamma(\lambda)} \right]^{\frac{2}{\lambda-1}}$$

dann wird:

$$|\eta_{1J}|^2 = c_1 \cdot \varepsilon^2 \cdot p_0^{2\lambda-2} \cdot \frac{1}{J^{2\lambda}} e^{-\frac{\psi}{p_0^2} J} \cdot \left[1 + c_2 \cdot \frac{\psi}{p_0^2} J \right]^{\lambda-1}. \quad (31)$$

Setzt man nun $\alpha_{\max} = \varepsilon \cdot p_0^{\lambda+1} / J^{\lambda+1}$

$$\text{und } |\alpha'_{\max}| = \left| \frac{\lambda+1}{r_{\min}} \cdot \alpha_{\max} \right| = \left| \frac{(\lambda+1) p_0}{J} \cdot \alpha_{\max} \right|$$

so wird:

$$\frac{\psi}{p_0^2} J = \frac{\psi \alpha_m}{p_0 \alpha'_m} (\lambda+1)$$

bunter α_m und α'_m sind immer die Absolutwerte verstanden, m (edeutet max.)

Man hat also mit guter Annäherung für $|\alpha_{\max}| < |\psi|$:

$$|\eta_{1J}|^2 = c_1 \cdot \left[\frac{\alpha_m^2}{p_0 \alpha'_m} (\lambda+1) \right]^2 \cdot e^{-\frac{\psi \alpha_m}{p_0 \alpha'_m} (\lambda+1)} \cdot \left[1 + c_2 \cdot (\lambda+1) \frac{\psi \alpha_m}{p_0 \alpha'_m} \right]^{\lambda-1}. \quad (31a)$$

Je kleiner ψ/α' , umso grösser wird $|\eta|^2$, wie es ja auch LONDON⁷⁾ verlangte.

Wir bezeichnen jetzt für diese Teilwelle J , wo

$$\alpha_m = |\alpha(r_{\min})| = \psi \text{ wird,} \\ r_{\min} = p_1^{-1} \cdot J \text{ mit } r_0 \text{ und das } J \text{ mit } J_m.$$

Zum Werte $J = J_m$ gehört also, der im § 3 vorgenommenen Zerlegung in sphärische Harmonische entsprechend, diejenige Teilwelle, welche einer Annäherung der beiden Atomzentren bis zu dem Punkte entspricht, wo die Störungsenergie gleich der Resonanzunschärfe wird.

Für die $|\eta_{1J}|^2$, wo $J > J_m$ ist lautet in (31a) die charakteristische Exponentialfunktion:

$$\exp \left[- (\lambda + 1) \frac{\psi \alpha_m}{p_0 \alpha'_m} \right],$$

während sie für $J < J_m$, wo $\alpha_m > \psi$ ist, nach (30) in § 10 lautet:

$$\exp \left[- M_\lambda \frac{\psi \psi}{p_0 \alpha'_m} \right].$$

Es sieht also so aus, als ob abgesehen von den Zahlenfaktoren M_λ und $\lambda + 1$, sich das beim Verkleinern von J wachsende α_m im Zähler nur bis zum Werte $\alpha_m = \psi$ vergrößert ($J = J_m$) und dann konstant bleibt, während das α'_m im Nenner weiter wächst. Diese Erscheinung kann auch auf eine andere, allerdings sehr wenig strenge Weise, plausibel gemacht werden:

Idealisiert man α , indem man setzt $\alpha = \alpha' \cdot (r_0 - r) = \alpha' \cdot x$ und $\alpha = 0$ für $r > r_0$, so hat man in der Gegend $r < r_0$:

$$v_0 v_1 = \frac{2}{\pi} \frac{1}{\sqrt{v_0 v_1}} \cdot \frac{1}{2} \left[\cos \left\{ \int_0^x (v_0 - v_1) dx \right\} \cdot \cos \tau \right. \\ \left. + \sin \left\{ \int_0^x (v_0 - v_1) dx \right\} \cdot \sin \tau \right] \quad (32)$$

plus einem schnell oszillierenden Teil mit

$$\frac{\cos}{\sin} \left\{ \int_0^x (v_0 + v_1) dx \right\}.$$

τ ist eine (siehe § 10) hier belanglose Phasenkonstante.

Für $\sqrt{\psi^2 + \alpha^2} \operatorname{tg}^{-1} \frac{\alpha}{\psi}$ setzen wir (siehe § 7) $\alpha \simeq \alpha' \cdot x$.

Die Gleichsetzung von:

$$\begin{aligned} \int_0^x (v_0 - v_1) dx &= \frac{\alpha'}{v} \int_0^x \sqrt{\frac{\psi^2}{\alpha'^2} + x^2} \cdot dx \\ &= \frac{\alpha'}{2v} \cdot x \cdot \sqrt{\frac{\psi^2}{\alpha'^2} + x^2} \equiv \frac{\psi^2}{4v\alpha'} \cdot t \end{aligned}$$

ist erlaubt bei Vernachlässigung logarithmischer Glieder.

Dann wird

$$\alpha' \cdot x dx = \frac{\psi^2}{2\alpha'} \cdot \frac{t dt}{\sqrt{1+t^2}},$$

und auf Grund von (19) im § 7:

$$|\eta_{1J}|^2 = \frac{\psi^2}{4v\alpha'} \cdot \int_0^\infty \frac{t dt}{\sqrt{1+t^2}} \cos \left[\frac{\psi^2}{4v\alpha'} \cdot t \right] \simeq e^{-\frac{\psi^2}{4v\alpha'} - \log \cdot \text{Gl.}} \quad (33)$$

Grössenordnungsweise tritt also der Exponent $\frac{\psi^2}{4v\alpha'}$ auf, doch wissen wir hier nicht an welcher Stelle (bei nicht konstantem α') α' zu nehmen ist.

Endlich sei, der Vollständigkeit halber, noch das Landau'sche⁸⁾ Matrixelement erwähnt. Man erhält es aus (19a) und (21), wenn man berücksichtigt, dass für $x=0$: $\psi = \psi' \cdot x$ ist wo in (32) u_i statt v_i und μ_i statt v_i zu setzen ist, (die Phasenkonstante ist allerdings wegen des Unterschiedes zwischen v_i und μ_i von derjenigen des § 9 verschieden).

$$\int_0^x (\mu_0 - \mu_1) dx = \frac{\psi'}{2\mu} \cdot x^2$$

und dass

$$\int_0^\infty \frac{\cos \left[\frac{\psi'}{2\mu} x^2 \right]}{\sin \left[\frac{\psi'}{2\mu} x^2 \right]} \cdot dx = \left[\frac{2\pi\mu}{\psi'} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Dann ist nach Mitteilung über die Phase:

$$|\eta_{1J}|^2 = \frac{\pi}{4} \frac{\alpha^2(r_0)}{\mu_J(r_0) \cdot \psi'(r_0)}; \quad \psi(r_0) = 0 \quad (34)$$

Diese Auswertung von LANDAU⁸⁾ ist natürlich nur erlaubt, wenn $|\eta_{1J}|^2 \ll 1/4$. Im „Resonanzfall“ d. h. sehr kleines $\psi'(r_0)$ und für grosse α^2 resp. kleine μ_J wird daher sein Resultat ungültig. Die Formel (34) deckt sich (da ja für kleine α und grosse ψ' $\mu_i = v_i$ ist) mit (29a).

**§ 12. Bestimmung des Wirkungsquerschnittes im Fall I
(keine Überschneidung der Kurven).**

Im Fall I zerfällt der Wirkungsquerschnitt in zwei Teile. Wir ersetzen die Summation $\sum_J J$ durch $\int J dJ$. Für $J \ll J_m$ (wenn $J_m/p_1 \simeq r_0$ und wenn $\alpha(r_0) = \psi$ ist) gilt sicher die Formel (30). Für $J \simeq J_m$ haben wir keinen gültigen Ausdruck, da für $J \simeq J_m$ und $J > J_m$ sich die Unstetigkeitslinien von $v_1 = 0$ und von $z = \pm i$ im Endlichen überschneiden. Der Ausdruck liegt aber auf alle Fälle in der gleichen Grössenordnung. Für $J \gg J_m$ ist aber sicher die Born'sche⁶⁾ (oder London'sche⁷⁾, da sie zusammenfallen) Näherung (31) oder (31a) gut. Verwenden wir (30) und (31a) bis zu $J = J_m$, so machen wir keinen grossen Fehler.

Wir setzen daher (35)

$$q = q_{<} + q_{>}, \text{ wo } \lesseqgtr : J \lesseqgtr J_m \text{ bedeutet.} \quad (35)$$

Für den Teil $q_{<}$ wollen wir nur den Fall „guter“ Resonanz betrachten, d. h. wir setzen an der Stelle r_0

$$r_0 = J_m / p_m; \quad (p_m^2 = p_0^2 - 8 M \pi^2 \cdot W_{00}(r_0) / h^2)$$

$$v_0^2 \simeq v_1^2 \simeq \left[\frac{v_0 + v_1}{2} \right]^2 \simeq v^2 \simeq p_m^2 - \frac{J^2}{r_0^2},$$

so dass $v^2 (J = J_m) = 0$ an der Stelle $r = r_0$.

Führen wir die Grössen

$$z = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{J^2}{p_m^2 r_0^2}}}, \quad k = 3 \frac{\psi^2}{p_0 \alpha}$$

ein*) und definieren die Funktion

$$f_1 = 2 \left[\int_1^\infty \frac{dz}{z^3} (e^{-kz} - e^{-2kz}) \right]$$

so haben wir:

$$q_{<} = \pi r_0^2 \cdot 2 \left[\frac{p_m}{p_0} \right]^2 \cdot f_1 \left(3 \cdot \frac{\psi^2}{p_m \alpha'} \right). \quad (36)$$

Die Funktion $f_1(k)$ steigt für $k < 1$ wie $2k$ an, erreicht bei $k = 0,45$ ein flaches Maximum vom Werte 0,22 und nähert sich für grosse Werte von k der Funktion $2 \cdot e^{-k}/k$.

*) Der Faktor M_λ des § 10, welcher für $\lambda = 2$ den Wert 3,41 hat, ist der Einfachheit halber im folgenden überall = 3 gesetzt.

Für den Teil $q_>$ setzen wir $z = \frac{J}{J_m}$ und erhalten aus (31):

$$q_> = \pi r_0^2 \cdot 8 c_1 \left[\frac{\psi}{p_0^2} J_m \right]^2 \cdot \sum_{k=0}^{\lambda-1} \binom{\lambda-1}{k} \cdot c_2^k \cdot \left[\frac{\psi}{p_0^2} \cdot J_m \right]^k \cdot \int_1^\infty \frac{dz}{z^{2\lambda-1-k}} \cdot e^{-\frac{\psi}{p_0^2} J_m \cdot z}.$$

Man sieht, dass für sehr schlechte Resonanz

$$\frac{\psi^2}{p_0^2 \alpha'} \gg 1,$$

$q_>$ überwiegt, da in $q_>$ die Exponentialfunktion mit der grossen Zahl

$$\left(\frac{\psi}{p_0^2} J_m \right)^2$$

multipliziert ist, während in $q_<$ die grosse Zahl

$$k = \left(\frac{\psi}{p_0^2} J_m \right) = 3 \frac{\psi^2}{p_0 \alpha'}$$

im Nenner auftritt*).

Eine allgemeine Diskussion würde sehr weitläufig. Wir wollen daher den konkreten Fall $\alpha = \varepsilon/r^3$, $\lambda = 2$ betrachten.

Die Funktionen f_3 und f_4 seien definiert als

$$f_3(k) = 2 \int_1^\infty \frac{dz}{z^3} \cdot e^{-k \cdot z} = e^{-k} - k \cdot \{e^{-k} - k [-Ei(-k)]\};$$

$$[-Ei(-k)] = \int_k^\infty \frac{e^{-u}}{u} du$$

und

$$f_4(k) = \int_1^\infty \frac{dz}{z^2} \cdot e^{-kz} = e^{-k} - k [-Ei(-k)].$$

*) $q_>$ ist nichts anderes als der von MORSE und dem Verfasser⁶⁾ berechnete Querschnitt, wenn das dortige $\beta = J_m$ und $\frac{W}{E} = \frac{2\psi}{p_0^2}$ gesetzt wird. Auf den Kurven der Figuren $D_\beta\left(\frac{W}{E}\right)$ im § 5 der alten Arbeit, bedeutet das, dass man bei zunehmender Resonanz sich auf Kurven mit grösserem β begeben muss. Allerdings zeigt die Rechnung, dass $J_m = \beta$ leicht die Grössenordnung 100 übersteigt. Die „Resonanzkurven“ werden daher flacher. Dazu tritt aber noch der mit schärferer Resonanz wachsende Wert von $q_<$ hinzu, welcher diesen Effekt aufhebt und schliesslich sogar überwiegt.

Dann gilt:

$$f_1(k) = f_3(k) - f_3(2k)$$

$$\frac{1}{2} \lim_{k \rightarrow \infty} f_1(k) = \frac{1}{2} \lim_{k \rightarrow \infty} f_3(k) = \lim_{k \rightarrow \infty} f_4(k) = \frac{1}{k} \cdot e^{-k}$$

$$f_3(0) = f_4(0) = 1; \lim_{k \rightarrow 0} f_1(k) = 2k.$$

Es ist, da

$$\lambda + 1 = 3: c_1 = 1/4; c_2 = \pi/4 \quad (\text{siehe (31)}).$$

$$q_{>} = \pi r_0^2 \cdot 2 \cdot \left(3 \frac{\psi^2}{p_0 \alpha'} \right)^2 \cdot \left[\frac{1}{2} \cdot f_3 \left(3 \frac{\psi^2}{p_0 \alpha'} \right) + \frac{\pi}{4} \left(3 \frac{\psi^2}{p_0 \alpha'} \right) \cdot f_4 \left(3 \frac{\psi^2}{p_0 \alpha'} \right) \right] \quad (37)$$

oder aus (36), wenn $p_m \sim p_0$, und aus (37):

$$q = \pi r_0^2 \cdot \left[2 f_1(k) + k^2 \cdot f_3(k) + \frac{\pi}{2} k^3 \cdot f_4(k) \right] \quad (38)$$

$$k = \frac{\psi}{p_0^2} J_m = \frac{\psi^{\frac{2}{3}} \cdot \varepsilon^{\frac{1}{3}}}{p_0}, \quad \text{da } r_0 = \left(\frac{\varepsilon}{\psi} \right)^{\frac{1}{3}} \text{ ist.}$$

In Fig. 7 sind der Klammerausdruck (ausgezogen) und der erste Summand (gestrichelt) gezeichnet. Dieser erste Summand, welcher für gute Resonanz überwiegt, stellt den Anteil $q_{<}$ dar, während die Differenz zwischen der ausgezogenen und der gestrichelten Kurve den Anteil $q_{>}$ bedeutet. Für kleine k hat man:

$$q = \pi r_0^2 \cdot 4k \quad (39)$$

und für grosse k :

$$q = \pi r_0^2 \cdot \frac{\pi}{2} k^2 \cdot e^{-k} \quad (40)$$

Ist $\lambda \neq 2$, so gilt (39) immer noch, während in (40) sich der numerische Faktor $\frac{\pi}{2}$ in $8 c_1 c_2^{\lambda-1}$ verwandelt, und statt k^2 , k^λ steht. k bedeutet dann in (39): $M_\lambda \psi^2 / p_m \alpha'$, und in (40): $(\lambda+1) \psi^2 / p_m \alpha'$.

Die Formeln (29) und (30) wurden aus den Lösungen der Differentialgleichung (18a) oder (20) und den Grenzbedingungen (28a) und 28b) erhalten. Dabei wurde vorausgesetzt, dass $r = +$ reell ∞ einem Punkte $t = +$ reell ∞ für Fall II, und $z = +$ reell 0 im Fall I entspricht, der weit von der Unstetigkeitslinie, welche

$+i$ mit $-i$ verbindet, und weit von z (oder t) $= \pm i$ liegt. Weit heisst hier, dass

$$\left| i \int_{z, t = \pm i}^r (\nu_0 - \nu_1) dr \right|$$

eine grosse Zahl ist. Das ist immer der Fall, wenn $\nu_0 \neq \nu_1$ für $r = \infty$ ist, d. h. wenn $\psi_\infty \neq 0$ ist.

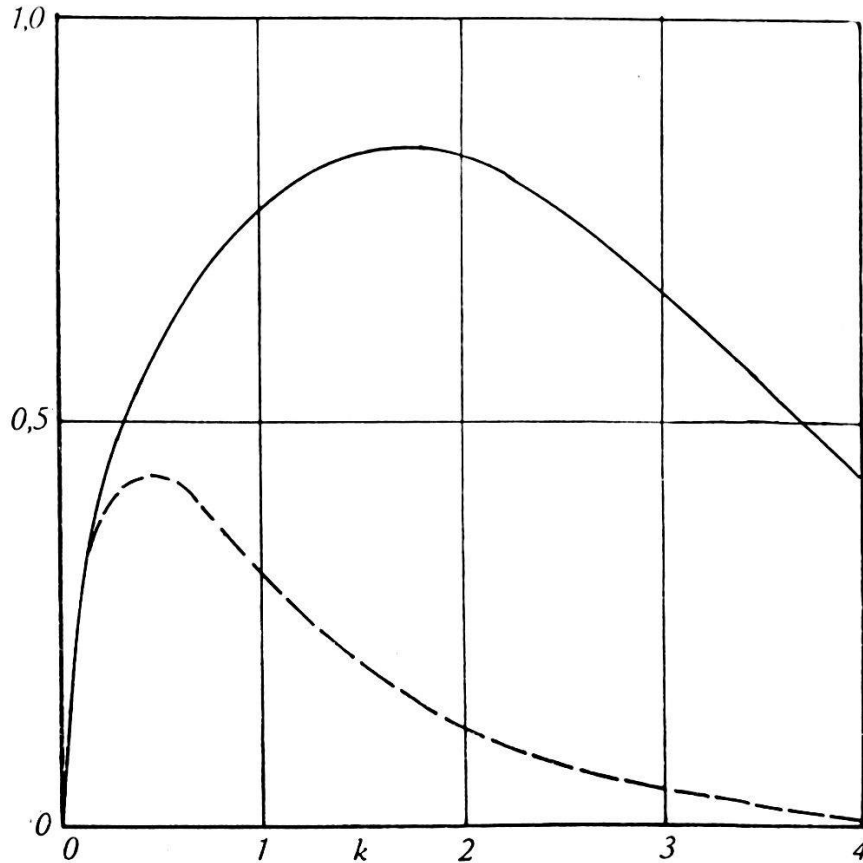


Fig. 7.

Die in Gl. (36) verwendete Funktion $2f_1(k)$ gestrichelt (-----) und die Summe in Gl. (38) $[2f_1(k) + k^2 \cdot f_3(k) + \pi k^3 \cdot f_4(k)/2]$ ausgezogen (—) als Funktion von k gezeichnet. Die Summe verläuft für sehr kleine k wie $4k$ und für sehr grosse k wie $\pi k^2 \cdot \exp(-k)/2$.

Dann gilt nämlich:

$$\lim_{r=R=\infty} \left| i \int_{z, t = \pm i}^r (\nu_0 - \nu_1) dr \right| > \left| \int_0^\infty \frac{\psi_\infty}{p_0} dr \right| > \frac{\psi_\infty}{p_0} \cdot R$$

R bedeutet den maximalen Abstand, d. h. unsere Betrachtungen beziehen sich alle auf $\lim R = \infty$.

Formel (39) gilt daher für beliebig kleine ψ_∞ und damit kleine k solange als

$$\lim_{R=\infty} \frac{\psi_R \cdot R}{p_0} = \infty.$$

Wir bezeichnen diesen Fall für beliebig kleine ψ_∞ als *Grenzfall* im Gegensatz zum im § 13 behandelten *Resonanzfall*.

Im *Grenzfall* gilt also

$$\lim q = \frac{12 \pi \cdot \psi_\infty^{1 - \frac{3}{1+\lambda}} \cdot \varepsilon^{\frac{3}{1+\lambda}}}{p_0 \cdot (\lambda + 1)} \cdot *)$$

Für $\lambda + 1 < 3$ erhalten wir beim Verschärfen der Resonanz beliebig grosse Werte von q .

Für $\lambda + 1 = 3$ (den betrachteten Fall) strebt q einem festen Grenzwert zu. Der Grenzquerschnitt von $\lambda + 1 = 3$ ist von gleicher Grössenordnung wie die Maximalquerschnitte von $\lambda + 1 > 3$ (siehe unten für $\lambda + 1 > 3$).

Für $\lambda + 1 > 3$ durchläuft q beim Verkleinern von ψ_∞ ein Maximum. Dort hat die (38) analoge Klammer $[2 f_1 + \dots]$ die Grössenordnung 1. Das Maximum beträgt also etwa

$$q_{\max} = \pi r_{00}^2 \times 1.$$

Dieses Resultat gilt für alle Wechselwirkungen, wo $\lambda + 1 > 3$. Die Grössen $r_{00}(k_0)$ und k_0 sind bestimmt durch

$$\frac{d}{dk} \left\{ \left[2 \cdot f_1(k) + k^2 \cdot \sum_l c_l k \cdot f_{3+l} \left(\frac{3}{\lambda + 1} \right) \right] \cdot r_0(k) \right\} = 0$$

k_0 hat ebenfalls die Grössenordnung 1, so dass r_{00} sich grössenordnungsweise durch:

$$\alpha'(r_{00}) = \frac{\psi^2}{p_m} \text{ bestimmt.}$$

Der Grenzquerschnitt wird hier $= 0$.

Allgemein gilt:

Die Geschwindigkeitsabhängigkeit wird nur durch den Klammerausdruck (Fig. 7, für $\lambda = 2$) gegeben, da r_0 dann konstant, und k proportional $\frac{1}{p_0}$ ist. Der W. Q. erreicht also ein Maximum von πr_0^2 für $p_0 = \psi^2 / \alpha'(r_0)$, und fällt dann wie $1/p_0$ zu null ab.

Die Grössenordnung der Wirkungsquerschnitte erreicht die der gaskinetischen Querschnitte und übersteigt sie sogar.

Fig. 8 (Kurve a) gibt eine „Resonanzkurve“ für den Fall:

$$T_0 = 1 \text{ Volt, } W_{01}^I = \frac{(e a_0)^2}{r^3},$$

$M = 10 M_H$. (e = Elektronenladung, a_0 Bohr'scher Kreisbahnradius, M_H Masse von Atomgewicht 1).

*) An Stelle von 12 steht streng genommen $4 M_\lambda$.

§ 13. Der Wirkungsquerschnitt im Resonanzfall.

Die Ableitung der Grössen $|\eta_{1J}|$ erfolgte in den §§ 9 und 10 immer unter der Annahme, dass

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\psi(r) \cdot r}{p_0} = \infty$$

ist. Für $\psi_\infty = 0$ erhalten wir dementsprechend eine Reihe ver-

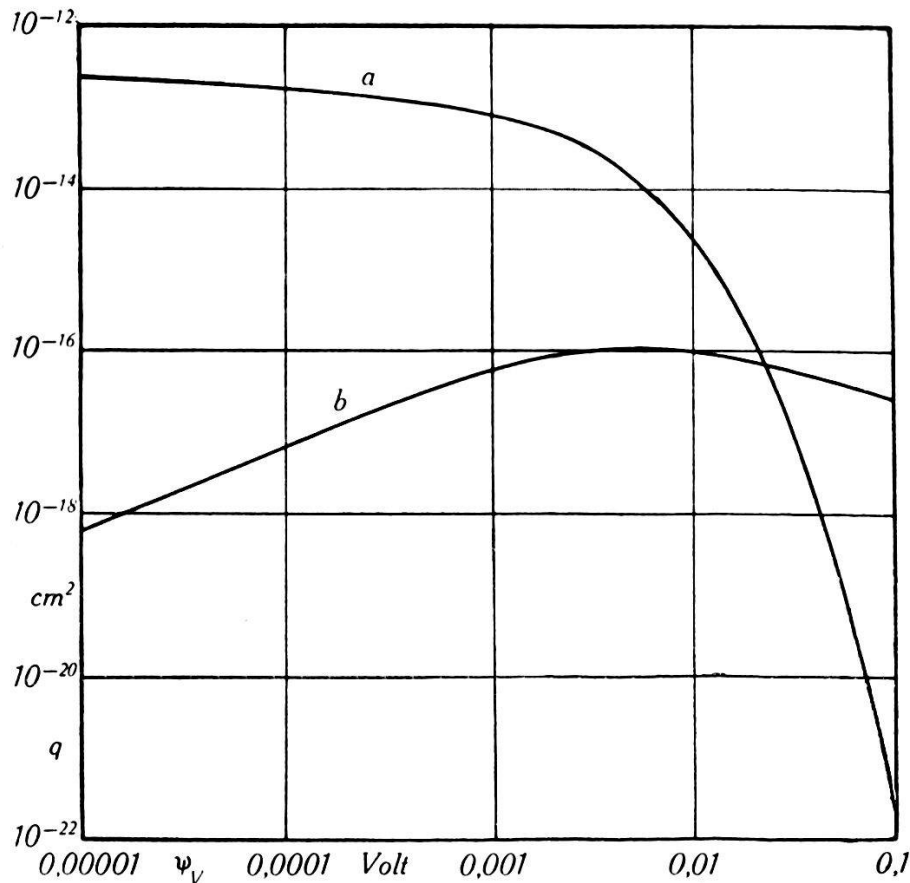


Fig. 8.

Wirkungsquerschnitte für Stösse zweiter Art zwischen Atomen in logarithmischer Skala: q in cm^2 gegen ψ_V in Volt. Kurve a ist berechnet für sich nicht überschneidende Potentialkurven (Fall I) mit der Wechselwirkung $WI = (ea)^2/r^3$. Kurve b für sich schneidende Potentialkurven mit $\psi'_V = \psi_V 10^{-8} \text{ Volt cm}^{-1}$ und mit der Wechselwirkungsenergie $WII = h^2 A J / 8 \pi^2 M r^2$ ($A = 1$). Die Relativgeschwindigkeit beträgt in beiden Fällen ein Elektron-Volt und die reduzierte Masse 10 mal die Masse vom Atomgewicht eins.

schiedener Fälle je nach dem Grenzwert, dem $\psi \cdot r/p_0$ zustrebt. Im vorhergehenden Paragraphen ist der Grenzfall $\psi \cdot R = \infty$ behandelt.

LONDON⁷⁾ betrachtet noch den Resonanzfall identischer Systeme: ψ identisch = 0. Dann zerfallen die gekoppelten Gleichungen (18a) in zwei ungekoppelte, wenn man die Funktionen

$u_0 + u_1$ und $u_0 - u_1$ einführt. Sein Resultat ist, wenn man die Phasenkonstanten β und γ (Gl. 27 § 9) benützt (da im Endlichen keine Überschneidung auftreten soll, ist dort $\int = \int$):

$$|\eta_{1J}|^2 = \frac{1}{4} \cdot \sin^2 (\beta + \gamma). \quad (41)$$

Diese Gleichung lässt sich auch allgemeiner beweisen. Wir verlangen nicht dass ψ identisch verschwinde, sondern nur dass

$$\lim_{r=\infty} \frac{\psi}{\alpha} = \lim_{r=\infty} t = 0$$

sei. Wir nehmen z. B. unsere Gleichung (22) als Lösung von (20), wo wir wissen, dass $c_{\pm} = c \cdot \exp (\mp i \frac{\pi}{4})$ und $d_{\pm} = d \exp (\mp i \frac{\pi}{4})$ ist. Die untere Grenze der v_i -Integrale sei $v_i = 0$ und die der t -Integrale $t = 0$. Für kleine $t = \frac{\psi}{\alpha}$ wird dann:

$$\begin{aligned} \lim_{r=\infty} u_0 &= v_0^{-\frac{1}{2}} \cdot c \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\psi}{\alpha} \dots\right) \cos \left(\int^r v_0 dr - \frac{\pi}{4}\right) \\ &+ v_1^{-\frac{1}{2}} \cdot d \cdot \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\psi}{\alpha} \dots\right) \cos \left(\int^r v_1 dr - \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned}$$

Aus der Gleichung (21) erhält man, da für

$$t = 0: \lim_{\alpha} \frac{\varphi_0 - v_0^2}{\alpha} = -1, \lim_{\alpha} \frac{\varphi_0 - v_1^2}{\alpha} = +1 \text{ ist:}$$

$$\begin{aligned} \lim_{r=\infty} u_1 &= -v_0^{-\frac{1}{2}} \cdot c \cdot (1 - \dots) \cos \left(\int^r v_0 dr - \frac{\pi}{4}\right) \\ &+ v_1^{-\frac{1}{2}} \cdot d \cdot (1 + \dots) \cos \left(\int^r v_1 dr - \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned}$$

Beobachtet man jetzt, dass $v_0 = v_1$ wird für $r = \infty$, und setzt

$$\tau = \int_{v_0=0}^{t=0} v_0 dr - \int_{v_1=0}^{t=0} v_1 dr,$$

so findet man durch Befriedigen der Grenzbedingungen (28 a, b):

$$|\eta_{1J}|^2 = \frac{1}{4} \sin^2 \tau.$$

Wenn ψ identisch 0 wird, so wird μ_0 identisch gleich μ_1 und nach Gl. (27) $\tau = \beta + \gamma$.

Im speziellen Fall $\psi \neq 0$ und $\alpha = \varepsilon/r^2$ erhält man für

$$|\eta_{1J}|^2 = \frac{1}{4} \sin^2 (\sqrt{J^2 + \varepsilon^2} - \sqrt{J^2 - \varepsilon^2}) \pi.$$

Für grosse J wird dies $= \frac{\pi^2}{4} \frac{\varepsilon}{J^2}$ (wie es auch die Matrizenauswertung gibt) so dass

$$q \propto \sum_J |\eta_{1J}|^2 \cdot J$$

nicht konvergiert. Im Falle $\lambda \geq 1$ konvergieren also die Wirkungsquerschnitte weder im *Grenzfall* (§ 12) noch im *Resonanzfall*. Dass der *Resonanzfall* $\psi R = 0$ sich ganz anders verhält als der *Grenzfall* $\psi R = \infty$ ist auch aus LONDON's Arbeit ersichtlich:

Seine Funktion ω (bei uns in § 7 mit g bezeichnet) macht beim Übergang von $\psi R = \infty$ nach $\psi R = 0$ einen Phasensprung.

Ausser zwischen identischen Systemen, wird unseres Erachtens, nur der Grenzfall für *kleine* ψ_∞ von Bedeutung sein, d. h. der im § 12 behandelte Fall

$$\lim_{\substack{R = \infty \\ \psi R = 0}} \psi R = \infty.$$

§ 14. Bestimmung des Wirkungsquerschnittes im Fall II (Überschneidungsfall).

Hier machen wir wie LANDAU⁸⁾ die Annahme, dass, wenn der Schnittpunkt bei imaginären ν liegt, die Übergangswahrscheinlichkeiten $|\eta_{1J}|^2$ verschwinden im Vergleich zu denen bei reellen. Für sehr kleine reelle Schnittpunktgeschwindigkeiten

$$\nu_J = \sqrt{p_m^2 - \frac{J^2}{r_0^2}} \simeq 0,$$

d. h. für $J \simeq p_m r_0 = J_m$ würden die Landau'schen $|\eta_{1J}|^2 \gg 1/4$. Unsere Methode (§ 9) gilt zwar für ganz kleine ν auch nicht mehr, aber sie gilt doch solange als

$$\frac{\alpha^2}{\psi' p_m} < \int_{r_0=0}^r \nu_0 dr < p_m \cdot (r_0 - r_{\nu_0=0}).$$

Jedoch geht unser $|\eta_{1J}|^2$ *nie* über 1/4 hinaus. Es ist also auf alle Fälle länger richtig als Landaus Formel. Führt man die Funktion

$$f_2(k) = \int_0^1 dz \cdot \left(e^{-k \frac{z}{1-z}} - e^{-2k \frac{z}{1-z}} \right)$$

ein, und setzt

$$z = \frac{J^2}{p_m^2 r_0^2} = \frac{J^2}{J_m^2},$$

so ist der W. Q., wegen (7), (10), (17) und (29):

$$q = \pi r_0^2 \cdot 2 \left(\frac{p_m}{p_0} \right)^2 \cdot f_2 \left(\pi \frac{A^2 p_m}{r_0^2 \psi'} \right); \quad q \cong 0 \text{ für } p_m^2 < 0. \quad (42)$$

Die Funktion f_2 ist für $k \ll 1$ gleich $4k/3$, erreicht für $k = 0,8$ ein breites Maximum im Werte von 0,164, und geht für grosse k wie $1/2 k$. Für kleine k geht (42) in den Landau'schen Ausdruck (Landau's Formel (27)) über: *Der maximale W. Q. im Falle II hat also die Grössenordnung von πr_0^2 , wo r_0 den Radius der Überschneidungsstelle bedeutet.*

Wollen wir eine „Resonanzkurve“ zeichnen um die Grössenverhältnisse der Fälle I und II vergleichen zu können, so setzen wir

$$r_0 = 10^{-8} \text{ cm}, \quad M = 10 M_H.$$

Für ψ' setzen wir $\psi_\infty \cdot 10^8$, da ja ψ_∞ meistens schon bei $r = 2$ bis 3 Atommessern (10^{-8} cm) erreicht sein dürfte. Dann kann man q aus Formel (42) mit den q aus (38) vergleichen. Dieser Vergleich ist in Fig. 6 durchgeführt.

Man sieht sofort, dass der Überschneidungsfall (42) *nicht* den Charakter eines „Resonanzvorganges“ hat, da der W. Q. für wachsende Resonanzschärfe nur wie $1/\psi$ abfällt. Die experimentellen Ergebnisse (eine Zusammenstellung findet sich bei KALLMANN und LONDON⁵), neuere Messungen liegen vor von ZEMANSKY¹⁴) zeigen aber deutlich Resonanzcharakter.

Was die Grössenordnung anbetrifft, so zeigt Fig. 8, dass, entgegen Landau's Auffassung, die W. Q. in der Nähe der Resonanz ohne Schnittpunkt meist grösser sind, als diejenigen mit Schnittpunkt. Die ersteren übersteigen sogar die gaskinetischen W.Q.*)

§ 15. Die Ionisation von Edelgasen durch Alkalionen.

Der Fall der Überschneidung hat aber noch eine andere Bedeutung. WEIZEL und BEECK⁴) erklären nämlich die Versuche von BEECK und MOUZON³) durch Überschneidung von Potentialkurven. Die experimentellen Ergebnisse sind kurz folgende:

Die Ionisation eines Edelgases durch Stoss positiver Ionen steigt bei einer Ionengeschwindigkeit, deren kinetische Energie

¹⁴) M. W. ZEMANSKY, Phys. Rev. **36**, 933 (1930).

*) Der W. Q. und Resonanzcharakter lässt sich im Fall II dem Fall I annähern, wenn man r_0 mit kleiner werdendem ψ_∞ entsprechend wachsen lässt.

erheblich über der Ionisationsenergie liegt, plötzlich stark an. Unterhalb dieser kinetischen Geschwindigkeit ist die beobachtete Ionisation von kleinerer Grössenordnung. Die gewöhnliche Ionisation durch Stoss schwerer Teilchen kann, wenigstens qualitativ, durch das Verfahren von MORSE und STUECKELBERG⁶⁾ (§ 4, Gleichung (36) und Fig. 3 der betreffenden Arbeit) dargestellt werden. (In dem dortigen Bild ist die Figur $\beta = 10$ zu wählen.) Von einem plötzlichen Einsatz kann dort nicht die Rede sein. Es muss sich aber hier um einen Stoss erster Art handeln, da die auftretenden langsamen Elektronen beobachtet werden.

WEIZEL und BEECK⁴⁾ erklären nun den Vorgang durch ein Überschneiden der Potentialkurven von $K^+ + A$ und $K^+ + A^+$. Allerdings erwähnten WEIZEL und BEECK nicht, dass es sich dabei um ein Überschneiden der Potentialkurve $K^+ + A$ und der, den verschiedenen reellen Geschwindigkeiten v des abgetrennten Elektrons im Unendlichen entsprechenden Schar von Potentialkurven $K^+ + A^+$ handelt. Für jede einzelne dieser unendlich nahe beieinander liegenden Kurven hat man aber einen andern Schnittpunkt und ein anderes Matrixelement.

Dieses Problem im Komplexen durchzuführen scheint hoffnungslos. Für die Näherungsmethode in (42) ($f_2(k) = \frac{4}{3}k$) hat man aber, wenn $\frac{dQ_v}{dv}$ die Anzahl von Elektronenzuständen per dv ist:

$$q = \int dq_v = \frac{8\pi^2}{3} \cdot \int_0^\infty \frac{p_m^3}{p_0^2} \cdot \frac{A_v^2}{\psi_r'} \cdot \frac{dQ_v}{dv} \cdot dv.$$

Wir wissen aber, dass $A_v^2 \frac{dQ}{dv}$ mit steigenden v schnell abnimmt (siehe MORSE und STUECKELBERG³⁾ p. 597), und für $v=0$ seinen Maximalwert hat¹⁵⁾. Wir ersetzen daher das Integral $A_v^2 \cdot \frac{dQ}{dv} \cdot dv$ durch eine mittlere Grösse A^2 . Das heisst mit anderen Worten wir ersetzen die unendliche Schar von Potentialkurven durch eine mittlere Kurve, welche sehr nahe bei der Kurve, für $v=0$ liegt.

Ohne auf die Diskussion, ob die Kurven sich schneiden einzugehen (darüber siehe (14)), wollen wir einmal annehmen, dass die Überschneidung eintritt. Dann haben wir, wenn V_0 und $r_{0,A}$, in Volt resp. Å gemessen, die Koordinaten der Überschneidungs-

¹⁵⁾ E. C. G. STUECKELBERG und P. M. MORSE, Phys. Rev. **36**, 16 (1930).

stelle*) sind und wenn ψ'_V in Volt per Å gemessen ist und V die Voltgeschwindigkeit der positiven Ionen bedeutet, statt (42),

$$q = 3,78 \times 10^{-17} \cdot \frac{A^2}{\psi'_V \cdot \sqrt{m}} \cdot \frac{(V - V_0)^{3/2}}{V} \cdot \frac{3}{4k} \cdot f_2(k) \quad (43)$$

$$k = 4,48 \times 10^{-2} \cdot \frac{A^2}{\psi'_V \cdot \sqrt{m}} \cdot \frac{1}{r_{0A}^2} \cdot (V - V_0)^{1/2}$$

$$m = M/10 M_H.$$

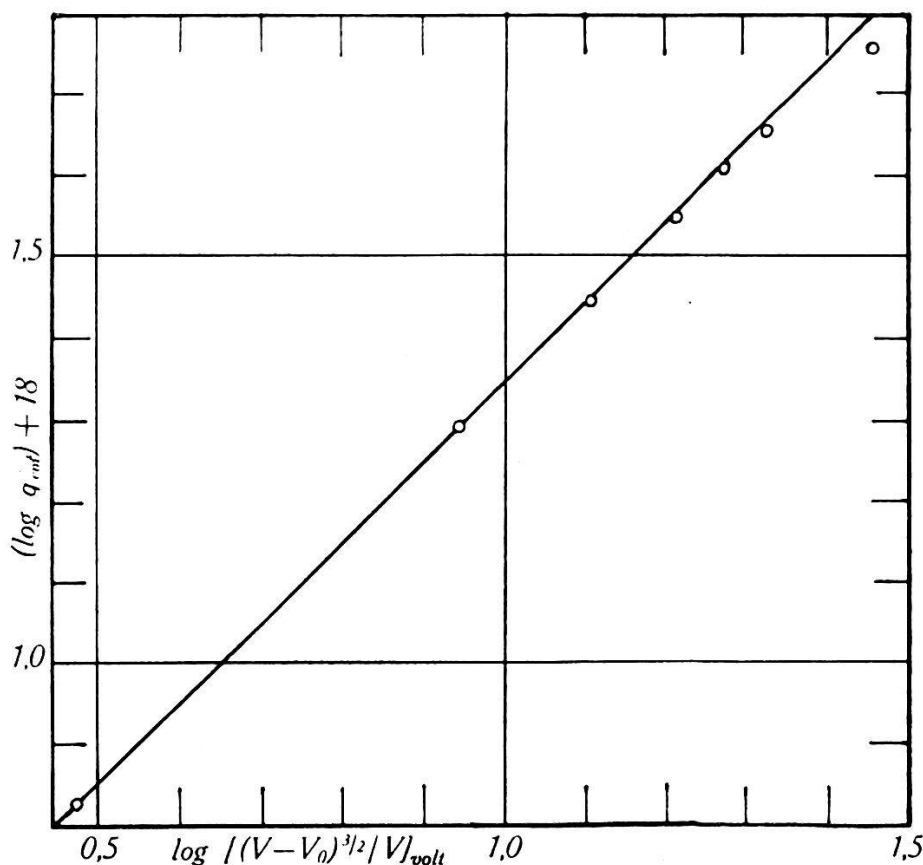


Fig. 9.

Wirkungsquerschnitt q für Ionisation von Argon durch Kalium-Ionen als Funktion von $(V - V_0)^{3/2}/V$ in cm^2 und $\sqrt{V}$ Volt logarithmisch aufgetragen. ($\psi'_V/A^2 = 23,8$ Volt/ cm^2). Die gerade Linie liegt unter 45° . Die eingetragenen Punkte sind die Messpunkte von Nordmeyer.

NORDMEYER³⁾ hat ebenfalls neuere Messungen an $K^+ + A \rightarrow K^+ + A^+$ angestellt, die die Resultate von BEECK und MOUZON³⁾ im Ganzen bestätigen, aber auf höhere Geschwindigkeiten ausdehnen (bis 1000 Volt). Seine Messpunkte sind in Fig. 9 mit Gleichung (43) logarithmisch verglichen. Für V_0 wurde ein solcher Wert gewählt, dass die ersten Punkte auf einer Geraden unter

*) Im Diagramm der Potentiellen Energiekurven (Fig. 1). V_0 ist dann $= E(r_0) - E(\infty)$ auf der Kurve A_0 , gemessen in Volt.

45° liegen (kleine k : $3 f_2(k)/4k = 1$). Da $M \simeq 40 \times 40/80 = 20$ ist, ist $m = 2$. Daraus bestimmt sich

$$V_0 = 55 \text{ Volt}; \quad \frac{A^2}{\psi_V'} = 0,42 \text{ Å Volt}^{-1}.$$

Die höheren Messpunkte geben die Abweichung von $3 f_2/4 k$ gegen 1 an. Für 1000 Volt entspricht diese Abweichung einem k -Werte von der Grössenordnung 0,02. Setzt man $\psi_V' = 16 \text{ Volt/1 Å}$, so bestimmt sich A^2 zu 0,67. Die grössenordnungsweise Bestimmung von k ergibt r_0 zu 1,5 Å.

Die Weizel-Beeck'sche Erklärung scheint also auch quantitativ richtige Ergebnisse zu liefern. Es wäre interessant die Versuche zu höheren Geschwindigkeiten auszudehnen, um das bei $k = 1$ liegende Maximum zu bestimmen. Wenn die Abschätzung von r_0 richtig ist so liegt dasselbe allerdings erst bei ca. 500000 Volt, sein Wert beträgt aber nur ungefähr das Doppelte von dem bei 1000 Volt.

§ 16. Zusammenfassung.

Ein dem W. K. B.²⁾ Verfahren entsprechende Anschlussmethode der Näherungsfunktionen zweier gekoppelter Differentialgleichungen wird ausgearbeitet.

Dieses Verfahren lässt sich auf Stösse zweiter Art zwischen Atomen anwenden. Es sind zwei Fälle zu unterscheiden. Im Fall I (§ 10) schneiden sich die für die elastische Bewegung verantwortlich zu machenden potentiellen Energiekurven in nullter Näherung nicht. In Fall II (§ 9) schneiden sie sich bei reellen Geschwindigkeiten. In gewissen Fällen darf das Anschlussverfahren durch das übliche Störungsverfahren ersetzt werden (§ 6 und § 11).

Zur Bestimmung der Wirkungsquerschnitte für Stösse zweiter Art angewendet zeigt sich, dass im Ganzen Fall I für diese Erscheinung verantwortlich zu machen ist (§ 14). Für Stösse zwischen positiven Ionen und Atomen hingegen dürfte der Fall II von Bedeutung sein (15).

Eine weitere Anwendungsmöglichkeit des beschriebenen Verfahrens bieten die Prädissoziation und eventuell die Vorgänge beim Zusammenstoss von α -Teilchen und Atomkernen.

Basel, Physikalische Anstalt der Universität.