

beträgt, ist ein Teil des beobachteten Mehrbetrags von  $0,3$  bis  $0,4 \cdot 10^{-4}$  bereits hierauf zurückzuführen.

Bei  $^{133}\text{Ba}$  war wegen der geringeren Ströme mit einer Standardabweichung von  $\pm 0,4 \cdot 10^{-3}$  zu rechnen, gefunden wurde hingegen  $\pm 1 \cdot 10^{-3}$ . Der Mehrbetrag von  $0,6 \cdot 10^{-3}$  lässt sich zum größten Teil auf Schwankungen der Eigenabsorption des Ra-Standards B zurückführen, der zwischen den einzelnen Messungen aus seiner Halterung entnommen wurde. Für die vorliegende Meßanordnung berechnet sich die Eigenabsorption des Standards zu 1 bis 1,5%, so daß Änderungen dieses Betrages um  $\pm 4$  bis 6%,

wie sie auch bei anderen Messungen an Ra-Präparaten mit loser Salzschüttung beobachtet werden, den gefundenen Mehrbetrag erklären. Ebenso wie die oben erwähnten Unsicherheiten der Dichte- und Zeitkorrektion gehen diese Schwankungen wegen ihrer statistischen Natur nur in den Fehler, nicht aber in das Ergebnis selbst ein.

Herrn Dr. U. SCHÖTZIG danken wir für seine Hilfe bei den Reinheitsuntersuchungen der verwendeten Präparate, Frau B. HÖHNE für ihre Mitarbeit bei der rechnerischen Auswertung. Besonderer Dank gebührt den Herren K. MATZAT und H. SCHWARZ für die sorgfältige Durchführung der langwierigen Messungen.

## Relaxation des $5^1P_1$ -Zustandes von Cadmium bei Stößen mit Edelgasatomen und Wasserstoffmolekülen \*

R. PEPPERL

I. Physikalisches Institut der Justus-Liebig-Universität Gießen

(Z. Naturforsch. 25 a, 927—936 [1970]; eingegangen am 4. April 1970)

The linewidth of the Hanle effect signal of the orientation and alignment of the resonance level  $5^1P_1$  of the cadmium isotope Cd $^{114}$  is measured as a function of the pressure of various noble gases, of hydrogen and deuterium. The cross sections for broadening of the orientation and alignment signals due to atomic collisions are derived from the pressure dependence of the linewidth. The multipole depolarization-cross sections were found to be

$$\begin{aligned}\sigma_D^{(1)} &= (141 \pm 12) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2, \\ \sigma_D^{(1)} &= (103 \pm 9) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2, \\ \sigma_D^{(1)} &= (281 \pm 24) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2, \\ \sigma_D^{(1)} &= (369 \pm 35) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2, \\ \sigma_D^{(1)} &= (547 \pm 49) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\sigma_D^{(2)} &= (109 \pm 10) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ for He,} \\ \sigma_D^{(2)} &= (88 \pm 9) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ for Ne,} \\ \sigma_D^{(2)} &= (231 \pm 20) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ for Ar,} \\ \sigma_D^{(2)} &= (302 \pm 26) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ for Kr,} \\ \sigma_D^{(2)} &= (412 \pm 39) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ for Xe.}\end{aligned}$$

In order to separate the depolarization effects from quenching effects in the case of hydrogen and deuterium polarization measurements of the resonance radiation were also undertaken. The alignment depolarization- and the quenching cross sections were found to be

$$\begin{aligned}\sigma_D^{(2)} &= (62 \pm 6) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2, \\ \sigma_D^{(2)} &= (79 \pm 8) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\sigma^{(0)} &= (24 \pm 3) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ for H}_2, \\ \sigma^{(0)} &= (47 \pm 5) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ for D}_2.\end{aligned}$$

### I. Einleitung

Stoßprozesse zwischen angeregten Atomen (Systematomen) und Atomen im Grundzustand (Badatomen) erzeugen eine Verbreiterung, Verschiebung und asymmetrische Form der Spektralverteilung, sowie eine Depolarisation der emittierten Fluoreszenzstrahlung<sup>1, 2</sup>. Im folgenden wird der Einfluß von zwei Stoßwirkungen, nämlich der *Fluoreszenzlösung* und der *Depolarisation*, auf die Breite der

entarteten magnetischen Zeeman-Niveaus des angeregten Zustandes der Systematome betrachtet. Der Wirkungsquerschnitt für die Fluoreszenzlösung charakterisiert die Abnahme der Gesamtbesetzung, der Wirkungsquerschnitt für die Depolarisation die Umbesetzung der magnetischen Unterniveaus des angeregten Zustandes der Systematome. Die Besetzung der magnetischen Unterniveaus wird durch den linearen bzw. zirkularen Polarisationsgrad der Fluoreszenzstrahlung gemessen. Der zirkulare Polarisations-

\* Auszug aus D 26.

Sonderdruckanforderungen an Dr. R. PEPPERL, I. Physikalisches Institut der Universität Gießen, D-6300 Gießen, Leihgesterner Weg 104—108.

<sup>1</sup> V. N. REBANE, Opt. Spectr. USSR **26**, 371 [1969].

<sup>2</sup> P. R. BERMAN u. W. E. LAMB JR., Phys. Rev. **187**, 221 [1969].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

grad ist eine Meßgröße für die *Orientierung* (magnetisches Dipolmoment), der lineare Polarisationsgrad für die *Ausrichtung* (elektrisches Quadrupolmoment) des angeregten Zustandes. Für die Depolarisation der Orientierung und der Ausrichtung ergeben sich wegen ihrer unterschiedlichen Symmetrie verschiedene Wirkungsquerschnitte.

Die Relaxation der Multipole angeregter Atomzustände durch Stöße mit Atomen im Grundzustand wurde theoretisch bereits ausführlich behandelt, wobei eine Dipol-Dipol-Wechselwirkung zwischen den neutralen Atomen zugrunde gelegt wurde<sup>3-6</sup>. Es liegen auch experimentelle Daten dazu vor, insbesondere über die Beeinflussung des Triplettzustandes [Interkombinationslinie  $(6s6p)^3P_1 - (6s^2)^1S_0$ ] des Quecksilbers bei Stößen mit verschiedenen Quecksilberisopen (Resonanzwechselwirkung, Dipol-Dipol-Wechselwirkungspotential in der 1. Ordnung der störungstheoretischen Behandlung) und mit Edelgasatomen und anderen Fremdgasatomen (Van der Waals-Wechselwirkung, Dipol-Dipol-Wechselwirkungspotential in der 2. Ordnung der störungstheoretischen Behandlung)<sup>7,8</sup>.

Diese Arbeit befaßt sich mit der *Multipolrelaxation des Singulettzustandes* [Resonanzlinie  $(5s5p)^1P_1 - (5s^2)^1S_0$ ] des Cadmiumisotops Cd<sup>114</sup> bei Stößen mit Edelgasen und leichtem und schwerem Wasserstoff. Das Cadmiumisotop Cd<sup>114</sup> hat den Kernspin Null. Der  $(5s5p)^1P_1$ -Zustand spaltet daher im Magnetfeld in ein normales Zeeman-Triplett auf.

Als Meßmethode wird bei den Stößen mit Edelgasatomen und mit Molekülen des leichten und schweren Wasserstoffs der HANLE-Effekt<sup>9</sup>, bei den letzteren noch eine Methode nach STERN-VOLMER<sup>7</sup> angewandt.

## II. Messungen

### 1. Meßmethode

Beim Hanle-Effekt und bei der Stern-Volmer-Methode wird die Depolarisation der Fluoreszenzstrahlung durch ein äußeres Magnetfeld bzw. durch Stöße mit Fremdgasatomen zur Messung der Relaxationszeit des angeregten Zustandes verwendet. Der An-

regungszustand der Gesamtheit der Systematome wird am besten durch eine Dichtematrix  $\varrho$  beschrieben<sup>10</sup>. Bei Anregung mit polarisiertem Licht mit dem Polarisationsvektor  $\mathbf{e}_a$  ergeben sich die Dichtematrixelemente in der  $J, m$ -Darstellung aus den Dipolmatrixelementen  $\langle J, m | \mathbf{d} \mathbf{e}_a | G \mu \rangle$  für den Übergang aus dem Grundzustand  $|G \mu\rangle$  in den angeregten Zustand  $|J m\rangle$

$$\begin{aligned} \langle J m | \varrho | J m' \rangle &= \sum_{\mu} \langle J m | \mathbf{d} \mathbf{e}_a | G \mu \rangle \langle G \mu | (\mathbf{d} \mathbf{e}_a)^\dagger | J m' \rangle. \end{aligned}$$

Die Dichtematrix  $\varrho$  läßt sich nach Komponenten irreduzibler, sphärischer Tensoroperatoren  $T_q^k$  entwickeln<sup>11</sup>

$$\begin{aligned} \varrho &= \sum_{k=0}^{2J} \sum_{q=-k}^k \varrho_q^k T_q^k, \\ \langle J m | T_q^k | J m' \rangle &= (-1)^{J-m} \langle J m, J-m' | k q \rangle. \end{aligned}$$

$\langle J m, J-m' | k q \rangle$  ist ein Clebsch-Gordan-Koeffizient. Die Ordnung  $k$  der Tensoroperatoren läuft von 0 bis  $2J$ , wobei  $J$  die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses des angeregten Zustandes bedeutet; der Index  $q$  läuft von  $-k$  bis  $k$ .

Die Entwicklung der Dichtematrix nach sphärischen Tensoroperatoren ist wegen der sphärischen Symmetrie des Stoßproblems bei thermischen Stößen besonders angebracht. Die Komponenten der Dichtematrix in dieser Entwicklung haben eine einfache physikalische Bedeutung:  $\varrho_0^0$  ist der *Gesamtbesetzung*,  $\varrho_{1,0,-1}^1$  sind den *Komponenten des magnetischen Dipolmomentes*,  $\varrho_{2,1,0,-1,-2}^2$  den *Komponenten des elektrischen Quadrupolmomentes* des angeregten Zustandes proportional.

Für das zeitliche Verhalten der Multipolkomponenten  $\varrho_q^k$  des angeregten Atomzustandes läßt sich eine einfache Relaxationsgleichung aufstellen:

$$\frac{d\varrho_q^k}{dt} = \left( \frac{d\varrho_{\text{Anregung}}}{dt} \right)_q^k - \Gamma_0 (1 - \alpha^{(k)} x) \varrho_q^k + i q \omega_L \varrho_q^k - \gamma^{(k)} \varrho_q^k. \quad (1)$$

Der erste Term beschreibt den Anregungsprozeß, der zweite die spontane Emission und die kohärente

<sup>3</sup> A. OMONT, J. Phys. Paris **26**, 26 [1965].

<sup>4</sup> A. BEN-REUVEN, Phys. Rev. **141**, 34 [1966].

<sup>5</sup> W. HAPPER u. E. B. SALOMAN, Phys. Rev. Lett. **15**, 441 [1965].

<sup>6</sup> C. H. WANG u. W. J. TOMLINSON, Phys. Rev. **181**, 115 [1969].

<sup>7</sup> J. P. BARRAT, D. CASALTA, J. L. COJAN u. J. HAMEL, J. Phys. Paris **27**, 608 [1966].

<sup>8</sup> Zusammenstellung von Experimenten zur Lösung und Depolarisation der Resonanzfluoreszenz, in: R. SEIWERT, Ergebn. Exakt. Naturw. **47**, 143 [1968].

<sup>9</sup> W. HANLE, Z. Phys. **30**, 93 [1924]; Ergebn. Exakt. Naturw. **4**, 214 [1925].

<sup>10</sup> C. COHEN-TANNoudji, Thèse, Paris 1962.

<sup>11</sup> U. FANO u. G. RACAH, Irreducible Tensorial Sets, Academic Press Inc., New York 1962.

Vielfachstreuung<sup>12</sup> ( $\Gamma_0$  natürliche Linienbreite des angeregten Zustandes,  $x$  Absorptionswahrscheinlichkeit für die Photonen des Fluoreszenzlichtes,  $\alpha^{(k)}$  Geometriefaktor) und der dritte die Präzession der Multipolmomente im äußeren Magnetfeld ( $\omega_L/2\pi$  Larmor-Frequenz). Der vierte Term beschreibt den Stoßprozeß. OMONT<sup>3</sup>, BEN-REUVEN<sup>4</sup> und WANG und TOMLINSON<sup>6</sup> haben gezeigt, daß bei sphärisch symmetrischen Stoßproblemen die Relaxationsrate  $\gamma^{(k)}$  nur von der Ordnung  $k$  der Multipolkomponente, nicht aber von deren Komponentenindex  $q$  abhängt.  $\gamma^{(0)}$  ist die Löschraten;  $\gamma_D^{(k)}$  ( $k \neq 0$ ) enthält neben der Stoßrate  $\gamma_D^{(k)}$  für die Depolarisation des Multipols der Ordnung  $k$  die Löschraten  $\gamma^{(0)}$ :

$$\gamma^{(k)} = \gamma_D^{(k)} + \gamma^{(0)}.$$

Aus der Druckabhängigkeit der Relaxationsraten ergeben sich die Wirkungsquerschnitte der verschiedenen Stoßwirkungen:

$$\begin{aligned}\gamma^{(0)} &= n_B \langle v_r \rangle \sigma^{(0)}, \\ \gamma_D^{(k)} &= n_B \langle v_r \rangle \sigma_D^{(k)};\end{aligned}$$

$n_B$  ist die Dichte der Badatome,  $\langle v_r \rangle$  die mittlere thermische Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner.

Im stationären Fall,  $dQ/dt = 0$ , liefert die Diff.-Gl. (1) für die Multipolkomponenten der Dichtematrix des angeregten Zustandes der Gesamtheit der Systematome:

$$\varrho_q^k(\mathbf{e}_a) = \frac{(dQ_{\text{Anregung}}/dt)_q^k}{\Gamma^{(k)} + \gamma^{(k)} - i q \omega_L}$$

mit  $\Gamma^{(k)} = \Gamma_0 (1 - \alpha^{(k)} x)$ .

Daraus berechnet sich die Intensität  $I$  des Fluoreszenzlichtes mit Hilfe der „Polarisationen der Beobachtung“<sup>13</sup>  $\Phi_q^k$ , die eine Linearkombination aus den Dipolmatrixelementen des Fluoreszenzüberganges sind.

$$\begin{aligned}\Phi_q^k(\mathbf{e}_b) &= \sum_{m, m'} (J m, J - m' | k q) (-1)^{J-m'} \\ &\quad \langle G \mu | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_b | J m \rangle \langle J m' | (\mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_b)^\dagger | G \mu \rangle, \\ I(H, \mathbf{e}_a, \mathbf{e}_b) &= C' \sum_{k q} \varrho_q^k(H, \mathbf{e}_a) \Phi_q^k(\mathbf{e}_b).\end{aligned}\quad (2)$$

$C'$  ist eine Proportionalitätskonstante, die von der Frequenz des Fluoreszenzüberganges abhängt. Die Gl. (2) ist eine Verallgemeinerung der Breit-Formel.

Je nach der Polarisatorstellung in der Anregungs- und Beobachtungsrichtung wird die Fluoreszenzintensität (2) als Funktion des äußeren Magnetfeldes durch eine Lorentz- oder eine Dispersionskurve

oder eine Linearkombination aus beiden Kurventypen wiedergegeben.

### a) Hanle-Effekt-Methode

Die Abbildungen 1 a – c zeigen das Schema der Anregung und Beobachtung, das in den Hanle-Effekt-Experimenten benutzt wurde. In Abb. 1 a wird mit

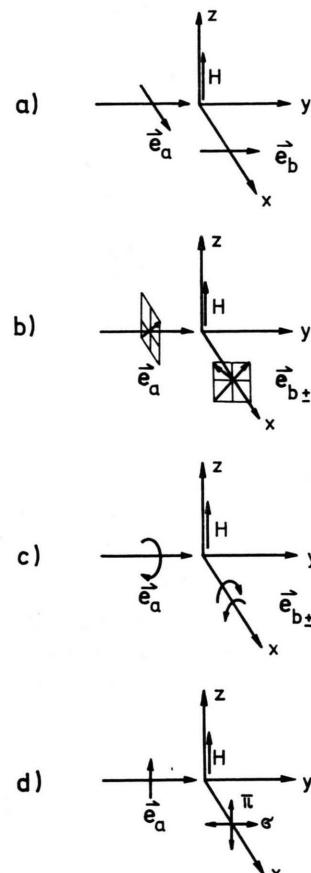


Abb. 1. Schema der Anregung und Beobachtung.

linear polarisiertem Licht senkrecht zum Magnetfeld ( $\sigma^+$ - $\sigma^-$ -Anregung) angeregt. Senkrecht zur Einstrahl- und Magnetfeldrichtung wird mit einem Polarisator die Intensität der Fluoreszenzstrahlung beobachtet. Aus (2) ergibt sich folgender Intensitätsverlauf als Funktion der Zeeman-Aufspaltung  $\omega_L$ :

$$\begin{aligned}I(H) = C' \left[ \frac{1}{3(\Gamma^{(0)} + \gamma^{(0)})} + \frac{1}{6(\Gamma^{(2)} + \gamma^{(2)})} \right. \\ \left. + \frac{\frac{1}{2}(\Gamma^{(2)} + \gamma^{(2)})}{(\Gamma^{(2)} + \gamma^{(2)})^2 + (2\omega_L)^2} \right].\end{aligned}\quad (3)$$

<sup>13</sup> O. NEDELEC, Thèses, Grenoble 1966.

In Abb. 1 b wird mit linearpolarisierter Licht, dessen Polarisationsvektor unter  $45^\circ$  gegen die Magnetfeldrichtung steht, senkrecht zum Magnetfeld eingeschossen ( $\pi + \sigma^+ + \sigma^-$ -Anregung). Beobachtet wird die Resonanzfluoreszenzstrahlung senkrecht zur Einstrahl- und Magnetfeldrichtung mit einem Polarisorator, dessen Durchlaßrichtung unter  $45^\circ$  bzw.  $-45^\circ$  gegen die Magnetfeldrichtung steht. Für die Differenz der Fluoreszenzlichtintensitäten  $I(45^\circ) - I(-45^\circ)$  ergibt sich als Funktion von  $\omega_L$  folgende Dispersionskurve:

$$D(H) = I(45^\circ) - I(-45^\circ) = C' \frac{\omega_L}{(\Gamma^{(2)} + \gamma^{(2)})^2 + \omega_L^2}. \quad (4)$$

In Abb. 1 c wird mit zirkularpolarisiertem Licht senkrecht zum Magnetfeld angeregt. Senkrecht zur Einstrahl- und Magnetfeldrichtung wird die Differenz aus den Intensitäten des rechts- und links-zirkularpolarisierten Fluoreszenzlichtes gemessen. Aus (2) erhält man dafür als Funktion von  $\omega_L$ :

$$C(H) = I_{\sigma^+} - I_{\sigma^-} = C' \frac{\omega_L}{(\Gamma^{(1)} + \gamma^{(1)})^2 + \omega_L^2}. \quad (5)$$

Aus der Halbwertsbreite des Signales (3) bzw. aus dem Abstand des Extremums der Signale (4), (5) vom Nullpunkt ergibt sich die Summe

$$\Gamma^{(k)} + \gamma_D^{(k)} + \gamma^{(0)}.$$

Die Druckabhängigkeit der Signalbreiten liefert den Gesamtwirkungsquerschnitt für die Fremdgasstöße

$$\sigma^{(0)} + \sigma_D^{(k)} = \frac{\gamma^{(k)}}{n_B \langle v_r \rangle} = \frac{(\Delta H / \Delta p) \Gamma_0 V \pi R T}{\Delta H_0 N_0 V 8 (1/M_A + 1/M_B)}. \quad (6)$$

$\Delta H / \Delta p$  ist die Änderung pro Druckeinheit der Signalbreite in Magnetfeldeinheiten,  $\Delta H_0$  ist die Signalbreite, die der natürlichen Linienbreite  $\Gamma_0$  entspricht,  $N_0$  die Loschmidt-Zahl,  $R$  die allgemeine Gaskonstante,  $T$  die absolute Temperatur und  $M_A, M_B$  die Massen der beiden Stoßpartner.

### b) Stern-Volmer-Methode

In den Anordnungen nach Abb. 1 a – c fällt die Quantisierungssachse der Anregung nicht mit der Quantisierungssachse des atomaren Systems zusammen, so daß magnetfeldabhängige Interferenzterme in (2) mit  $q \neq 0$  auftreten. Bei einer reinen Anregung, bei der die Quantisierungssachse der Anregung mit der Quantisierungssachse des atomaren Systems identisch ist, wie z. B. bei linearpolarisierter Anregung in Abb. 1 d, hat die Dichtematrix (1) nur

Komponenten  $\varrho_0^k$  mit  $q = 0$ , die von Null verschieden sind. Die Fluoreszenzintensität ist daher unabhängig vom äußeren Magnetfeld und hängt nur vom Fremdgasdruck ab. Für den linearen Polarisationsgrad als Funktion des Fremdgasdruckes ergibt sich dann aus (2):

$$P = \frac{I_\pi - I_\sigma}{I_\pi + I_\sigma} = \frac{\Gamma_0 (1-x) + \gamma^{(0)}}{\Gamma_0 (1 - \frac{4}{5}x) + \frac{2}{3} \gamma_D^{(2)} + \gamma^{(0)}}. \quad **$$

Zu einer genauen Auswertung dieser Formel gelangt man, wenn man den Polarisationsgrad der Resonanzfluoreszenzstrahlung  $P_0$  für den Fall ohne Fremdgas mit in die Rechnung einbezieht<sup>7</sup>:

$$\begin{aligned} Y^{-1} &:= \left[ \frac{3(P_0 - P)}{(3-P_0)P} - \frac{0,3x}{1-x} \right]^{-1} \\ &= \frac{(1-x) \Gamma_0}{\sigma_D^{(2)} - 0,3x \sigma^{(0)} / (1-x)} \cdot \frac{1}{n_B \langle v_r \rangle} \\ &\quad + \frac{\sigma^{(0)}}{\sigma_D^{(2)} - 0,3x \sigma^{(0)} / (1-x)}. \end{aligned} \quad (7)$$

Aus dem  $[Y^{-1}, n_B^{-1}]$ -Diagramm lassen sich die Wirkungsquerschnitte  $\sigma_D^{(2)}$  und  $\sigma^{(0)}$  getrennt bestimmen. Diese Meßmethode wurde bei den Stößen mit Wasserstoffmolekülen zusätzlich angewandt, da diese Stöße im Gegensatz zu den Edelgasstößen neben der Depolarisation eine starke Fluoreszenzlösung zeigten.

### 2. Apparatur

Abbildung 2 zeigt den Aufbau der gesamten Apparatur.

**Resonanzzelle:** Die Resonanzzelle bestand aus einem Zylinder ( $\phi 4$  cm,  $l = 3$  cm) aus Herasil, auf dem an drei Seiten ein Planfenster aus Suprasil aufgesetzt war. Das Reservoir für das Cadmiumisotop befand sich in einem angesetzten Rohr von 10 cm Länge. Die Reinheit des Cadmiumisotops 114 wurde vom Oak Ridge National Laboratory mit 99,04% angegeben. Die Resonanzzelle war mit einem Vakuumsystem und dem Fremdgasreservoir verbunden. Sie wurde mit einem Stopfen NS 14,5 abgeschlossen. Das Öffnen und Schließen des Stopfens erfolgte mittels eines kleinen Magneten, der genügend weit von der Resonanzzelle entfernt war, um störende Magnetfelder zu vermeiden. Die Resonanzzelle wurde bis auf einen Restdruck von  $5 \cdot 10^{-5}$  Torr evakuiert. Als Fremdgase wurden spektroskopisch reine Edelgase (Linde, 99,9999 Proz.) und leichter Wasserstoff (99,9%) sowie Deuterium (99%) verwendet. Der Fremdgasdruck (Druckbereich 1 – 20 Torr) wurde mit einem Ölmanometer (14,2 mm Öl  $\triangleq$  1 Torr) gemessen. Die Resonanzzelle

\*\* Diese Formel gilt speziell für einen Übergang  $J=1 \rightarrow J=0$ . Die Werte für  $\alpha^{(k)}$  für einen derartigen Übergang sind:  $\alpha^{(0)} = 1$ ,  $\alpha^{(1)} = 1/2$ ,  $\alpha^{(2)} = 7/10$ .

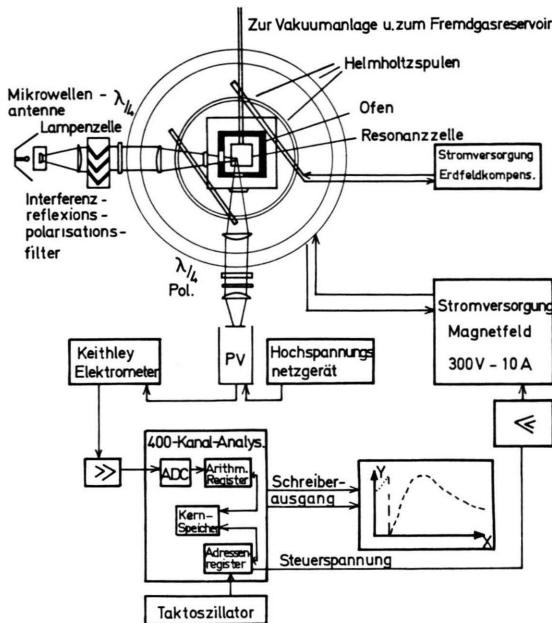


Abb. 2. Versuchsanordnung.

befand sich in einem Ofen, dessen Heizleitung aus Koaxial-Heizdraht (Philips) bestand, das Cadmiumreservoir wurde mit einem Umlaufthermostaten auf  $0,1\text{ }^\circ\text{C}$  konstant gehalten.

**Optik:** Es wurden durchweg plankonvexe Suprasillinsen mit einem Durchmesser von 40 mm und einer Brennweite von 30 cm für die Abbildung auf die Resonanzzelle bzw. von 15 cm für die Abbildung auf die Lampe und die Photokathode des Photosekundär-elektronenvervielfachers (EMI 6256 Q) verwendet. Aus der Lampenstrahlung wurde die Cadmiumresonanzlinie 2288 Å mit einem Reflexionsinterferenzfilter (Schott, U-V-R 250) herausgefiltert. Das Filter hatte bei dieser Wellenlänge eine Durchlässigkeit von 30%. Die Interkombinationslinie wurde so stark abgeschwächt, daß sie nicht meßbar war. Durch die vier Reflexionen unter  $45^\circ$  an den Interferenzplatten ist die Strahlung der Wellenlänge 2288 Å zu über 95% polarisiert. In der Einstrahlrichtung konnte daher auf einen zusätzlichen Linearpolarisator verzichtet werden. In der Beobachtungsrichtung wurde der UV-Polarisator PL 40 von Polacoat (Polarisationsgrad  $> 90\%$ ) verwendet. Als Viertelwellenlängenplatte wurde ein Differenzanordnung, die aus zwei Platten rechts- bzw. linksdrehenden Quarzes bestand, verwendet. Der zirkulare Polarisationsgrad betrug ( $90 \pm 4\%$ ).

Als Lichtquelle diente eine Suprasilzelle, die mit natürlichem Cadmium und 4 Torr Argon gefüllt war und sich im Strahlungsfeld einer Dipolantenne eines Mikrowellengenerators (Raytheon 2,4 GHz, 100 W) befand.

**Verarbeitung des Fluoreszenzsignals:** Der Strom des Photomultipliers wurde mit dem Keithley 417 gemessen. Die Ströme, die von einem Unter-

grundsignal (Dunkelstrom, Streulicht) herrühren, können mit dem Keithley 417 kompensiert werden, so daß der reine Signalstrom weiter verstärkt wird. Der Schreiberausgang des Strommeßinstrumentes wurde auf den Gleichspannungseingang eines Vielkanalanalysators (Intertechnique SA 40 B) gegeben. Der Vielkanalanalytator wurde als Enhancetron betrieben. Die Signale werden als Funktion des äußeren Magnetfeldes im Kernspeicher des Vielkanalanalysators abgespeichert. Eine bestimmte Kernspeicheradresse entspricht dabei einem festen Magnetfeldwert. Das Magnetfeldversorgungsgerät wird durch eine Referenzspannung, die von der Kernspeicheradresse abgeleitet wird, gesteuert. Das Signal kann mit positivem und negativem Vorzeichen in den Kernspeicher gelesen werden, so daß man durch aufeinanderfolgende Signalaufzeichnung Linearkombinationen der Meßsignale im Kernspeicher erhält. Durch Addition der Signale (3) als Funktion von H bzw.  $-H$  werden aus der Lorentz-Kurve störende Dispersionsanteile, durch Subtraktion der Signale (4) bzw. (5) als Funktion von H bzw.  $-H$  werden aus der Dispersionskurve störende Lorentz-Anteile eliminiert<sup>14</sup>. Die störenden Dispersions- bzw. Lorentz-Anteile des Fluoreszenzsignals ergeben sich aus den Ungenauigkeiten des geometrischen Aufbaus der Apparatur.

### 3. Messung der Linienbreiten der Hanle-Effekt-Signale

Zuerst wurde die Lebensdauer des  $5^1P_1$ -Zustandes des Cd $^{14}$  mit den experimentellen Anordnungen nach dem Schema der Abb. 1 a – c bestimmt. Es wurde der Wert

$$\tau = 1,65 \pm 0,08 \text{ nsec}$$

gefunden. Dieser Wert stimmt mit dem von LURIO et al.<sup>15</sup> gemessenen überein. Der g-Faktor für den  $5^1P_1$ -Zustand wurde 1 gesetzt. Diese Messungen wurden bei einer Teichendichte von  $1,3 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$  ( $t = 85\text{ }^\circ\text{C}$ ) durchgeführt. Die Messungen der Stoßverbreiterung der Hanle-Effekt-Signale wurden bei einer Teichendichte von  $2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$  ( $t = 91\text{ }^\circ\text{C}$ ) durchgeführt. Die bei dieser Dampfdichte auftretende geringe Kohärenzverschärfung hat keinen Einfluß auf die Stoßverbreiterung durch Fremdgase<sup>16</sup>.

Die Abb. 3 – 5 zeigen die Druckabhängigkeit der Halbwertsbreiten der Hanle-Effekt-Signale für die Komponenten der Orientierung  $\varrho_{\pm 1}^1$  und die der Ausrichtung  $\varrho_{\pm 1}^2$  bzw.  $\varrho_{\pm 2}^2$  des Cadmium- $5^1P_1$ -Zustandes für die Edelgase Helium, Neon, Argon, Krypton und Xenon, sowie für leichten und schweren Wasserstoff.

<sup>14</sup> D. LECLER, J. Phys. Paris **29**, 611, 739 [1968].

<sup>15</sup> A. LURIO u. R. NOVICK, Phys. Rev. **134 A**, 608 [1964].

<sup>16</sup> C. A. PIKETTY-RIVES, F. GROSSETÈTE u. J. BROSSEL, C. R. Acad. Sci. Paris **258**, 1189 [1964].

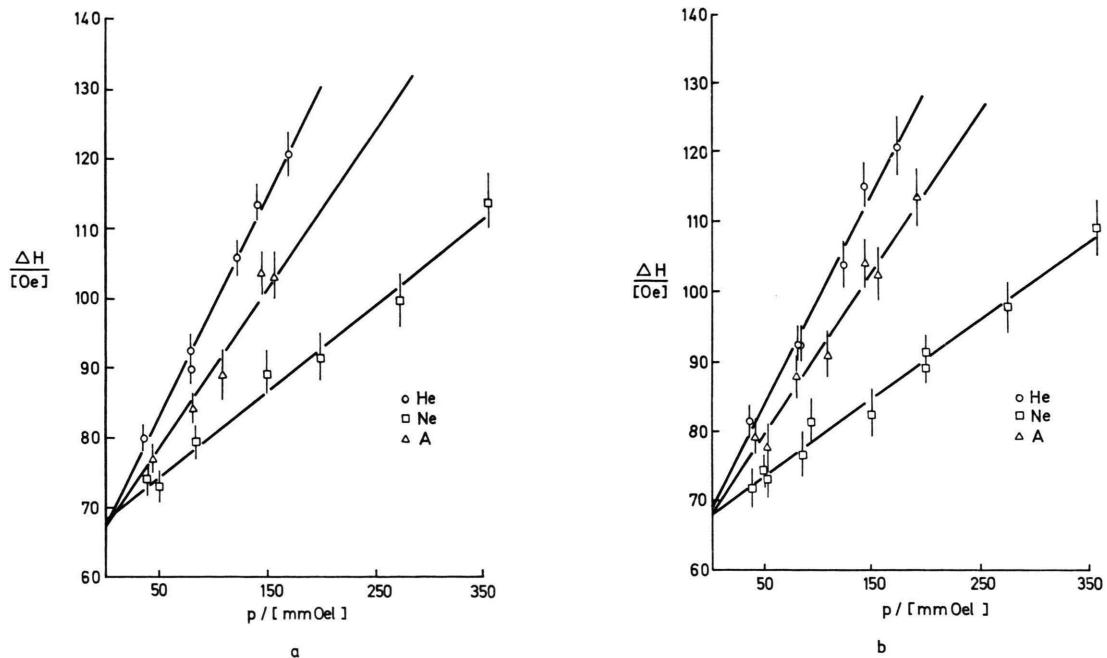


Abb. 3. Druckabhängigkeit der Halbwertsbreiten der Nullfeld-Levelcrossing-Signale; a) für die Komponenten der Ausrichtung  $\varrho_{\pm 2}^2$ , b) für die Komponenten der Ausrichtung  $\varrho_{\pm 1}^2$ , c) für die Komponenten der Orientierung  $\varrho_{\pm 1}^1$  des  $5^1P_1$ -Zustandes von  $Cd^{114}$  für Helium, Neon und Argon.

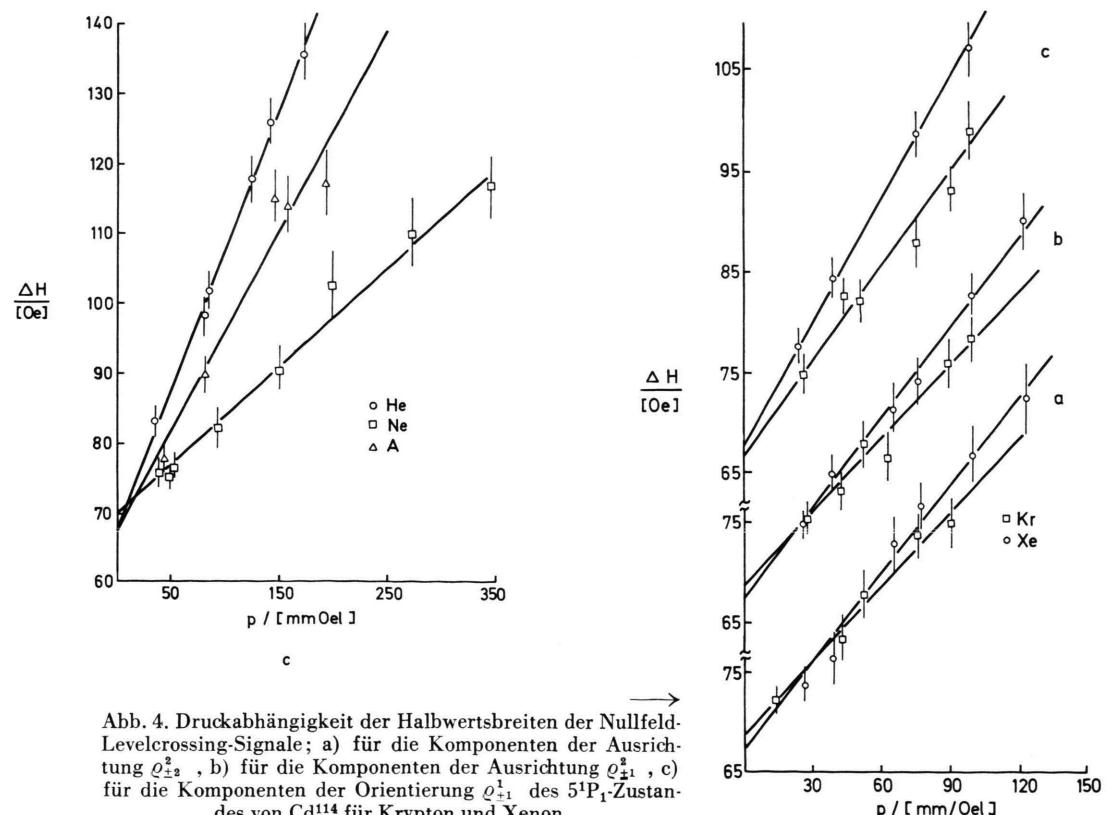


Abb. 4. Druckabhängigkeit der Halbwertsbreiten der Nullfeld-Levelcrossing-Signale; a) für die Komponenten der Ausrichtung  $\varrho_{\pm 2}^2$ , b) für die Komponenten der Ausrichtung  $\varrho_{\pm 1}^2$ , c) für die Komponenten der Orientierung  $\varrho_{\pm 1}^1$  des  $5^1P_1$ -Zustandes von  $Cd^{114}$  für Krypton und Xenon.

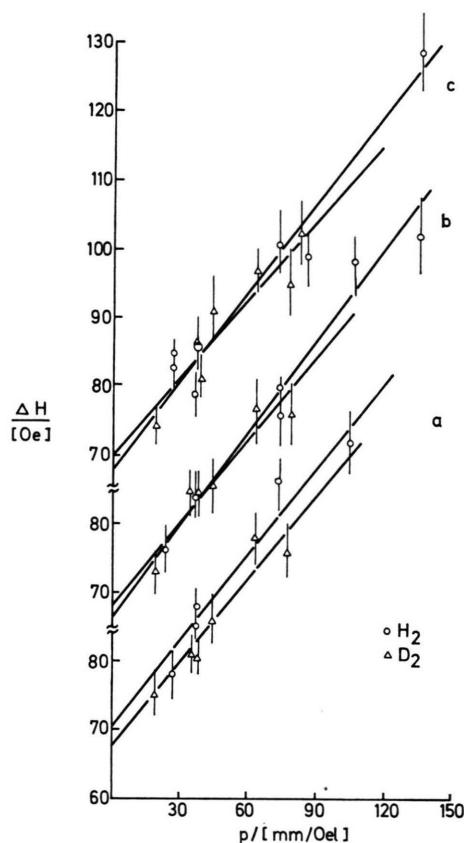


Abb. 5. Druckabhängigkeit der Halbwertsbreiten der Nullfeld-Levelcrossing-Signale; a) für die Komponenten der Ausrichtung  $\varphi_{\pm 2}^2$ , b) für die Komponenten der Ausrichtung  $\varphi_{\pm 1}^2$ , c) für die Komponenten der Orientierung  $\varphi_{\pm 1}^1$  des  $5^1P_1$ -Zustandes von Cd<sup>114</sup> für Wasserstoff (H<sub>2</sub>) und Deuterium (D<sub>2</sub>).

#### 4. Die Polarisationsgradmessungen als Funktion des Wasserstoffdruckes

Die Polarisationsgradmessungen wurden bei einer Cd-Reservoirtemperatur von  $t = 95^\circ\text{C}$  durchgeführt. Ohne Fremdgas in der Resonanzzelle wurde aus der Breite der Hanle-Effekt-Signale die Photoneneinfangwahrscheinlichkeit  $x$  zu 0,04 bestimmt. Der Polarisationsgrad der Resonanzfluoreszenz  $P_0$  betrug 77%.

In Abb. 6 ist  $Y^{-1}$  (7) als Funktion von  $1/p$  für Wasserstoff und Deuterium aufgetragen. Die Geraden durch die Meßpunkte gehen nicht durch den Nullpunkt des  $[Y^{-1}, p^{-1}]$ -Diagrammes, was auf die fluoreszenzlöschen Stöße hinweist.

### III. Meßergebnisse

Die Tabelle 1 enthält die gemessenen Werte (Abb. 3 – 5) für die Depolarisationsquerschnitte der Orientierung und der Ausrichtung für die Edelgastöße und die nach der Theorie von BYRON und FOLEY<sup>17</sup> berechneten Desorientierungsquerschnitte. Daneben sind von REBANE<sup>1</sup> berechnete Depolarisationsquerschnitte für die Ausrichtung des  $5^1P_1$ -Zustandes von Cadmium angegeben. Zum Vergleich sind Depolarisationsquerschnitte der Ausrichtung des Cadmium- $5^1P_1$ -Zustandes, die von SAUSSERAU und BARRAT<sup>18</sup>

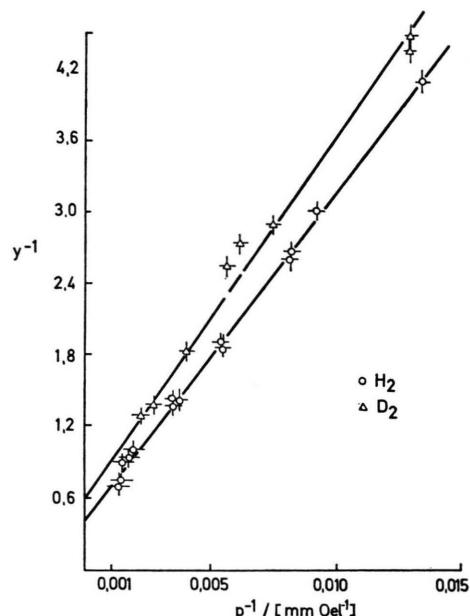


Abb. 6.  $Y^{-1}$  ( $p^{-1}$ ) für die Polarisationsgradmessungen mit Wasserstoff (H<sub>2</sub>) und Deuterium (D<sub>2</sub>).

gemessen wurden, angegeben. Die letzte Spalte enthält die Depolarisationsquerschnitte der Ausrichtung für den analogen Zustand  $6^1P_1$  des Quecksilbers<sup>19</sup>. Für Wasserstoff und Deuterium sind in Tab. 2 die Relaxationsquerschnitte für Orientierung und Ausrichtung und die Depolarisationsquerschnitte für die Ausrichtung sowie der Fluoreszenzlöschquerschnitt angegeben.

Bei den Edelgasen steigen die Depolarisationsquerschnitte der Orientierung und der Ausrichtung mit wachsender Kernladungszahl entsprechend der zunehmenden Polarisierbarkeit an. Bei den Messungen der vorliegenden Arbeit als auch bei den Werten für den Depolarisationsquerschnitt der Ausrichtung

<sup>17</sup> F. W. BYRON u. H. M. FOLEY, Phys. Rev. **134 A**, 615 [1964].  
<sup>18</sup> H. SAUSSERAU u. M. BARRAT, C. R. Acad. Sci. Paris **268**, 475 [1969].

<sup>19</sup> P. JEAN, M. MARTIN u. D. LECLER, C. R. Acad. Sci. Paris **264**, B 1791 [1967].

	$\sigma^{(2)}(\rho_{\pm 2}^2)^a$	$\sigma^{(2)}(\rho_{\pm 1}^2)^a$	$\sigma^{(2)} b$	$\sigma^{(1)}(\rho_{\pm 1})^a$	$\sigma_{th}^{(1)} c$	$\sigma_{th}^{(2)} d$	$\sigma^{(2)}(5^1P_1Cd^{112})^e$	$\sigma^{(2)}(6^1P_1Hg^{198})^f$
He	112 ± 10	106 ± 10	109 ± 10	141 ± 12	114	43	85 ± 9	97 ± 9
Ne	92 ± 9	84 ± 8	88 ± 9	103 ± 9	152	78	97 ± 12	75 ± 9
A	225 ± 20	237 ± 20	231 ± 20	281 ± 24	311	153	245 ± 25	200 ± 19
Kr	306 ± 26	298 ± 26	302 ± 26	368 ± 35	384	199	314 ± 25	220 ± 22
Xe	412 ± 39	412 ± 39	412 ± 39	547 ± 49	465	254	380 ± 19	280 ± 25

a Hanle-Effekt-Messungen, diese Arbeit. In Klammern sind die Multipolkomponenten der Dichtematrix angegeben, aus deren Stoßrelaxation der Wirkungsquerschnitt gemessen wurde.

b Mittelwert aus den Meßergebnissen der Spalten 1 und 2.

c Berechnung des Depolarisationsquerschnittes für den (5s5p)<sup>1</sup>P<sub>1</sub>-Zustand von Cd nach der von BYRON und FOLEY<sup>17</sup> angegebenen Formel unter Berücksichtigung der Bemerkung von OMONT<sup>3</sup>

$$\sigma_{th}^{(1)} = 2,12 \left\{ \frac{e^4 a_0^4}{\langle \Delta E \rangle \hbar \langle v_r \rangle} \left( \frac{(n^* + 1) (n^* + \frac{1}{2}) n^{*2}}{Z^{*2}} \right)_A \cdot \left( \frac{(n^* + 1) (n^* + \frac{1}{2}) n^{*2}}{Z^{*2}} \right)_B \right\}^{\frac{1}{2}}.$$

d Berechnung des Depolarisationsquerschnittes für den (5s5p)<sup>1</sup>P<sub>1</sub>-Cd-Zustand von REBANE<sup>1</sup>.

e Hanle-Effekt-Messungen<sup>18</sup> an Cd<sup>112</sup>.

f Hanle-Effekt-Messungen<sup>19</sup> an Hg<sup>198</sup>.

(Die Definition des Wirkungsquerschnittes in den Arbeiten e und f unterscheidet sich um den Faktor  $\pi$  von der in dieser Arbeit verwendeten Definition.)

Tab. 1. Depolarisationsquerschnitte für Stöße mit Edelgasatomen (in  $10^{-16}$  cm<sup>2</sup>).

	$\sigma^0 + \sigma_{D}^{(2)}(\rho_{\pm 2}^2)^a$	$\sigma^{(0)} + \sigma_{D}^{(2)}(\rho_{\pm 1}^2)^a$	$\sigma^{(0)} + \sigma_D^{(2)} b$	$\sigma^{(0)} + \sigma_D^{(1)}(\rho_{\pm 1}^1)^a$	$\sigma_D^{(2)}(\rho_0^2)^c$	$\sigma^{(0)}(\rho_0^2)^c$	$\sigma^{(0)} + \sigma_D^{(2)}(5^1P_1Cd)^d$	$\sigma^{(0)} + \sigma_D^{(2)}(6^1P_1Hg)^e$
H <sub>2</sub>	101 ± 11	105 ± 11	103 ± 11	109 ± 12	62 ± 6	24 ± 3	99 ± 12	116 ± 12
D <sub>2</sub>	138 ± 15	134 ± 15	136 ± 15	136 ± 15	79 ± 8	47 ± 5	—	—

a Hanle-Effekt-Messungen, diese Arbeit.

b Mittelwert aus den Meßergebnissen der Spalten 1 und 2.

c Polarisationsgradmessungen nach Stern-Volmer, diese Arbeit.

d Hanle-Effekt-Messung<sup>18</sup> an Cd<sup>112</sup>.

e Hanle-Effekt-Messung<sup>19</sup> an Hg<sup>198</sup>.

Tab. 2. Depolarisations- und Löschquerschnitte bei Stößen mit H<sub>2</sub>- und D<sub>2</sub>-Molekülen (in  $10^{-16}$  cm<sup>2</sup>).

für den Hg-6<sup>1</sup>P<sub>1</sub>-Zustand bildet Helium eine Ausnahme. Dies deutet darauf hin, daß beim Helium neben dem abstoßenden Van der Waals-Potential auch ein anziehendes Potential, das auf Nahkräfte zurückzuführen ist, die Stoßwechselwirkung bestimmt. Wegen der großen Relativgeschwindigkeit zwischen den Cadmium- und Heliumatomen gegenüber den anderen Edelgassstoßpartnern ist ein Durchdringen der Elektronenhüllen beider Stoßpartner möglich. Die Wirkungsquerschnitte für die Depolarisation der Ausrichtung stimmen mit Ausnahme von Helium mit den in<sup>18</sup> angegebenen Werten gut überein.

Die mit Slaterschen Wellenfunktionen nach der Theorie von Byron und Foley berechneten Edelgaswirkungsquerschnitte für die Depolarisation der Orientierung stimmen mit den experimentellen Werten gut überein. Jedoch darf diese Übereinstimmung nicht überbewertet werden, da die Slaterschen Wellenfunktionen dafür eigentlich zu ungenau sind. Das zeigt der Vergleich mit den berechneten Werten von

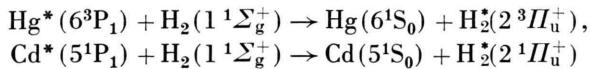
Rebane, der ebenfalls mit Slater-Funktionen in einem Stoßmodell rechnet, das die Bildung eines Quasimoleküls annimmt.

Für Wasserstoff und Deuterium sind die Relaxationsquerschnitte für die Ausrichtung und die Orientierung unter Berücksichtigung der Fehlergrenzen gleich groß. Die Polarisationsgradmessungen zeigen, daß die Löschquerschnitte klein gegenüber den Depolarisationsquerschnitten sind. Der 6<sup>3</sup>P<sub>1</sub>-Zustand des Hg hingegen wird durch Wasserstoff ebenso stark gelöscht wie depolarisiert<sup>7</sup>. Die geringe Löschung des Singulettzustandes 5<sup>1</sup>P<sub>1</sub> von Cadmium durch Wasserstoff läßt sich an Hand des Termschemas für das Wasserstoffmolekül<sup>20</sup> mit Hilfe der Erhaltungssätze für Gesamtdrehimpuls<sup>21</sup>, Gesamtspin<sup>22</sup> und Parität erklären. Dazu werden die beiden Reaktionsgleichungen

<sup>20</sup> G. HERZBERG, Molecular Spectra and Molecular Structure, D. van Nostrand Comp., Inc., New York 1950, S. 340.

<sup>21</sup> J. G. WINANS, Rev. Mod. Phys. **16**, 175 [1944].

<sup>22</sup> E. WIGNER, Nachr. Ges. Wiss. Göttingen **1927**, 375.



betrachtet. Die Anregungsenergie des Quecksilberatoms ( $39\ 500\ \text{cm}^{-1}$ ) kann auf das Wasserstoffmolekül durch einen Stoß 2. Art übertragen werden; dieses geht in den  $2^3\Pi_u^+$ -Zustand ( $36\ 000\ \text{cm}^{-1}$ ) über. Die Energieresonanz für diesen Prozeß ist gut, der Gesamtdrehimpuls, der Gesamtspin und die Parität des Systems stimmen vor und nach dem Stoß überein. Wegen dieser Erhaltungssätze kann das System Cd( $^1P_1$ ) – H $_2$ ( $^1\Sigma_g^+$ ) durch einen Stoß 2. Art nur in das System Cd( $^1S_0$ ) – H $_2$ ( $^1\Pi_u^+$ ) übergehen. Dieser Prozeß ist aber wegen der ungünstigen Energiebilanz sehr unwahrscheinlich<sup>23</sup>. Der  $^1P_1$ -Zustand besitzt eine Anregungsenergie von  $43\ 000\ \text{cm}^{-1}$ , der  $^1\Pi_u^+$ -Zustand jedoch von  $90\ 000\ \text{cm}^{-1}$ . Dadurch kann der im Vergleich zum Depolarisationsquerschnitt kleine Löschungsquerschnitt durch Wasserstoff erklärt werden.

Die *Löscherquerschnitte* für Wasserstoff und Deuterium verhalten sich etwa umgekehrt wie die Relativgeschwindigkeiten der Stoßpartner. Ein Vergleich der *Depolarisationsquerschnitte* für Wasserstoff und Deuterium ermöglicht es eine Aussage über die Geschwindigkeitsabhängigkeit dieses Wirkungsquerschnittes zu machen. Die Größe

$$[\sigma_D^{(2)}(\text{Cd}^* - \text{D}_2)/\sigma_D^{(2)}(\text{Cd}^* - \text{H}_2)]^{1/5}$$

ergibt sich mit den experimentellen Werten zu  $1,77 \pm 0,6$ . Das Verhältnis der mittleren Relativgeschwindigkeiten für die Systeme (Cd – H $_2$ ) und (Cd – D $_2$ ) ist 1,4. Der Depolarisationsquerschnitt für Wasserstoff könnte also  $\langle v_r \rangle^{-2/5}$  proportional sein. Diese Geschwindigkeitsabhängigkeit ergibt sich auch aus theoretischen Betrachtungen, wenn man ein Wechselwirkungspotential annimmt, das mit  $1/R^6$  abfällt und die Stoßparameternäherung für die Relativbewegung der Stoßpartner macht.

Das *Verhältnis*  $\sigma_D^{(1)}/\sigma_D^{(2)}$  lässt sich bei theoretischen Berechnungen am genauesten angeben, da es unabhängig von den genauen Stoßdaten ist. An diesem Wert können das Stoßpotential und die Näherungen, die bei der Beschreibung des Stoßprozesses gemacht wurden, geprüft werden. Die Tab. 3 enthält die Werte  $\sigma_D^{(1)}/\sigma_D^{(2)}$ , die sich aus den Meßwerten der Tab. 1 und 2 ergeben, für die Stöße von angeregten

Cadmiumatomen mit Edelgasatomen und Wasserstoffmolekülen. Für die Edelgase liegen sie zwischen 1,18 für Cd – Ne und 1,33 für Cd – Xe. Diesen Werten sind diejenigen für den (6s6p) $^3P_1$ -Zustand des

	$\sigma_D^{(1)}/\sigma_D^{(2)}$ ( $5s\ 5p$ ) $^1P_1$ Cd $^{14a}$	$\sigma_D^{(1)}/\sigma_D^{(2)}$ ( $6s\ 6p$ ) $^3P_1$ Hg $^{202b}$
He	$1,29 \pm 0,23$	$1,15 \pm 0,07$
Ne	$1,18 \pm 0,21$	$1,26 \pm 0,12$
A	$1,22 \pm 0,21$	$1,21 \pm 0,06$
Kr	$1,22 \pm 0,25$	$1,16 \pm 0,03$
Xe	$1,33 \pm 0,23$	$1,03 \pm 0,08$
H $_2$	$1,06 \pm 0,20$	$1,10 \pm 0,10$
D $_2$	$1,00 \pm 0,20$	

a  $\sigma_D^{(1)}/\sigma_D^{(2)}$  gebildet aus den Meßergebnissen in Tab. 1 und 2.  
b Ergebnisse aus<sup>7</sup>.

Tab. 3. Verhältnisse der Depolarisationsquerschnitte.

Quecksilberisotops Hg $^{202}$  gegenübergestellt. Der aus *Symmetriebetrachtungen* für einen angeregten Zustand mit dem Gesamtdrehimpuls  $J=1$  folgende Wert für  $\sigma_D^{(1)}/\sigma_D^{(2)}$  von  $5/3$ , der *unabhängig* von einem bestimmten Stoßpotential ist, wird durch das Experiment nicht bestätigt. Die aus numerischen Integrationen der Schrödinger-Gleichung mit dem Dipol-Dipol-Wechselwirkungspotential in der 2. Ordnung als Stoßoperator folgenden Werte für  $\sigma_D^{(1)}/\sigma_D^{(2)}$  von  $1,10^3$ ,  $1,11^{24}$  bzw.  $1,12^2$  liegen noch innerhalb der Fehlergrenzen der experimentellen Werte. Der Wert  $5/3$  kann mit Sicherheit als obere Grenze und die Werte  $1,10$ ;  $1,11$  bzw.  $1,12$  als untere Grenze für  $\sigma_D^{(1)}/\sigma_D^{(2)}$  angegeben werden.

Die Werte von  $\sigma_D^{(1)}/\sigma_D^{(2)}$  für Wasserstoff 1,06 bzw. Deuterium 1,00 liegen zwischen dem Wert für Resonanzstöße 0,966 und dem aus numerischen Rechnungen folgenden Wert  $1,11 \pm 0,02$  für Nichtresonanzstöße.

Die Messungen von  $\sigma_D^{(1)}/\sigma_D^{(2)}$  für *Resonanzstöße* in den Arbeiten von OMONT et al.<sup>25</sup> zeigen eine gute Übereinstimmung mit dem theoretischen Wert von 0,966, der sich aus Berechnungen mit dem Dipol-Dipol-Wechselwirkungspotential in der 1. Ordnung der störungstheoretischen Behandlung des Stoßproblems ergibt. Für *Nichtresonanzstöße dagegen stimmen* die Ergebnisse für  $\sigma_D^{(1)}/\sigma_D^{(2)}$  des Cadmium- $^1P_1$ -Zustandes, die in der vorliegenden Arbeit gemessen wurden, und für  $\sigma_D^{(1)}/\sigma_D^{(2)}$  des Quecksilber- $^3P_1$ -Zustandes, die von BARRAT et al.<sup>7</sup> bestimmt wurden,

<sup>23</sup> J. FRANCK, Naturwiss. **14**, 211 [1926].

<sup>24</sup> V. N. REBANE, Opt. Spectr. USSR **24**, 155 [1968]. — Yu. N. DEMKOV, V. N. REBANE u. T. K. REBANE, V. Intern. Conf.

on the Physics of Electr. and Atomic Coll., Nauka Press, Leningrad 1967, S. 288.

<sup>25</sup> A. OMONT u. J. MEUNIER, Phys. Rev. **169**, 92 [1968]; siehe auch BERMAN et al.<sup>2</sup>.

nicht mit den theoretischen Berechnungen überein. Das deutet darauf hin, daß das Dipol-Dipol-Wechselwirkungspotential in der 2. Ordnung der störungstheoretischen Behandlung der Nichtresonanzstöße den Stoßprozeß nicht so gut beschreibt wie im Fall der Resonanzstöße. Zur weiteren Durchleuchtung dieses Stoßproblems könnten Experimente, die bei

verschiedenen Relativgeschwindigkeiten  $v_r$  der Stoßpartner durchgeführt werden, und theoretische Berechnungen, die mit modifizierten Stoßpotentialen (z. B. Lenard-Jones-Potential) vorgenommen werden, dienen.

Herrn Professor Dr. W. HANLE danke ich für sein förderndes Interesse.

## Zusammenstellung der Koeffizienten für die Anpassung komplexer atomarer Streufaktoren für schnelle Elektronen durch Polynome

1. Mitteilung: Hartree-Fock-Fall

JOACHIM HAASE

Sektion Röntgen- und Elektronenbeugung der Universität Ulm \*, Ulm

(Z. Naturforsch. **25 a**, 936—945 [1970]; eingegangen am 24. März 1970)

In der Arbeit werden Formeln und Koeffizienten angegeben, um die Beträge und Phasen der komplexen Streufaktoren für konstante Beschleunigungsspannungen 40, 60, 80, 100, 120 kV und spannungsunabhängig zwischen 40 und 120 kV für Atome der Kernladungszahlen 1—36 zu berechnen.

Zur Auswertung von Elektronenbeugungsdiagrammen gasförmiger Substanzen benötigt man komplexe atomare Streufaktoren  $f(s) = |f(s)| \exp\{i\eta(s)\}$ , insbesondere dann, wenn die untersuchten Moleküle Atome sehr unterschiedlicher Kernladungszahl enthalten<sup>1, 2</sup>. Die komplexen Streufaktoren, die von einer ganzen Reihe von Autoren berechnet worden sind, liegen in Tabellenform vor (Literaturzusammenstellung siehe HAASE<sup>3</sup>). Die Schrittweite, mit der der Bereich des Beugungswinkels  $\vartheta$  abgetastet wird, ist bei den verschiedenen Autoren sehr unterschiedlich. Bei der Strukturbestimmung gasförmiger Moleküle wird im Winkelbereich oder besser im  $s$ -Wertbereich [ $s = (4\pi)/\lambda \sin(\vartheta/2)$ ] im allgemeinen mit einer Schrittweite von  $\Delta s = 0,2 \text{ \AA}^{-1}$  gearbeitet. Um die Formfaktoren zur Auswertung von Beugungsaufnahmen zu verwenden, müßte man entweder die Formfaktoren in diesen Winkelschritten berechnen, oder durch geeignete Interpolationsverfahren Zwischenwerte aus den tabellierten Daten ermitteln. Um diese umständliche und zeitraubende Arbeit zu umgehen, wurden die Formfaktoren durch geeig-

nete analytische Ausdrücke approximiert, so daß man mit Hilfe der angegebenen Formeln und den zugehörigen Koeffizienten die Beträge und Phasen der komplexen Streufaktoren an beliebigen Stellen  $s$  berechnen kann.

In der früheren Arbeit<sup>3</sup> wurden die Funktionen angegeben, die für die Anpassung der Beträge und Phasen der Streufaktoren geeignet sind.

Es sind dies

1. für die Beträge:

$$|f(s)| = \exp\{P^{(4)}(s)\} = \exp\left\{\sum_{n=0}^4 a_n s^n\right\}. \quad (1)$$

2. für die Phasen:

$$\eta(s) = Q^{(4)}(s) = \sum_{n=0}^4 b_n s^n, \quad (2)$$

wobei  $P^{(4)}(s)$  und  $Q^{(4)}(s)$  Polynome vierten Grades in  $s$  bedeuten.

In der genannten Arbeit war gezeigt worden, daß man mit Polynomen vierten Grades für die Auswertung der Beugungsdiagramme ausreichend ge-

Sonderdruckanforderungen an Dr. J. HAASE, Zentrum Chemie–Physik–Mathematik der Universität Ulm, Sektion Elektronen- und Röntgenbeugung, D-7500 Karlsruhe 21, Hertzstraße 16, Bau 35 II.

\* Derzeitige Anschrift: 75 Karlsruhe, Hertzstr. 12, Bau 35.

<sup>1</sup> R. GLAUBER u. V. SCHOMAKER, Nature London **170**, 290 [1952].

<sup>2</sup> V. SCHOMAKER u. R. GLAUBER, Phys. Rev. **89**, 666 [1953].

<sup>3</sup> J. HAASE, Z. Naturforsch. **23 a**, 1000 [1968].