Berechnung der Matrixelemente des Retardierungsfaktors mit Wasserstoffeigenfunktionen

Von Gerhard Elwert

Aus dem Astronomischen Institut der Universität Tübingen

(Z. Naturforschg. **10a**, 361—365 [1955]; eingegangen am 3. September 1953)

Die Matrixelemente des Retardierungsfaktors $\varepsilon^{n\,n_1\,n_2\,m}_{n_0\,n_{01}\,n_{02}\,m} = \int e^{iqx}\, \psi_{n_0\,n_{01}\,n_{02}\,m}\, \psi^*_{n\,n_1\,n_2\,m}\, \mathrm{d}\tau$ werden mit Wasserstoffeigenfunktionen in parabolischen Koordinaten für beliebige Werte der Quantenzahlen des Ausgangszustandes $n_0\, n_{01}\, n_{02}\, m$ und des Endzustandes $n\, n_1\, n_2\, m$ berechnet. Es wird eine Anwendung auf die Berechnung von Wirkungsquerschnitten für Stoßanregung gegeben.

Bei der Berechnung von Wirkungsquerschnitten für Stoßanregung spielte in einer früheren Arbeit des Verfassers[1] das verallgemeinerte Matrixelement

$$\varepsilon^n_{n_0}(q) = \int e^{iqx}\, \psi_{n_0}\, \psi_n{}^*\, \mathrm{d}\tau \tag{1}$$

eine Rolle, das wegen seiner Bedeutung für die Streuung von Röntgenstrahlen auch als *Atomformfaktor* bezeichnet wird. ψ_{n_0} und ψ_n sind die Wellenfunktionen des Atomelektrons im Anfangs- und Endzustand; dabei stehen n_0 und n symbolisch für die Gesamtheit der Quantenzahlen in diesen Zuständen. Im Limes $q \to 0$ ist aus $\varepsilon^n_{n_0}$ das gewöhnliche Matrixelement der x-Koordinate zu entnehmen. Das Absolutquadrat von (1) führt auf generalisierte Übergangswahrscheinlichkeiten. $\varepsilon^n_{n_0}$ soll im folgenden mit Wasserstoffeigenfunktionen in parabolischen Koordinaten $\xi = r + x$, $\eta = r - x$, φ allgemein berechnet werden. Bei ihrer Verwendung kann (1) in Produkte von Integralen über die Koordinaten ξ, η, φ zerspalten werden. In dem von Bethe[2] streng gelösten Fall des Übergangs aus der K-Schale wurden ebenfalls parabolische Koordinaten benutzt. Während jedoch Bethe die Integration mit Hilfe der erzeugenden Funktion der Laguerreschen Polynome durchführte, sollen die im allgemeinen Fall auftretenden komplizierteren Ausdrücke mit Hilfe der Laplace-Transformation berechnet werden.

I. Berechnung des Matrixelements $\varepsilon^{n\,n_1\,n_2\,m}_{n_0\,n_{01}\,n_{02}\,m}$

Die Eigenfunktion eines diskreten Zustands mit der Hauptquantenzahl n, den parabolischen Quantenzahlen n_1, n_2 und der Winkelquantenzahl m ist in parabolischen Koordinaten[3]

$$\psi_{n\,n_1\,n_2\,m} = N_{n\,n_1\,n_2\,m}\, e^{-\alpha/n\cdot(\xi+\eta/2)}\, (\xi\,\eta)^m \tag{2}$$
$$L^{(m)}_{m+n_1}\left(\frac{\alpha\,\xi}{n}\right) L^{(m)}_{m+n_2}\left(\frac{\alpha\,\eta}{n}\right) e^{\pm i m \varphi}.$$

Hierin ist zur Abkürzung ähnlich wie bei Bethe

$$\alpha = \frac{Z}{a_0} \tag{3}$$

gesetzt. Z ist die Kernladung, a_0 der Bohrsche Wasserstoffradius, die $L^{(i)}_{i+k}$ sind zugeordnete Laguerresche Polynome. Wie in der Wellenmechanik üblich, sind sie definiert durch

$$L^{(i)}_{i+k}(\varrho) = \frac{\mathrm{d}^i}{\mathrm{d}\varrho^i}\, e^{\varrho}\, \frac{\mathrm{d}^{i+k}}{\mathrm{d}\varrho^{i+k}}\, (\varrho^{i+k}\, e^{-\varrho}). \tag{4}$$

Zwischen den Quantenzahlen besteht die Beziehung

$$n = n_1 + n_2 + m + 1 \quad (n, n_1, n_2, m \geqq 0). \tag{5}$$

Der Normierungsfaktor lautet:

$$N_{n\,n_1\,n_2\,m} = \frac{1}{\sqrt{\pi}\, n}\, \frac{n_1!^{1/2}\, n_2!^{1/2} \left(\frac{\alpha}{n}\right)^{m+3/2}}{(n_1+m)!^{3/2}\, (n_2+m)!^{3/2}}. \tag{6}$$

Bei der Integration über φ verschwinden alle Integrale, für die die Winkelquantenzahlen in beiden Zuständen nicht gleich sind, entsprechend der bekannten Auswahlregel für diese Quantenzahl. Wenn man noch zur Abkürzung

$$\gamma = \frac{\alpha}{n_0}, \quad \delta = \frac{\alpha}{n} \tag{7}$$

einführt, erhält man für das Matrixelement

[1] G. Elwert, Z. Naturforschg. **9a**, 637 [1954], im folgenden als B zitiert.

[2] H. Bethe, Ann. Phys., Lpz. (5) **5**, 325 [1930].

[3] H. Bethe, Quantenmechanik der Ein- und Zweielektronensysteme in: H. Geiger und K. Scheel, Handbuch der Physik XXIV, 1, Springer Berlin 1933. A. Sommerfeld, Atombau und Spektrallinien II, Vieweg 1939.

$$\varepsilon^{n\,n_1\,n_2\,m}_{n_0\,n_{01}\,n_{02}\,m} = N_{n_0\,n_{01}\,n_{02}\,m}\, N_{n\,n_1\,n_2\,m}\, \frac{\pi}{2} \tag{8}$$
$$\cdot \int_0^\infty \int_0^\infty (\xi\,\eta)^m\, e^{i q/2 \cdot (\xi-\eta) - (\gamma+\delta)/2 \cdot (\xi+\eta)}$$
$$\cdot L^{(m)}_{m+n_{01}}(\gamma\,\xi)\, L^{(m)}_{m+n_{02}}(\gamma\,\eta)\, L^{(m)}_{m+n_1}(\delta\,\xi)\, L^{(m)}_{m+n_2}(\delta\,\eta)$$
$$\cdot (\xi+\eta)\,\mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta.$$

Indem man das Doppelintegral in Einzelintegrale zerlegt, kann man schreiben

$$= N_{n_0\,n_{01}\,n_{02}\,m}\, N_{n\,n_1\,n_2\,m}\, \frac{\pi}{2} \tag{9}$$
$$\cdot \left[J^{(m+1)}_{n_{01}\,n_1}\, J^{(m)*}_{n_{02}\,n_2} + J^{(m)}_{n_{01}\,n_1}\, J^{(m+1)*}_{n_{02}\,n_2} \right].$$

Hierin bedeutet

$$J^{(m+r)}_{n_{01}\,n_1} \tag{10}$$
$$= \int_0^\infty \xi^{m+r}\, e^{\frac{1}{2}(i q - \gamma - \delta)\,\xi}\, L^{(m)}_{m+n_{01}}(\gamma\,\xi)\, L^{(m)}_{m+n_1}(\delta\,\xi)\,\mathrm{d}\xi.$$

$J^{(m+r)}_{n_{02}\,n_2}$ ist entsprechend definiert; r nimmt die Werte 0 und 1 an. Das Integral (10) kann mit den Mitteln der Laplace-Transformation berechnet werden. Die Bedeutung dieses Kalküls für die Wellenmechanik haben neuerdings Kallmann und Päsler[4] in verschiedenen Arbeiten hervorgehoben. Zum Beispiel haben diese Autoren das elektrische Moment

$$\int_0^\infty R_{n_0\,l_0}\, R_{n\,l}\, r^k\,\mathrm{d}r \tag{11}$$

für eine beliebige Potenz k exakt berechnet. Dabei sind die R_{nl} die radialen Bestandteile der Wellenfunktion, wie sie bei Separation der Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten auftreten. Das Integral (10) ist nun ähnlich aufgebaut wie das Integral (11). Infolgedessen sind bei seiner Berechnung dieselben Schritte notwendig, nämlich die Anwendung des Differentiationssatzes, des Verschiebungssatzes und des Faltungssatzes. Bezeichnet man den Integranden von (10) mit $F(\xi)$, so ergibt sich das Integral aus der Laplace-Transformierten

$$\mathfrak{L}\{F(\xi)\} = \int_0^\infty F(\xi)\, e^{-p\,\xi}\,\mathrm{d}\xi \tag{12}$$

für $p \to 0$.

Wie man ausgehend von

$$\mathfrak{L}\{\varrho^{i+k}\, e^{-\varrho}\} = \frac{\Gamma(1+i+k)}{(p+1)^{1+i+k}}$$

und durch Anwendung des Differentiationssatzes im Oberbereich sowie des Verschiebungssatzes im Unterbereich leicht kontrolliert, ist

$$\mathfrak{L}\left\{L^{(i)}_{i+k}(\varrho)\right\} = \Gamma(1+i+k)\, \frac{(p-1)^{i+k}}{p^{1+k}}. \tag{13}$$

Das gesuchte Integral (10) schreibt man zweckmäßigerweise in der Form

$$J^{(m+r)}_{n_{01}\,n_1} = \int F_1\, F_2\, F_3\, F_4\,\mathrm{d}\xi \tag{14}$$

mit
$$F_1 = \xi^{m+r},\quad F_2 = e^{\frac{1}{2}(i q - \gamma - \delta)\,\xi} \tag{14'}$$
$$F_3 = L^{(m)}_{m+n_{01}}(\gamma\xi),\quad F_4 = L^{(m)}_{m+n_1}(\delta\xi).$$

Durch Anwendung des Faltungssatzes ergibt sich

$$\mathfrak{L}\{F_3 \cdot F_4\} = \frac{(m+n_1)!\,(m+n_{01})!}{(\gamma\,\delta)^m}\, \frac{1}{2\pi i}$$
$$\oint \frac{(z-\gamma)^{n_{01}+m}}{z^{1+n_{01}}}\, \frac{(p-z-\delta)^{n_1+m}}{(p-z)^{1+n_1}}\,\mathrm{d}z,$$

wobei der im positiven Sinn durchlaufene Integrationsweg die Singularität bei $z=0$ umschließt. Mit Hilfe des Cauchyschen Satzes findet man

$$\mathfrak{L}(F_3 \cdot F_4) = \frac{(m+n_1)!\,(m+n_{01})!}{(\gamma\,\delta)^m\, n_{01}!}\, \frac{\mathrm{d}^{n_{01}}}{\mathrm{d}\zeta^{n_{01}}}\, \psi_1(\zeta)\Big|_{\zeta=0}$$

mit (15)

$$\psi_1(\zeta) = (\zeta-\gamma)^{n_{01}+m}\, \psi_2(\zeta),$$
$$\psi_2(\zeta) = \frac{(p-\zeta-\delta)^{n_1+m}}{(p-\zeta)^{1+n_1}}. \tag{15'}$$

Die Produktregel der Differentiation liefert

$$\frac{\mathrm{d}^{n_{01}}\,\psi_1}{\mathrm{d}\zeta^{n_{01}}}\Big|_{\zeta=0}$$
$$= \sum_{j=0}^{n_{01}} \binom{n_{01}}{j} \frac{(n_{01}+m)!}{(n_{01}+m-j)!}\, (-\gamma)^{n_{01}+m-j}\, \frac{\mathrm{d}^{n_{01}-j}\,\psi_2}{\mathrm{d}\zeta^{n_{01}-j}}\Big|_{\zeta=0}.$$

Der Differentiationssatz im Unterbereich ergibt:

$$\mathfrak{L}(F_1 \cdot F_3 \cdot F_4) = \frac{(m+n_1)!\,[(m+n_{01})!]^2}{(\gamma\,\delta)^m} \tag{16}$$
$$\cdot \sum_{j=0}^{n_{01}} \frac{(-\gamma)^{n_{01}+m-j}}{j!\,(n_{01}-j)!\,(n_{01}+m-j)!}\, \frac{\mathrm{d}^{n_{01}+m+r-j}\,\psi_2}{\mathrm{d}\zeta^{n_{01}+m+r-j}}\Big|_{\zeta=0},$$

wenn man an Stelle der Differentiation nach p die Ableitung nach ζ einführt. Für den m-fachen Differentialquotienten von ψ_2 kann ein geschlossener Ausdruck angegeben werden. Man findet leicht:

$$\frac{\mathrm{d}^m\,\psi_2}{\mathrm{d}\zeta^m} = \frac{(n_1+m)!\,(-\delta)^m}{n_1!}\, \overline{\psi}_2 \tag{17}$$

$$\text{mit } \overline{\psi}_2 = \frac{(p-\zeta-\delta)^{n_1}}{(p-\zeta)^{n_1+m+1}}.$$

Damit wird

[4] H. Kallmann u. M. Päsler in verschiedenen Arbeiten in Ann. Phys. und Z. Phys., insbesondere Z. Phys. **128**, 347 [1950].

$$\mathfrak{L}(F_1 \cdot F_3 \cdot F_4) = [(n_1 + m)!\,(n_{01} + m)!]^2 \frac{1}{n_1!} \tag{18}$$
$$\cdot \sum_{j=0}^{n_{01}} \frac{(-\gamma)^{n_{01}-j}}{j!\,(n_{01}-j)!\,(n_{01}+m-j)!} \left. \frac{d^{n_{01}+r-j}\,\overline{\psi}_2}{d\zeta^{n_{01}+r-j}} \right|_{\zeta=0}.$$

Schließlich erhält man die Laplace-Transformierte des gesamten Integranden von (10), indem man nach dem Verschiebungssatz im Unterbereich p durch $p - \frac{1}{2} - (iq - \gamma - \delta)$ ersetzt. Es ergibt sich also hiefür wieder der obige Ausdruck (18), wobei nur an Stelle von $\overline{\psi}_2$

$$\overline{\psi}_3 = \frac{\left(p - \frac{1}{2}\,iq + \frac{\gamma-\delta}{2} - \zeta\right)^{n_1}}{\left(p - \frac{1}{2}\,iq + \frac{\gamma+\delta}{2} - \zeta\right)^{m+n_1+1}} \tag{19}$$

tritt. Um das Integral (10) zu erhalten, hat man sowohl p als auch nach Erledigung der Differentiation ζ gleich Null zu setzen. Dies kann sofort ausgeführt werden, indem man statt nach ζ etwa nach $\gamma/2$ differenziert. Dann wird das gesuchte Integral

$$J_{n_{01}n_1}^{(m+r)} = (-1)^r\,[(n_1+m)!\,(n_{01}+m)!]^2 \frac{\gamma^{n_{01}}}{n_1!}\, 2^{1+m+n_{01}+r}$$
$$\cdot \sum_{j=0}^{n_{01}} \frac{(2\gamma)^{-j}}{j!\,(n_{01}-j)!\,(n_{01}+m-j)!} \frac{d^{n_{01}+r-j}\,\psi_{n_1}}{d\gamma^{n_{01}+r-j}} \tag{20}$$

mit

$$\psi_{n_1} = \frac{(-iq + \gamma - \delta)^{n_1}}{(-iq + \gamma + \delta)^{n_1+m+1}}. \tag{20'}$$

Damit läßt sich nun nach (8) die allgemeine Formel für den Atomformfaktor angeben. Setzt man die Normierungsfaktoren (6) ein und beachtet die Beziehung zwischen den Quantenzahlen (5) sowie (7), so erhält man

$$\varepsilon_{n_0\,n_{01}\,n_{02}\,m}^{n\,n_1\,n_2\,m} = -\,2^{n_0+m+1} \frac{\alpha^{2+n_0+m}}{n_0^{1+n_0}\,n^{2+m}} \tag{21}$$
$$\cdot \frac{(n_{01}+m)!^{1/2}\,(n_1+m)!^{1/2}\,(n_{02}+m)!^{1/2}\,(n_2+m)!^{1/2}}{n_{01}!^{1/2}\,n_1!^{1/2}\,n_{02}!^{1/2}\,n_2!^{1/2}}\,D$$

mit den Abkürzungen

$$D = D_{n_{01}n_1}^{(m+1)}\,D_{n_{02}n_2}^{(m)*} + D_{n_{01}n_1}^{(m)}\,D_{n_{02}n_2}^{(m+1)*}, \tag{21'}$$

$$D_{n_{01}n_1}^{(m+r)} = \sum_{j=0}^{n_{01}} \frac{n_{01}!\,(2\gamma)^{-j}}{(n_{01}+m-j)!\,(n_{01}-j)!\,j!} \frac{d^{r+n_{01}-j}}{d\gamma^{r+n_{01}-j}}\,\psi_{n_1}; \tag{21''}$$

$D_{n_{02}n_2}^{(m+r)}$ ist entsprechend definiert. Hierin kann D noch einfacher als Differentialquotient eines Produktes geschrieben werden. Es gilt

$$D = \frac{d}{d\gamma}\,(D_{n_{01}n_1}^{(m)}\,D_{n_{02}n_2}^{(m)*}). \tag{22}$$

II. Berechnung von Wirkungsquerschnitten

1. Übergang aus der K-Schale

Als Beispiel und zur Kontrolle sei zunächst der Bethesche Fall des Übergangs von der K-Schale aus betrachtet. Dann ist $n_0 = 1$ und nach (5) $n_{01} = n_{02} = m = 0$. Mit den Abkürzungen

$$\gamma_1 = -iq + \gamma - \delta,\quad \gamma_2 = -iq + \gamma + \delta \tag{23}$$

wird somit

$$D_{0n_1}^{(0)} = \frac{\gamma_1^{n_1}}{\gamma_2^{1+n_1}},\quad D_{0n_2}^{(0)} = \frac{\gamma_1^{n_2}}{\gamma_2^{1+n_2}}. \tag{24}$$

Durch logarithmische Differentiation ergibt sich dann sofort nach (22):

$$D = \frac{d}{d\gamma}\,D_{0n_1}^{(0)}\,D_{0n_2}^{(0)*}$$
$$= \frac{\gamma_1^{n_1}\gamma_1^{*n_2}}{\gamma_2^{n_2}\gamma_2^{*n_2+1}} \left[\frac{n_1}{\gamma_1} - \frac{1+n_1}{\gamma_2} + \frac{n_2}{\gamma_1^*} - \frac{1+n_2}{\gamma_2^*}\right].$$

Umformung der Klammer führt auf

$$D = -\frac{\gamma_1^{n_1}\gamma_1^{*n_2}}{\gamma_2^{n_2}\gamma_2^{*1+n_2}} \tag{25}$$
$$\cdot \frac{4\,\frac{n^3}{\alpha^2}\,q\left[\frac{qn}{\alpha} - i\,(n_1 - n_2)\right]}{\left[\left(\frac{qn}{\alpha}\right)^2 + (n+1)^2\right]\left[\left(\frac{qn}{\alpha}\right)^2 + (n-1)^2\right]}.$$

Setzt man diesen Ausdruck in (8) ein, so ergibt sich für das Absolutquadrat des Matrixelements

$$|\varepsilon_{1000}^{n\,n_1\,n_2\,0}|^2 = 2^8 n^6 \left(\frac{q}{\alpha}\right)^2 \tag{26}$$
$$\cdot \frac{\left[(n-1)^2 + \left(\frac{qn}{\alpha}\right)^2\right]^{n-3}}{\left[(n+1)^2 + \left(\frac{qn}{\alpha}\right)^2\right]^{n+3}} \left[\left(\frac{qn}{\alpha}\right)^2 + (n_1 - n_2)^2\right]$$

in Übereinstimmung mit Bethe. Die Formel B (30) folgt nach Summation über die Quantenzahlen n_1, n_2.

2. Übergang aus der L-Schale

Beim Übergang von der L-Schale in höhere Niveaus n werde der Fall $m = 1$ betrachtet. Es ist dann nach (5)

$$n_{01} = n_{02} = 0,\quad n_1 + n_2 = n - 2 \tag{27}$$

und nach (21'')

$$D_{0\,n_1}^{(1)} = \frac{\gamma_1^{n_1}}{\gamma_2^{\,2+n_1}},\quad D_{0\,n_2}^{(1)} = \frac{\gamma_1^{n_2}}{\gamma_2^{\,2+n_2}}. \tag{28}$$

Hiermit erhält man nach (22)

$$D = \frac{\gamma_1^{n_1}\gamma_1^{*n_2}}{\gamma_2^{2+n_1}\gamma_2^{*2+n_2}} \left(\frac{n_1}{\gamma_1} - \frac{2+n_1}{\gamma_2} + \frac{n_2}{\gamma_1^*} - \frac{2+n_2}{\gamma_2^*}\right) \tag{29}$$

oder nach Umformung unter Verwendung von (7)

$$D = -\frac{\gamma_1^{n_1}\gamma_1^{*n_2}}{\gamma_2^{2+n_1}\gamma_2^{*2+n_2}} \frac{2^5 n^3 q}{\alpha^2} \cdot \frac{\frac{2nq}{\alpha} - i(n_1 - n_2)}{\left[(n+2)^2 + \left(\frac{2nq}{\alpha}\right)^2\right]\left[(n-2)^2 + \left(\frac{2nq}{\alpha}\right)^2\right]}. \quad (29')$$

Für das Absolutquadrat des Atomformfaktors erhält man schließlich nach (21) die Formel:

$$|\varepsilon_{2001}^{n n_1 n_2 1}|^2 = 2^{20} n^8 \left(\frac{q}{\alpha}\right)^2 (1+n_1)(1+n_2) \quad (30)$$
$$\cdot \frac{\left[(n-2)^2 + \left(\frac{2nq}{\alpha}\right)^2\right]^{n-4}}{\left[(n+2)^2 + \left(\frac{2nq}{\alpha}\right)^2\right]^{n+4}} \left[\left(\frac{2nq}{\alpha}\right)^2 + (n_1 - n_2)^2\right].$$

Um die gesamte Übergangswahrscheinlichkeit in die n-te Schale zu erhalten, ist dieser Ausdruck noch über die Quantenzahlen n_1 bzw. n_2 zu summieren. Mit Hilfe der Reihen $\Sigma\, \nu^n$ für $n = 1, 2, 3, 4$ ergibt sich:

$$|\varepsilon_{21}^{n1}|^2 = \sum_{n_1=0}^{n-2} |\varepsilon_{2001}^{n n_1 n_2 1}|^2$$
$$= \frac{2^{19}}{15} n^9 \left(\frac{q}{\alpha}\right)^2 (n^2 - 1) \frac{\left[(n-2)^2 + \left(\frac{2nq}{\alpha}\right)^2\right]^{n-4}}{\left[(n+2)^2 + \left(\frac{2nq}{\alpha}\right)^2\right]^{n+4}} \cdot \left[5\left(\frac{2nq}{\alpha}\right)^2 + n^2 - 4\right]. \quad (31)$$

Aus diesem Ausdruck muß nun das Absolutquadrat $|x_{21}^{n1}|^2$ des gewöhnlichen Matrixelements der x-Koordinate im Limes $q \to 0$ zu entnehmen sein, wie es mit Eigenfunktionen in Kugelkoordinaten berechnet wurde. An Stelle der parabolischen Quantenzahlen tritt dann bekanntlich die azimutale Quantenzahl l. Unter Beachtung der bekannten Auswahlregel für l ist dann

$$|x_{21}^{n1}|^2 = |x_{201}^{n11}|^2 + |x_{211}^{n21}|^2 + |x_{211}^{n01}|^2. \quad (32)$$

Es gilt nun[3]

$$x_{n_0 l_0 m}^{n,\, l_0+1,\, m} = \sqrt{\frac{(l_0+1)^2 - m^2}{(2l_0+3)(2l_0+1)}}\, R_{n_0 l_0}^{n,\, l_0+1};$$
$$x_{n_0 l_0 m}^{n,\, l-1,\, m} = \sqrt{\frac{l_0^2 - m^2}{(2l_0+1)(2l_0-1)}}\, R_{n_0 l_0}^{n,\, l_0-1}. \quad (32')$$

Hierin sind die Funktionen R die Integrale (11) für $k = 3$. Im Falle $m = 1$ ist nur das mittlere Glied in (32) von 0 verschieden. Mit[3]

$$(R_{21}^{n2})^2 = \frac{2^{19} n^9 (n^2-1)(n-2)^{2n-7}}{3(n+2)^{2n+7}} \quad (32'')$$

und (32′) ergibt sich

$$|x_{21}^{n1}|^2 = \frac{1}{5}(R_{21}^{n2})^2.$$

Im Limes $q \to 0$ muß somit die Beziehung

$$|\varepsilon_{21}^{n1}|^2 = \left(\frac{q}{\alpha}\right)^2 |x_{21}^{n1}|^2 \quad (33)$$

bestehen, die aus (31) sofort zu entnehmen ist.

Um zu der Anregungsfunktion Φ zu kommen, ist endlich noch die Integration über q auszuführen. Es ist nach B, Gl. (28):

$$\Phi_{21}^{n1} = \frac{8\pi}{a_0 K^2} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{dq}{q^3} |\varepsilon_{21}^{n1}|^2. \quad (34)$$

K ist die Wellenzahl des stoßenden Elektrons der Energie E; die Integrationsgrenzen sind gegeben durch die Formeln B, Gln. (31, 32):

$$\left\{\begin{matrix} q_{\min} \\ q_{\max} \end{matrix}\right\} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (\sqrt{E} \mp \sqrt{E + E_{n_0} - E_n}). \quad (35)$$

Zwar ist das Integral (34) allgemein lösbar, doch sei hier nur der in B interessierende Fall des Übergangs in die nächst höhere Schale ($n = 3$) betrachtet. Es entsteht dann

$$|\varepsilon_{21}^{31}|^2 = |x_{21}^{31}|^2 \frac{(q/\alpha)^2}{[1 + (6q/5\alpha)^2]^7}. \quad (36)$$

Für den wie in B definierten reduzierten Wirkungsquerschnitt $\Phi_{21\,\mathrm{red}}^{31}$ ergibt sich nach Ausführung der Integration und leichter Umformung

$$\Phi_{21\,\mathrm{red}}^{31} = \frac{\Phi_{21}^{31}}{\pi a_0^2 (\chi_H/\chi_2)^2} = |x_{21}^{31}|^2 \frac{1}{U} \Delta F_3'. \quad (37)$$

Hierin bedeutet χ_2 die Ionisationsenergie beim Elektronenübergang aus der L-Schale, χ_H die gewöhnliche Ionisationsenergie des Wasserstoffs und U das Verhältnis der Elektronenenergie E zu χ_2. Ferner ist

$$\Delta F_3' = F_3'\left(1 + \left(\frac{6\, q_{\max}}{5\alpha}\right)^2\right) - F_3'\left(1 + \left(\frac{6\, q_{\min}}{5\alpha}\right)^2\right), \quad (37')$$

wobei die Funktion

$$F_3'(x) = \ln\frac{x-1}{x} + \sum_{\tau=1}^{6} \frac{1}{\tau x^\tau} \quad (37'')$$

mit der beim Elektronenübergang aus der K-Schale auftretenden Betheschen Funktion B, Gl. (36) verwandt ist. Nach B, Gl. (26) ist in (35)

$$\Delta E = E_n - E_{n_0} = \tfrac{5}{9} \cdot \chi_2.$$

Ersetzt man andrerseits $|\varepsilon_{21}^{31}|^2$ im Integranden von (34) entsprechend der in B verwendeten Entwicklung der Exponentialfunktion in (1) nach q durch (33), so erhält man für den reduzierten Wirkungsquerschnitt die Näherung