

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^{1,2}. Die komplexen Streufaktoren, die von einer ganzen Reihe von Autoren berechnet worden sind, liegen in Tabellenform vor (Literaturzusammenstellung siehe HAASE³). Die Schrittweite, mit der der Bereich des Beugungswinkels ϑ 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 Arbeit³ 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.

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

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

³ J. HAASE, Z. Naturforsch. **23 a**, 1000 [1968].



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 digitalized 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.

naue Näherungswerte für die Streufaktoren erhalten kann. In den nachfolgenden Tab. 1 a und 1 b sind für eine Reihe von Atomen die unter Verwendung von Hartree-Fock-Atompotentialen berechneten Werte der Beträge und Phasen der Formfaktoren den aus der Approximation ermittelten Werten gegenübergestellt. Aus einem Vergleich der Werte erkennt man, daß die Anpassung recht gut den aus den errechneten Werten folgenden Funktionsverlauf wiedergibt.

In den Tab. 2 a und 2 b sind die Koeffizienten a_n und b_n der Polynome Formel (1) und (2) für die Elemente der Kernladungszahlen 1 bis 36 in Abhängigkeit von der Beschleunigungsspannung wiedergegeben.

Die hier vorgelegten Werte gelten nur für die angegebene Beschleunigungsspannung. Will man die Formfaktoren in der angegebenen Näherungsform zur Auswertung von Beugungsdiagrammen gasförmiger Substanzen verwenden, so müßte man bei Aufzeichnung der Intensitätsverteilung der gestreuten Elektronen, die bekanntlich bei verschiedenen Kameralängen vorgenommen wird, sehr darauf ach-

ten, daß man bei einer einmal gewählten Beschleunigungsspannung, z. B. 40 kV, arbeitet, um Fehler zu vermeiden, die durch Abweichung der Spannung vom einmal gewählten Wert in die Auswertung getragen werden. Das würde erfordern, daß man jedesmal vor der Durchführung eines Experiments viel Zeit darauf verwenden muß, um die Beschleunigungsspannung einzustellen. Diese Einstellung kann entweder durch eine sehr genaue Spannungsmessung, oder auch durch Beugungsaufnahmen eines Eichpräparates (z. B. ZnO, Au) erfolgen. Will man aber dieses Verfahren vermeiden, so kann man die Spannung U_B auch ungefähr auf den gewünschten Wert einstellen, den genauen Spannungswert dann durch eines der oben angeführten Verfahren feststellen und nun an die Auswertung der Aufnahmen gehen. Das erfordert dann Werte der Formfaktoren bei der jeweils verwendeten Beschleunigungsspannung. Es wurde nun in der vorliegenden Arbeit eine weitere Anpassung durchgeführt, die die Koeffizienten der einzelnen Polynome P und Q in Abhängigkeit von der Beschleunigungsspannung approximiert, und zwar:

$$\left. \begin{aligned} a_i &= \sum_{m=0}^2 A_{i,m} U^m = A_{i0} + A_{i1} U + A_{i2} U^2 \\ b_i &= \sum_{m=0}^2 B_{i,m} U^m = B_{i0} + B_{i1} U + B_{i2} U^2 \end{aligned} \right\} i = 0, 1, 2, 3, 4, \quad (3)$$

$$(4)$$

wobei U die Beschleunigungsspannung in kV bedeutet.

Zusammenfassend ergibt sich für die Beträge und Phasen der komplexen Formfaktoren folgende Darstellung

$$|f(s, U)| = \exp \left(\sum_{n=0}^4 \left(\sum_{m=0}^2 A_{n,m} U^m \right) s^n \right), \quad (5)$$

$$\eta(s) = \left(\sum_{n=0}^4 \left(\sum_{m=0}^2 B_{n,m} U^m \right) s^n \right). \quad (6)$$

Mit Hilfe dieser Näherung kann man nun die komplexen Formfaktoren im Spannungsbereich 40 U_B 120 kV berechnen.

Die Tab. 1 a und 1 b geben die nach den Formeln (5) und (6) errechneten Näherungswerte der Formfaktoren an. Ein Vergleich mit den nach dem WBK-Verfahren berechneten Werten zeigt gute Übereinstimmung der einzelnen Werte.

In den Tab. 3 a und 3 b sind die Koeffizienten $A_{n,m}$ und $B_{n,m}$ der Spannungsanpassung für die Atome der Kernladungszahlen 1 – 36 angegeben.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für finanzielle Unterstützung, die es ermöglichte, die umfangreichen Berechnungen am Deutschen Rechenzentrum in Darmstadt durchzuführen. Herrn Professor Dr. W. ZEIL danke ich für sein förderndes Interesse an dieser Arbeit.

Kohlenstoff $Z = 6$							Neon $Z = 10$					
s	$f(s)$	$U_B = 40 \text{ kV}$		$f(s)$	$U_B = 120 \text{ kV}$		$f(s)$	$U_B = 40 \text{ kV}$		$f(s)$	$U_B = 120 \text{ kV}$	
		$f(s)^1$	$f(s)^2$		$f(s)^1$	$f(s)^2$		$f(s)^1$	$f(s)^2$		$f(s)^1$	$f(s)^2$
5	0,6555	0,6570	0,6568	0,7527	0,7540	0,7539	0,8630	0,8024	0,8026	0,9960	0,9261	0,9266
10	0,1899	0,2017	0,2015	0,2178	0,2313	0,2311	0,3223	0,3240	0,3241	0,3722	0,3739	0,3741
15	0,0919	0,0906	0,0905	0,1053	0,1038	0,1036	0,1539	0,1588	0,1588	0,1773	0,1829	0,1831
20	0,0551	0,0526	0,0525	0,0630	0,0602	0,0601	0,0895	0,0908	0,0908	0,1028	0,1044	0,1045
25	0,0367	0,0357	0,0357	0,0420	0,0409	0,0408	0,0589	0,0586	0,0586	0,0676	0,0671	0,0672
30	0,0261	0,0264	0,0264	0,0298	0,0302	0,0301	0,0419	0,0413	0,0413	0,0480	0,0473	0,0473
35	0,0195	0,0201	0,0202	0,0222	0,0230	0,0229	0,0314	0,0311	0,0311	0,0359	0,0355	0,0356
40	0,0150	0,0154	0,0155	0,0172	0,0176	0,0175	0,0244	0,0244	0,0244	0,0279	0,0279	0,0279
45	0,0120	0,0119	0,0120	0,0137	0,0136	0,0135	0,0196	0,0197	0,0197	0,0223	0,0225	0,0225
50	0,0097	0,0094	0,0095	0,0111	0,0107	0,0107	0,0160	0,0161	0,0161	0,0182	0,0184	0,0184

Argon $Z = 18$						Krypton $Z = 36$						
s	$f(s)$	$U_B = 40 \text{ kV}$		$f(s)$	$U_B = 120 \text{ kV}$		$f(s)$	$U_B = 40 \text{ kV}$		$f(s)$	$U_B = 120 \text{ kV}$	
		$f(s)^1$	$f(s)^2$		$f(s)^1$	$f(s)^2$		$f(s)^1$	$f(s)^2$		$f(s)^1$	$f(s)^2$
5	1,4872	1,4905	1,4888	1,7340	1,6949	1,6991	2,1220	2,2599	2,2630	2,5729	2,7406	2,7375
10	0,4934	0,5252	0,5253	0,5705	0,6049	0,6053	0,8450	0,8670	0,8688	1,0289	1,0552	1,0543
15	0,2606	0,2552	0,2562	0,2986	0,3067	0,3053	0,4601	0,4468	0,4481	0,5534	0,5354	0,5354
20	0,1614	0,1541	0,1553	0,1834	0,1931	0,1912	0,2907	0,2813	0,2833	0,3395	0,3292	0,3297
25	0,1087	0,1064	0,1074	0,1224	0,1362	0,1344	0,2026	0,2004	0,2014	0,2310	0,2292	0,2299
30	0,0777	0,0788	0,0795	0,0869	0,1001	0,0987	0,1505	0,1524	0,1535	0,1692	0,1716	0,1723
35	0,0582	0,0601	0,0603	0,0648	0,0734	0,0726	0,1159	0,1190	0,1200	0,1300	0,1332	0,1339
40	0,0452	0,0462	0,0460	0,0501	0,0532	0,0529	0,0917	0,0933	0,0944	0,1036	0,1051	0,1057
45	0,0360	0,0358	0,0353	0,0400	0,0389	0,0387	0,0737	0,0733	0,0744	0,0844	0,0839	0,0845
50	0,0294	0,0285	0,0279	0,0326	0,0301	0,0300	0,0602	0,0586	0,0597	0,0702	0,0685	0,0691

Tab. 1 a. Zusammenstellung der Werte der Beträge der komplexen Formfaktoren für einige ausgewählte Atome: $f(s)$: numerisch ermittelte Werte ³, $f(s)^1$: nach Gl. (1) unter Verwendung der entsprechenden Koeffizienten der Tab. 2 a berechnete Werte. $f(s)^2$: nach Gl. (5) unter Verwendung der Koeffizienten der Tab. 3 a berechnete Werte.

Kohlenstoff $Z = 6$							Argon $Z = 18$					
	$U_B = 40 \text{ kV}$			$U_B = 120 \text{ kV}$			$U_B = 40 \text{ kV}$			$U_B = 120 \text{ kV}$		
s	$\eta(s)$	$\eta(s)^1$	$\eta(s)^2$	$\eta(s)$	$\eta(s)^1$	$\eta(s)^2$	$\eta(s)$	$\eta(s)^1$	$\eta(s)^2$	$\eta(s)$	$\eta(s)^1$	$\eta(s)^2$
5	0,1461	0,1567	0,1558	0,0926	0,0993	0,1001	0,3401	0,3653	0,3632	0,2166	0,2323	0,2337
10	0,2738	0,2680	0,2664	0,1734	0,1694	0,1707	0,6435	0,6264	0,6227	0,4091	0,3978	0,4003
15	0,3528	0,3502	0,3483	0,2224	0,2210	0,2227	0,8353	0,8321	0,8273	0,5317	0,5300	0,5330
20	0,4101	0,4118	0,4094	0,2582	0,2594	0,2614	0,9897	0,9962	0,9905	0,6326	0,6369	0,6403
25	0,4567	0,4593	0,4566	0,2876	0,2890	0,2911	1,1252	1,1300	1,1238	0,7220	0,7252	0,7288
30	0,4977	0,4982	0,4952	0,3129	0,3130	0,3153	1,2433	1,2430	1,2362	0,8005	0,8004	0,8040
35	0,5329	0,5321	0,5290	0,3345	0,3340	0,3363	1,3453	1,3420	1,3344	0,8686	0,8661	0,8698
40	0,5653	0,5636	0,5602	0,3538	0,3532	0,3556	1,4338	1,4310	1,4227	0,9269	0,9251	0,9288
45	0,5935	0,5934	0,5899	0,3720	0,3714	0,3737	1,5117	1,5120	1,5032	0,9783	0,9782	0,9819
50	0,6202	0,6201	0,6174	0,3870	0,3879	0,3902	1,5815	1,5840	1,5754	1,0229	1,0250	1,0289

Calcium $Z = 20$						Krypton $Z = 36$						
	$U_B = 40 \text{ kV}$			$U_B = 120 \text{ kV}$			$U_B = 40 \text{ kV}$			$U_B = 120 \text{ kV}$		
s	$\eta(s)$	$\eta(s)^1$	$\eta(s)^2$	$\eta(s)$	$\eta(s)^1$	$\eta(s)^2$	$\eta(s)$	$\eta(s)^1$	$\eta(s)^2$	$\eta(s)$	$\eta(s)^1$	$\eta(s)^2$
5	0,4145	0,4312	0,4212	0,2678	0,2754	0,2773	0,5507	0,5545	0,5535	0,3669	0,3664	0,3727
10	0,7430	0,7338	0,7304	0,4731	0,4683	0,4716	0,9583	0,9573	0,9549	0,6329	0,6311	0,6395
15	0,9704	0,9644	0,9605	0,6226	0,6173	0,6216	1,2923	1,2990	1,2957	0,8577	0,8634	0,8734
20	1,1369	1,1430	1,1392	0,7295	0,7345	0,7398	1,5880	1,5840	1,5798	1,0643	1,0640	1,0750
25	1,2783	1,2850	1,2833	0,8253	0,8298	0,8359	1,8234	1,8170	1,8125	1,2381	1,2340	1,2461
30	1,4034	1,4040	1,4060	0,9123	0,9106	0,9177	2,0048	2,0050	2,0003	1,3775	1,3760	1,3890
35	1,5130	1,5090	1,5170	0,9831	0,9823	0,9905	2,1502	2,1550	2,1508	1,4910	1,4930	1,5073
40	1,6099	1,6060	1,6228	1,0518	1,0480	1,0577	2,2726	2,2780	2,2729	1,5875	1,5900	1,6053
45	1,6962	1,6960	1,7264	1,1068	1,1080	1,1199	2,3828	2,3820	2,3766	1,6721	1,6720	1,6882
50	1,7742	1,7780	1,8276	1,1602	1,1610	1,1759	2,4852	2,4800	2,5753	1,7480	1,7450	1,7623

Tab. 1 b. Zusammenstellung der Werte der Phasen der komplexen Formfaktoren für einige ausgewählte Atome: $\eta(s)$: numerisch ermittelte Werte ³, $\eta(s)^1$: nach Gl. (2) unter Verwendung der entsprechenden Koeffizienten der Tab. 2 b berechnete Werte. $\eta(s)^2$: nach Gl. (6) unter Verwendung der Koeffizienten der Tab. 3 b berechnete Werte.

Z	U_B	a_0	a_1	$a_2 \cdot 10^2$	$a_3 \cdot 10^4$	$a_4 \cdot 10^6$	Z	U_B	a_0	a_1	$a_2 \cdot 10^2$	$a_3 \cdot 10^4$	$a_4 \cdot 10^6$
H 1	40	-0,2372	-0,4026	1,296	-2,176	1,394	Al 13	40	1,700	-0,3660	1,241	-2,212	1,488
	60	-0,1961	-0,4044	1,309	-2,203	1,412		60	1,739	-0,3654	1,235	-2,195	1,476
	80	-0,1654	-0,4030	1,296	-2,164	1,372		80	1,774	-0,3650	1,230	-2,184	1,467
	100	-0,1316	-0,4032	1,299	-2,174	1,384		100	1,808	-0,3649	1,228	-2,179	1,463
	120	-0,0975	-0,4041	1,308	-2,203	1,413		120	1,841	-0,3647	1,227	-2,177	1,461
He 2	40	-0,4165	-0,2707	0,6237	-0,7796	0,3811	Si 14	40	1,797	-0,3732	1,289	-2,321	1,572
	60	-0,4137	-0,2687	0,6238	-0,7943	0,3992		60	1,836	-0,3728	1,283	-2,307	1,562
	80	-0,3784	-0,2691	0,6275	-0,8065	0,4115		80	1,872	-0,3722	1,277	-2,293	1,550
	100	-0,3443	-0,2693	0,6293	-0,8099	0,4134		100	1,906	-0,3722	1,277	-2,293	1,551
	120	-0,3105	-0,2700	0,6365	-0,8339	0,4376		120	1,939	-0,3718	1,273	-2,284	1,543
Li 3	40	0,8461	-0,4517	1,698	-3,199	2,223	P 15	40	1,853	-0,3736	1,297	-2,343	1,588
	60	0,8815	-0,4518	1,699	-3,204	2,229		60	1,893	-0,3730	1,289	-2,323	1,573
	80	0,9169	-0,4520	1,700	-3,204	2,226		80	1,929	-0,3726	1,284	-2,313	1,566
	100	0,9504	-0,4521	1,701	-3,207	2,229		100	1,964	-0,3725	1,283	-2,308	1,563
	120	0,9825	-0,4520	1,701	-3,207	2,231		120	1,996	-0,3719	1,278	-2,296	1,553
Be 4	40	1,192	-0,4654	1,765	-3,317	2,293	S 16	40	1,886	-0,3696	1,277	-2,299	1,553
	60	1,229	-0,4660	1,770	-3,335	2,310		60	1,927	-0,3693	1,270	-2,281	1,539
	80	1,264	-0,4659	1,769	-3,332	2,308		80	1,963	-0,3688	1,264	-2,267	1,529
	100	1,300	-0,4668	1,777	-3,353	2,327		100	1,998	-0,3687	1,263	-2,265	1,528
	120	1,330	-0,4660	1,770	-3,332	2,306		120	2,031	-0,3683	1,259	-2,255	1,520
B 5	40	1,311	-0,4453	1,635	-3,005	2,045	Cl 17	40	1,896	-0,3622	1,237	-2,207	1,480
	60	1,346	-0,4448	1,632	-2,998	2,039		60	1,938	-0,3618	1,230	-2,189	1,467
	80	1,380	-0,4446	1,629	-2,990	2,032		80	1,975	-0,3615	1,225	-2,177	1,458
	100	1,414	-0,4448	1,631	-2,993	2,034		100	2,010	-0,3613	1,223	-2,173	1,456
	120	1,446	-0,4446	1,630	-2,991	2,032		120	2,044	-0,3612	1,221	-2,170	1,454
C 6	40	1,289	-0,4059	1,397	-2,458	1,622	Ar 18	40	1,889	-0,3519	1,180	-2,080	1,381
	60	1,326	-0,4055	1,394	-2,448	1,612		60	1,931	-0,3515	1,172	-2,056	1,363
	80	1,361	-0,4057	1,396	-2,453	1,617		80	1,968	-0,3508	1,163	-2,032	1,344
	100	1,395	-0,4057	1,395	-2,452	1,615		100	2,005	-0,3511	1,164	-2,039	1,351
	120	1,428	-0,4059	1,396	-2,456	1,620		120	2,074	-0,3735	1,420	-2,819	2,055
N 7	40	1,212	-0,3630	1,150	-1,906	1,204	K 19	40	2,095	-0,3828	1,362	-2,480	1,680
	60	1,249	-0,3626	1,146	-1,895	1,194		60	2,138	-0,3822	1,349	-2,447	1,655
	80	1,284	-0,3629	1,147	-1,898	1,196		80	2,177	-0,3821	1,346	-2,440	1,651
	100	1,318	-0,3628	1,146	-1,895	1,194		100	2,212	-0,3818	1,342	-2,431	1,645
	120	1,350	-0,3626	1,145	-1,891	1,190		120	2,246	-0,3816	1,340	-2,425	1,640
O 8	40	1,134	-0,3258	0,9412	-1,452	0,8659	Ca 20	40	2,220	-0,3984	1,454	-2,680	1,827
	60	1,171	-0,3257	0,9393	-1,447	0,8627		60	2,264	-0,3977	1,440	-2,642	1,797
	80	1,207	-0,3254	0,9368	-1,439	0,8551		80	2,303	-0,3975	1,435	-2,630	1,790
	100	1,240	-0,3253	0,9357	-1,437	0,8532		100	2,339	-0,3970	1,429	-2,617	1,780
	120	1,273	-0,3254	0,9362	-1,438	0,8545		120	2,372	-0,3967	1,425	-2,607	1,772
F 9	40	1,032	-0,2891	0,7419	-1,025	0,5515	Sc 21	40	2,220	-0,3893	1,399	-2,552	1,728
	60	1,071	-0,2891	0,7421	-1,027	0,5557		60	2,264	-0,3884	1,384	-2,513	1,696
	80	1,107	-0,2892	0,7421	-1,028	0,5559		80	2,304	-0,3881	1,378	-2,500	1,688
	100	1,140	-0,2888	0,7385	-1,016	0,5450		100	2,339	-0,3876	1,372	-2,484	1,676
	120	1,173	-0,2888	0,7386	-1,018	0,5473		120	2,372	-0,3871	1,368	-2,473	1,667
Ne 10	40	0,9238	-0,2556	0,5691	-0,6687	0,2976	Ti 22	40	2,207	-0,3805	1,348	-2,436	1,636
	60	0,9622	-0,2552	0,5656	-0,6606	0,2915		60	2,253	-0,3794	1,332	-2,391	1,602
	80	0,9982	-0,2551	0,5650	-0,6601	0,2916		80	2,293	-0,3791	1,326	-2,378	1,592
	100	1,033	-0,2551	0,5647	-0,6597	0,2916		100	2,328	-0,3784	1,318	-2,359	1,578
	120	1,065	-0,2547	0,5612	-0,6497	0,2824		120	2,362	-0,3782	1,315	-2,351	1,572
Na 11	40	1,335	-0,3208	0,9609	-1,565	0,9889	V 23	40	2,182	-0,3692	1,285	-2,294	1,528
	60	1,374	-0,3204	0,9564	-1,554	0,9799		60	2,228	-0,3680	1,267	-2,245	1,490
	80	1,409	-0,3202	0,9544	-1,549	0,9756		80	2,268	-0,3675	1,259	-2,227	1,477
	100	1,443	-0,3200	0,9525	-1,543	0,9705		100	2,304	-0,3667	1,251	-2,207	1,462
	120	1,475	-0,3196	0,9491	-1,534	0,9625		120	2,338	-0,3666	1,249	-2,203	1,460
Mg 12	40	1,546	-0,3483	1,130	-1,955	1,290	Cr 24	40	2,150	-0,3574	1,219	-2,149	1,418
	60	1,584	-0,3477	1,124	-1,938	1,277		60	2,197	-0,3560	1,200	-2,096	1,376
	80	1,619	-0,3473	1,120	-1,927	1,267		80	2,237	-0,3554	1,191	-2,075	1,362
	100	1,653	-0,3472	1,118	-1,925	1,266		100	2,273	-0,3546	1,183	-2,056	1,347
	120	1,687	-0,3473	1,119	-1,928	1,269		120	2,308	-0,3544	1,181	-2,052	1,345

Tab. 2 a.

Z	U_B	a_0	a_1	$a_2 \cdot 10^2$	$a_3 \cdot 10^4$	$a_4 \cdot 10^6$	Z	U_B	$b_0 \cdot 10^2$	$b_1 \cdot 10^2$	$b_2 \cdot 10^4$	$b_3 \cdot 10^6$	$b_4 \cdot 10^8$
Mn 25	40	2,113	-0,3453	1,153	-2,004	1,310	H 1	40	0,1904	0,7003	-1,962	2,878	-1,652
	60	2,161	-0,3439	1,133	-1,952	1,269		60	0,1560	0,5870	-1,651	2,415	-1,385
	80	2,201	-0,3429	1,122	-1,924	1,248		80	0,1347	0,5231	-1,486	2,189	-1,267
	100	2,237	-0,3420	1,113	-1,902	1,231		100	0,1256	0,4779	-1,351	1,975	-1,136
	120	2,272	-0,3419	1,111	-1,898	1,230		120	0,1205	0,4453	-1,254	1,822	-1,041
Fe 26	40	2,076	-0,3337	1,090	-1,868	1,209	Ne 2	40	0,8474	0,7290	-0,5841	-0,8866	1,359
	60	2,124	-0,3318	1,067	-1,806	1,160		60	0,7161	0,6094	-0,4917	-0,7547	1,148
	80	2,164	-0,3307	1,055	-1,777	1,139		80	0,6311	0,5417	-0,4417	-0,6755	1,030
	100	2,200	-0,3298	1,046	-1,755	1,122		100	0,5750	0,4971	-0,4122	-0,6066	0,9339
	120	2,236	-0,3295	1,043	-1,749	1,119		120	0,5396	0,4634	-0,3791	-0,5873	0,8906
Co 27	40	2,061	-0,3230	1,027	-1,726	1,102	Li 3	40	1,736	1,718	-5,046	8,539	-5,644
	60	2,110	-0,3209	1,003	-1,663	1,053		60	1,509	1,406	-3,970	6,440	-4,121
	80	2,124	-0,3186	0,9895	-1,637	1,035		80	1,316	1,250	-3,553	5,811	-3,765
	100	2,161	-0,3176	0,9804	-1,615	1,019		100	1,253	1,122	-3,065	4,766	-2,934
	120	2,195	-0,3171	0,9751	-1,603	1,011		120	1,112	1,065	-3,005	4,846	-3,091
Ni 28	40	1,994	-0,3109	0,9689	-1,610	1,020	Be 4	40	1,456	2,525	-8,134	14,40	-9,699
	60	2,042	-0,3083	0,9415	-1,539	0,9639		60	1,248	2,098	-6,718	11,83	-7,941
	80	2,083	-0,3069	0,9275	-1,506	0,9394		80	1,096	1,861	-5,988	10,59	-7,149
	100	2,120	-0,3058	0,9175	-1,482	0,9217		100	1,056	1,684	-5,323	9,238	-6,135
	120	2,154	-0,3052	0,9120	-1,470	0,9132		120	0,9656	1,578	-5,024	8,779	-5,868
Cu 29	40	1,951	-0,3000	0,9125	-1,492	0,9348	B 5	40	1,062	3,037	-9,499	16,49	-10,91
	60	2,000	-0,2971	0,8833	-1,417	0,8763		60	0,8187	2,604	-8,221	14,19	-9,331
	80	2,040	-0,2954	0,8680	-1,381	0,8495		80	0,7266	2,310	-7,315	12,65	-8,348
	100	2,077	-0,2942	0,8567	-1,354	0,8289		100	0,6972	2,104	-6,626	11,38	-7,470
	120	2,112	-0,2936	0,8518	-1,344	0,8225		120	0,6197	1,976	-6,290	10,93	-7,256
Zn 30	40	1,908	-0,2896	0,8597	-1,384	0,8576	C 6	40	0,6737	3,457	-9,940	15,85	-9,764
	60	1,957	-0,2864	0,8292	-1,307	0,7975		60	0,5873	2,886	-8,312	13,24	-8,165
	80	1,997	-0,2844	0,8116	-1,264	0,7654		80	0,5230	2,560	-7,400	11,83	-7,323
	100	2,034	-0,2832	0,8006	-1,239	0,7468		100	0,5004	2,338	-6,741	10,73	-6,624
	120	2,069	-0,2824	0,7940	-1,224	0,7361		120	0,4560	2,189	-6,360	10,21	-6,364
Ga 31	40	1,998	-0,3036	0,9464	-1,581	1,008	N 7	40	0,8921	3,546	-8,620	11,62	-6,089
	60	2,045	-0,2997	0,9111	-1,492	0,9384		60	0,7790	2,961	-7,215	9,710	-5,083
	80	2,086	-0,2975	0,8918	-1,446	0,9040		80	0,6952	2,627	-6,425	8,681	-4,567
	100	2,122	-0,2960	0,8789	-1,416	0,8819		100	0,6491	2,403	-5,875	7,919	-4,158
	120	2,157	-0,2952	0,8723	-1,402	0,8733		120	0,6007	2,248	-5,537	7,537	-4,013
Ge 32	40	2,065	-0,3130	1,005	-1,716	1,110	O 8	40	1,855	3,384	-5,820	4,051	0,06396
	60	2,111	-0,3087	0,9671	-1,619	1,035		60	1,315	2,922	-5,618	5,327	-1,494
	80	2,151	-0,3062	0,9454	-1,567	0,9971		80	1,172	2,595	-5,020	4,791	-1,374
	100	2,187	-0,3045	0,9311	-1,534	0,9725		100	1,084	2,376	-4,602	4,393	-1,261
	120	2,222	-0,3036	0,9242	-1,521	0,9640		120	1,005	2,223	-4,337	4,201	-1,264
As 33	40	2,111	-0,3186	1,043	-1,801	1,175	F 9	40	2,565	3,300	-4,060	-0,2826	3,442
	60	2,156	-0,3139	1,001	-1,694	1,092		60	2,166	2,766	-3,454	-0,1436	2,815
	80	2,196	-0,3112	0,9780	-1,641	1,053		80	1,932	2,457	-3,099	-0,07558	2,463
	100	2,232	-0,3093	0,9629	-1,607	1,028		100	1,773	2,251	-2,855	-0,04520	2,240
	120	2,267	-0,3083	0,9547	-1,590	1,017		120	1,657	2,104	-2,679	-0,02160	2,079
Se 34	40	2,146	-0,3222	1,067	-1,857	1,216	Ne 10	40	3,856	3,025	-1,187	-7,111	8,623
	60	2,192	-0,3173	1,024	-1,749	1,133		60	3,249	2,539	-1,056	-5,855	7,153
	80	2,231	-0,3143	0,9996	-1,691	1,090		80	2,902	2,253	-0,9538	-5,199	6,361
	100	2,267	-0,3124	0,9838	-1,655	1,064		100	2,657	2,068	-0,9132	-4,676	5,754
	120	2,301	-0,3112	0,9751	-1,637	1,053		120	2,484	1,933	-0,8647	-4,345	5,359
Br 35	40	2,169	-0,3234	1,078	-1,883	1,233	Na 11	40	4,150	3,903	-5,152	1,184	2,428
	60	2,215	-0,3183	1,034	-1,771	1,149		60	3,416	3,257	-4,223	0,7497	2,209
	80	2,254	-0,3153	1,009	-1,712	1,107		80	3,008	2,882	-3,686	0,5161	2,068
	100	2,290	-0,3132	0,9920	-1,673	1,078		100	2,769	2,623	-3,257	0,1321	2,195
	120	2,324	-0,3120	0,9823	-1,653	1,065		120	2,567	2,451	-3,061	0,1840	1,991
Kr 36	40	2,182	-0,3227	1,079	-1,884	1,232	Mg 12	40	4,513	4,506	-7,492	6,092	-1,331
	60	2,229	-0,3176	1,034	-1,771	1,147		60	3,773	3,747	-6,061	4,554	-0,6875
	80	2,268	-0,3145	1,008	-1,709	1,102		80	3,321	3,319	-5,346	4,001	-0,6182
	100	2,306	-0,3133	0,9989	-1,693	1,095		100	3,066	3,021	-4,763	3,298	-0,2517
	120	2,338	-0,3110	0,9799	-1,646	1,059		120	2,458	2,820	-4,451	3,095	-0,2542

Tab. 2 a. Zusammenstellung der Koeffizienten a_n zur Berechnung der Beträge der komplexen Formfaktoren nach Gl. (1) für die Atome der Kernladungszahlen 1–36. U_B =Beschleunigungsspannung in kV.

Tab. 2 b.

Z	U_B	$b_0 \cdot 10^2$	$b_1 \cdot 10^2$	$b_2 \cdot 10^4$	$b_3 \cdot 10^6$	$b_4 \cdot 10^8$	Z	U_B	$b_0 \cdot 10^2$	$b_1 \cdot 10^2$	$b_2 \cdot 10^4$	$b_3 \cdot 10^6$	$b_4 \cdot 10^8$
Al 13	40	4,746	5,123	—	9,981	11,38	Mn 25	40	3,704	9,332	—	19,19	21,30
	60	3,996	4,256	—	8,089	8,870		60	3,437	7,782	—	15,37	16,52
	80	3,525	3,770	—	7,136	7,820		80	3,206	6,895	—	13,42	14,41
	100	3,271	3,429	—	6,365	6,701		100	3,023	6,310	—	12,23	13,20
	120	3,051	3,196	—	5,915	6,193		120	3,364	5,977	—	11,49	10,56
Si 14	40	4,641	5,712	—	12,32	16,27	Fe 26	40	4,275	9,172	—	17,06	15,76
	60	3,947	4,743	—	9,994	12,88		60	3,957	7,648	—	13,55	11,77
	80	3,508	4,196	—	8,797	11,30		80	3,686	6,776	—	11,79	10,15
	100	3,267	3,816	—	7,858	9,856		100	3,470	6,202	—	10,72	9,273
	120	3,041	3,562	—	7,354	9,289		120	3,307	5,788	—	9,960	8,636
P 15	40	4,327	6,250	—	14,36	20,38	Co 27	40	4,906	9,162	—	15,29	10,47
	60	3,725	5,188	—	11,64	16,24		60	4,523	7,642	—	12,00	7,175
	80	3,334	4,586	—	10,22	14,22		80	4,266	6,619	—	9,991	5,626
	100	3,107	4,175	—	9,189	12,61		100	3,999	6,062	—	9,088	5,165
	120	2,860	3,911	—	8,710	12,19		120	3,800	5,661	—	8,454	4,855
S 16	40	3,947	6,738	—	16,06	23,64	Ni 28	40	5,794	8,717	—	12,28	3,881
	60	3,424	5,597	—	13,07	19,00		60	5,314	7,267	—	9,457	1,616
	80	3,088	4,946	—	11,46	16,64		80	4,934	6,438	—	8,118	1,033
	100	2,882	4,507	—	10,34	14,90		100	4,642	5,891	—	7,322	0,8350
	120	2,666	4,217	—	9,762	14,27		120	4,412	5,500	—	6,790	0,7673
Cl 17	40	3,511	7,173	—	17,46	26,13	Cu 29	40	6,684	8,448	—	9,778	—
	60	3,132	5,943	—	14,07	20,69		60	6,117	7,037	—	7,302	—
	80	2,857	5,248	—	12,30	18,04		80	5,667	6,236	—	6,199	—
	100	2,659	4,790	—	11,18	16,36		100	5,329	5,705	—	5,544	—
	120	2,518	4,462	—	10,38	15,19		120	5,058	5,328	—	5,134	—
Ar 18	40	3,268	7,487	—	17,97	26,26	Zn 30	40	7,642	8,160	—	7,270	—
	60	2,902	6,223	—	14,61	21,19		60	6,974	6,794	—	5,155	—
	80	2,667	5,495	—	12,77	18,49		80	6,460	6,018	—	4,261	—
	100	2,491	5,016	—	11,61	16,79		100	6,071	5,504	—	3,752	—
	120	2,365	4,673	—	10,78	15,61		120	5,761	5,141	—	3,457	—
K 19	40	3,385	8,394	—	21,82	33,82	Ga 31	40	7,799	8,543	—	8,598	—
	60	3,027	6,983	—	17,79	27,46		60	7,159	7,107	—	6,132	—
	80	2,782	6,173	—	15,61	24,12		80	6,640	6,294	—	5,082	—
	100	2,598	5,640	—	14,23	22,03		100	6,252	5,756	—	4,478	—
	120	2,430	5,269	—	13,34	20,82		120	5,933	5,376	—	4,130	—
Ca 20	40	3,320	9,087	—	24,40	38,22	Ge 32	40	8,057	8,872	—	9,677	—
	60	3,004	7,562	—	19,87	31,03		60	7,424	7,377	—	6,923	—
	80	2,778	6,686	—	17,44	27,29		80	6,908	6,529	—	5,724	—
	100	2,591	6,114	—	15,93	25,06		100	6,503	5,971	—	5,045	—
	120	2,439	5,708	—	14,90	23,59		120	6,180	5,577	—	4,649	—
Sc 21	40	3,096	9,315	—	24,26	36,86	As 33	40	8,311	9,165	—	10,56	—
	60	2,838	7,761	—	19,78	29,93		60	7,688	7,617	—	7,567	—
	80	2,629	6,871	—	17,39	26,39		80	7,161	6,740	—	6,246	—
	100	2,448	6,291	—	15,93	24,34		100	6,761	6,161	—	5,494	—
	120	2,306	5,876	—	14,91	22,92		120	6,420	5,755	—	5,06	—
Ti 22	40	2,907	9,467	—	23,89	34,90	Se 34	40	8,505	9,455	—	11,495	—
	60	2,685	7,892	—	19,44	28,21		60	7,895	7,856	—	8,247	—
	80	2,503	6,989	—	17,08	24,89		80	7,373	6,949	—	6,802	—
	100	2,343	6,398	—	15,63	22,92		100	6,975	6,348	—	5,954	—
	120	2,212	5,977	—	14,63	21,61		120	6,634	5,928	—	5,479	—
V 23	40	2,980	9,502	—	22,74	31,21	Br 35	40	8,645	9,732	—	12,37	—
	60	2,771	7,924	—	18,44	25,05		60	8,050	8,087	—	8,898	—
	80	2,593	7,017	—	16,18	22,03		80	7,550	7,146	—	7,294	—
	100	2,439	6,423	—	14,78	20,27		100	7,149	6,529	—	6,388	—
	120	2,314	5,997	—	13,80	19,02		120	6,812	6,094	—	5,851	—
Cr 24	40	3,252	9,455	—	21,16	26,62	Kr 36	40	8,736	9,999	—	13,23	—
	60	3,027	7,886	—	17,07	21,10		60	8,160	8,309	—	9,515	—
	80	2,826	6,986	—	14,95	18,51		80	7,680	7,338	—	7,765	—
	100	2,663	6,394	—	13,63	16,99		100	7,278	6,703	—	6,792	—
	120	2,547	5,965	—	12,68	15,84		120	6,948	6,253	—	6,200	—

Tab. 2 b.

Tab. 2 b. Zusammenstellung der Koeffizienten b_n zur Berechnung der Phasen der komplexen Formfaktoren nach Gl. (2) für die Atome der Kernladungszahlen 1–36. U_B =Beschleunigungsspannung in kV.

Z		a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
H 1	$A_{i,0}$	-0,3143	-0,4025	0,1304 (-01)	-0,2227 (-03)	0,1465 (-05)
	$A_{i,1}$	0,2028 (-02)	-0,1474 (-04)	-0,1585 (-05)	0,1389 (-06)	-0,2064 (-08)
	$A_{i,2}$	-0,1982 (-05)	0,3587 (-07)	0,1428 (-07)	-0,9464 (-09)	0,1321 (-10)
Ne 2	$A_{i,0}$	-0,4244	-0,2751	0,6280 (-02)	-0,7650 (-04)	0,3595 (-06)
	$A_{i,1}$	-0,3301 (-03)	0,1526 (-03)	-0,1959 (-05)	-0,3410 (-07)	0,5846 (-09)
	$A_{i,2}$	0,1086 (-04)	-0,9285 (-06)	0,2196 (-07)	-0,1750 (-09)	0,3214 (-12)
Li 3	$A_{i,0}$	0,7703	-0,4511	0,1695 (-01)	-0,3190 (-03)	0,2219 (-05)
	$A_{i,1}$	0,1951 (-02)	-0,1878 (-04)	0,9718 (-06)	-0,2950 (-07)	0,1371 (-09)
	$A_{i,2}$	-0,1518 (-05)	0,8923 (-07)	-0,3574 (-08)	0,1250 (-09)	-0,3571 (-12)
Be 4	$A_{i,0}$	0,1111 (+01)	-0,4634	0,1748 (-01)	-0,3269 (-03)	0,2237 (-05)
	$A_{i,1}$	0,2106 (-02)	-0,6141 (-04)	0,5135 (-05)	-0,1783 (-06)	0,1786 (-08)
	$A_{i,2}$	-0,2321 (-05)	0,3213 (-06)	-0,2678 (-07)	0,9643 (-09)	-0,9821 (-11)
B 5	$A_{i,0}$	0,1238 (+01)	-0,4464	0,1645 (-01)	-0,3030 (-03)	0,2062 (-05)
	$A_{i,1}$	0,1861 (-02)	0,3556 (-04)	-0,3121 (-05)	0,7650 (-07)	-0,5399 (-09)
	$A_{i,2}$	-0,1072 (-05)	-0,1785 (-06)	0,1607 (-07)	-0,3750 (-09)	0,2499 (-11)
C 6	$A_{i,0}$	0,1212 (+01)	-0,4064	0,1401 (-01)	-0,2475 (-03)	0,1641 (-05)
	$A_{i,1}$	0,1992 (-02)	0,2085 (-04)	-0,1478 (-05)	0,6286 (-07)	-0,6621 (-09)
	$A_{i,2}$	-0,1607 (-05)	-0,1428 (-06)	0,8925 (-08)	-0,3929 (-09)	0,4107 (-11)
N 7	$A_{i,0}$	0,1134 (+01)	-0,3630	0,1155 (-01)	-0,1917 (-03)	0,1215 (-05)
	$A_{i,1}$	0,2039 (-02)	0,2985 (-05)	-0,1643 (-05)	0,3785 (-07)	-0,3686 (-09)
	$A_{i,2}$	-0,1965 (-05)	0,9047 (-10)	0,7142 (-08)	-0,1428 (-09)	0,1428 (-11)
O 8	$A_{i,0}$	0,1055 (+01)	-0,3266	0,9495 (-02)	-0,1476 (-03)	0,8859 (-06)
	$A_{i,1}$	0,2049 (-02)	0,2313 (-04)	-0,2451 (-05)	0,7043 (-07)	-0,5815 (-09)
	$A_{i,2}$	-0,1965 (-05)	-0,1071 (-06)	0,1107 (-07)	-0,3214 (-09)	0,2625 (-11)
F 9	$A_{i,0}$	0,9492	-0,2889	0,7409 (-01)	-0,1020 (-03)	0,5438 (-06)
	$A_{i,1}$	0,2184 (-02)	-0,9787 (-05)	0,5758 (-05)	-0,2464 (-07)	0,3302 (-09)
	$A_{i,2}$	-0,2678 (-05)	0,8930 (-07)	-0,6786 (-07)	0,2322 (-09)	-0,2661 (-11)
Ne 10	$A_{i,0}$	0,8412	-0,2560	0,5721 (-02)	-0,6716 (-04)	0,2968 (-06)
	$A_{i,1}$	0,2166 (-02)	0,1236 (-04)	-0,9206 (-06)	0,8879 (-08)	0,2850 (-10)
	$A_{i,2}$	-0,2500 (-05)	-0,1788 (-07)	0,5353 (-09)	0,6607 (-10)	-0,1125 (-11)
Na 11	$A_{i,0}$	0,1253 (+01)	-0,3213	0,9680 (-02)	-0,1581 (-03)	0,1002 (-05)
	$A_{i,1}$	0,2174 (-02)	0,1398 (-04)	-0,2032 (-05)	0,4508 (-07)	-0,3452 (-09)
	$A_{i,2}$	-0,2679 (-05)	0,1384 (-09)	0,4109 (-08)	-0,5360 (-10)	0,2140 (-12)
Mg 12	$A_{i,0}$	0,1468 (+01)	-0,3503	0,1149 (-01)	-0,2010 (-03)	0,1336 (-05)
	$A_{i,1}$	0,2012 (-02)	0,6107 (-04)	-0,5971 (-05)	0,1735 (-06)	-0,1436 (-08)
	$A_{i,2}$	-0,1607 (-05)	-0,3035 (-07)	0,2857 (-07)	-0,8749 (-09)	0,7321 (-11)
Al 13	$A_{i,0}$	0,1619 (+01)	-0,3675	0,1259 (-01)	0,2260 (-03)	0,1523 (-05)
	$A_{i,1}$	0,2126 (-02)	0,4692 (-04)	-0,5464 (-05)	0,1459 (-06)	-0,1049 (-08)
	$A_{i,2}$	-0,2321 (-05)	-0,1963 (-06)	0,2321 (-07)	-0,6429 (-09)	0,4464 (-11)
Si 14	$A_{i,0}$	0,1714 (+01)	-0,3744	0,1305 (-01)	-0,2359 (-03)	0,1600 (-05)
	$A_{i,1}$	0,2170 (-02)	0,3413 (-04)	-0,4756 (-05)	0,1126 (-06)	-0,8306 (-09)
	$A_{i,2}$	-0,2500 (-05)	-0,1070 (-06)	0,1785 (-07)	-0,4285 (-09)	0,3035 (-11)
P 15	$A_{i,0}$	0,1767 (+01)	-0,3746	0,1314 (-01)	-0,2381 (-03)	0,1615 (-05)
	$A_{i,1}$	0,2271 (-02)	0,2806 (-04)	-0,5057 (-05)	0,1145 (-06)	-0,8000 (-09)
	$A_{i,2}$	-0,3036 (-05)	-0,5349 (-07)	0,1786 (-07)	-0,3750 (-09)	0,2500 (-11)
S 16	$A_{i,0}$	0,1800 (+01)	-0,3704	0,1295 (-01)	-0,2343 (-03)	0,1586 (-05)
	$A_{i,1}$	0,2291 (-02)	0,2171 (-04)	-0,5293 (-05)	0,1320 (-06)	-0,9850 (-09)
	$A_{i,2}$	-0,3036 (-05)	-0,3570 (-07)	0,1964 (-07)	-0,5000 (-09)	0,3750 (-11)
Cl 17	$A_{i,0}$	0,1807 (+01)	-0,3633	0,1256 (-01)	-0,2257 (-03)	0,1517 (-05)
	$A_{i,1}$	0,2354 (-02)	0,3247 (-04)	-0,5664 (-05)	0,1536 (-06)	-0,1144 (-08)
	$A_{i,2}$	-0,3215 (-05)	-0,1248 (-06)	0,2322 (-07)	-0,6785 (-09)	0,5178 (-11)
Ar 18	$A_{i,0}$	0,1850 (+01)	-0,3852	0,1569 (-01)	-0,3260 (-03)	0,2434 (-05)
	$A_{i,1}$	0,6771 (-03)	0,1117 (-02)	-0,1301 (-03)	0,3952 (-05)	-0,3532 (-07)
	$A_{i,2}$	0,9643 (-05)	-0,8321 (-05)	0,9607 (-06)	-0,2927 (-07)	0,2625 (-09)
K 19	$A_{i,0}$	0,2001 (+01)	-0,3838	0,1389 (-01)	-0,2547 (-03)	0,1728 (-05)
	$A_{i,1}$	0,2509 (-02)	0,3113 (-04)	-0,8550 (-05)	0,2116 (-06)	-0,1536 (-08)
	$A_{i,2}$	-0,3928 (-05)	-0,1071 (-06)	0,3750 (-07)	-0,9285 (-09)	0,6786 (-11)
Ca 20	$A_{i,0}$	0,2123 (+01)	-0,3996	0,1483 (-01)	-0,2759 (-03)	0,1885 (-05)
	$A_{i,1}$	0,2609 (-02)	0,3478 (-04)	-0,8879 (-05)	0,2426 (-06)	-0,1806 (-08)
	$A_{i,2}$	-0,4464 (-05)	-0,8928 (-07)	0,3393 (-07)	-0,9822 (-09)	0,7321 (-11)

Tab. 3 a.

Z		a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
Sc 21	$A_{i,0}$	0,2121 (+ 01)	- 0,3908	0,1432 (- 01)	- 0,2632 (- 03)	0,1790 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2667 (- 02)	0,4314 (- 04)	- 0,9985 (- 05)	0,2449 (- 06)	- 0,1910 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,4822 (- 05)	- 0,1071 (- 06)	0,3928 (- 07)	- 0,9464 (- 09)	0,7500 (- 11)
Ti 22	$A_{i,0}$	0,2106 (+ 01)	- 0,3828	0,1384 (- 01)	0,4045 (- 03)	0,1709 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2754 (- 02)	0,6798 (- 04)	- 0,1086 (- 04)	- 0,1443 (- 04)	- 0,2246 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,5179 (- 05)	- 0,2499 (- 06)	0,4286 (- 07)	0,7709 (- 07)	0,9285 (- 11)
V 23	$A_{i,0}$	0,2081 (+ 01)	- 0,3721	0,1329 (- 01)	- 0,2411 (- 03)	0,1619 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2740 (- 02)	0,8676 (- 04)	- 0,1354 (- 04)	0,3614 (- 06)	- 0,2820 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,5000 (- 05)	- 0,3391 (- 06)	0,5714 (- 07)	- 0,1571 (- 08)	0,1250 (- 10)
Cr 24	$A_{i,0}$	0,2048 (+ 01)	- 0,3607	0,1267 (- 01)	- 0,2279 (- 03)	0,1519 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2760 (- 02)	0,9985 (- 04)	- 0,1465 (- 04)	0,4027 (- 06)	- 0,3132 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,5000 (- 05)	- 0,3928 (- 06)	0,6250 (- 07)	- 0,1786 (- 08)	0,1411 (- 10)
Mn 25	$A_{i,0}$	0,2909 (+ 01)	- 0,3494	0,1206 (- 01)	- 0,2143 (- 03)	0,1421 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2827 (- 02)	0,1206 (- 03)	- 0,1606 (- 04)	0,4224 (- 06)	- 0,3390 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,5357 (- 05)	- 0,4821 (- 06)	0,6786 (- 07)	- 0,1821 (- 08)	0,1500 (- 10)
Fe 26	$A_{i,0}$	0,1974 (+ 01)	- 0,3387	0,1149 (- 01)	- 0,2026 (- 03)	0,1333 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2780 (- 02)	0,1491 (- 03)	- 0,1804 (- 04)	0,4845 (- 06)	- 0,3833 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,4999 (- 05)	- 0,6071 (- 06)	0,7679 (- 07)	- 0,2125 (- 08)	0,1714 (- 10)
Co 27	$A_{i,0}$	0,1996 (+ 01)	- 0,3300	0,1087 (- 01)	- 0,1872 (- 03)	0,1214 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,1795 (- 02)	0,2041 (- 03)	- 0,1826 (- 04)	0,4499 (- 06)	- 0,3480 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,1250 (- 05)	- 0,8036 (- 06)	0,7464 (- 07)	- 0,1893 (- 08)	0,1500 (- 10)
Ni 28	$A_{i,0}$	0,1887 (+ 01)	- 0,3173	0,1036 (- 01)	- 0,1783 (- 03)	0,1156 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2904 (- 02)	0,1924 (- 03)	- 0,2055 (- 04)	0,5314 (- 06)	- 0,4193 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,5715 (- 05)	- 0,7678 (- 06)	0,8536 (- 07)	- 0,2268 (- 08)	0,1821 (- 10)
Cu 29	$A_{i,0}$	0,1845 (+ 01)	- 0,3074	0,9863 (- 02)	- 0,1680 (- 03)	0,1082 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2881 (- 02)	0,2242 (- 03)	- 0,2243 (- 04)	0,5766 (- 06)	- 0,4514 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,5536 (- 05)	- 0,9107 (- 06)	0,9393 (- 07)	- 0,2482 (- 08)	0,1971 (- 10)
Zn 30	$A_{i,0}$	0,1802 (+ 01)	- 0,2978	0,9374 (- 02)	- 0,1581 (- 03)	0,1010 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2881 (- 02)	0,2480 (- 03)	- 0,2354 (- 04)	0,5997 (- 06)	- 0,4677 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,5536 (- 05)	- 0,9999 (- 06)	0,9714 (- 07)	- 0,2536 (- 08)	0,2005 (- 10)
Ga 31	$A_{i,0}$	0,1895 (+ 01)	- 0,3135	0,1036 (- 01)	- 0,1807 (- 03)	0,1186 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2804 (- 02)	0,2996 (- 03)	- 0,2725 (- 04)	0,6913 (- 06)	- 0,5467 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,5179 (- 05)	- 0,1232 (- 05)	0,1139 (- 06)	- 0,2964 (- 08)	0,2398 (- 10)
Ge 32	$A_{i,0}$	0,1965 (+ 01)	- 0,3240	0,1103 (- 01)	- 0,1968 (- 03)	0,1304 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2693 (- 02)	0,3321 (- 03)	- 0,2971 (- 04)	0,7718 (- 06)	- 0,5952 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,4643 (- 05)	- 0,1357 (- 05)	0,1239 (- 06)	- 0,3339 (- 08)	0,2612 (- 10)
As 33	$A_{i,0}$	0,2013 (+ 01)	- 0,3305	0,1149 (- 01)	- 0,2069 (- 03)	0,1383 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2626 (- 01)	0,3603 (- 03)	- 0,3231 (- 04)	0,8231 (- 06)	- 0,6414 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,4285 (- 05)	- 0,1464 (- 05)	0,1348 (- 06)	- 0,3554 (- 08)	0,2821 (- 10)
Se 34	$A_{i,0}$	0,2046 (+ 01)	- 0,3347	0,1177 (- 01)	- 0,2133 (- 03)	0,1430 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2696 (- 02)	0,3774 (- 03)	- 0,3326 (- 04)	0,8441 (- 06)	- 0,6575 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,4822 (- 05)	- 0,1518 (- 05)	0,1379 (- 06)	- 0,3607 (- 08)	0,2875 (- 10)
Br 35	$A_{i,0}$	0,2069 (+ 01)	- 0,3363	0,1189 (- 01)	- 0,2166 (- 03)	0,1444 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2696 (- 02)	0,3881 (- 03)	- 0,3356 (- 04)	0,8619 (- 06)	- 0,6464 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,4822 (- 05)	- 0,1553 (- 05)	0,1368 (- 06)	- 0,3643 (- 08)	0,2768 (- 10)
Kr 36	$A_{i,0}$	0,2078 (+ 01)	- 0,3344	0,1182 (- 01)	- 0,2140 (- 03)	0,1422 (- 05)
	$A_{i,1}$	0,2831 (- 02)	0,3528 (- 03)	- 0,3121 (- 04)	0,7856 (- 06)	- 0,5876 (- 08)
	$A_{i,2}$	- 0,5536 (- 05)	- 0,1339 (- 05)	0,1220 (- 06)	- 0,3179 (- 08)	0,2429 (- 10)

Tab. 3 a. Zusammenstellung der Koeffizienten $A_{n,m}$ zur Berechnung der Beträge der komplexen Formfaktoren nach Gl. (5) für die Atome der Kernladungszahlen 1–36 (die in Klammer gestellten Zahlen geben die Zehnerpotenz der Werte an).

Z		a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
H 1	$B_{i,0}$	0,2843 (−02)	0,9745 (−02)	−0,2685 (−03)	0,3909 (−05)	−0,2135 (−07)
	$B_{i,1}$	−0,2874 (−04)	−0,8241 (−04)	0,2167 (−05)	−0,3082 (−07)	0,1500 (−09)
	$B_{i,2}$	0,1264 (−06)	0,3216 (−06)	−0,8179 (−08)	0,1129 (−09)	−0,4946 (−12)
Ne 2	$B_{i,0}$	0,1185 (−01)	0,1020 (−01)	−0,7967 (−04)	−0,1236 (−05)	0,1890 (−07)
	$B_{i,1}$	−0,1009 (−03)	−0,8786 (−04)	0,6422 (−06)	0,1046 (−07)	−0,1596 (−09)
	$B_{i,2}$	0,3941 (−06)	0,3480 (−06)	−0,2484 (−08)	−0,4205 (−10)	0,6380 (−12)
Li 3	$B_{i,0}$	0,2289 (−01)	0,2486 (−01)	−0,7684 (−03)	0,1365 (−04)	−0,9313 (−07)
	$B_{i,1}$	−0,1615 (−03)	−0,2332 (−03)	0,8096 (−05)	−0,1579 (−06)	0,1139 (−08)
	$B_{i,2}$	0,5393 (−06)	0,9607 (−06)	−0,3502 (−07)	0,7039 (−09)	−0,5152 (−11)
Be 4	$B_{i,0}$	0,1981 (−01)	0,4601 (−01)	−0,1158 (−02)	0,2061 (−04)	−0,1391 (−06)
	$B_{i,1}$	−0,1578 (−03)	−0,6035 (−03)	0,1038 (−04)	−0,1866 (−06)	0,1262 (−08)
	$B_{i,2}$	0,6200 (−06)	0,2163 (−05)	−0,4105 (−07)	0,7339 (−09)	−0,4929 (−11)
B 5	$B_{i,0}$	0,1582 (−01)	0,4153 (−01)	−0,1290 (−02)	0,2267 (−04)	−0,1517 (−06)
	$B_{i,1}$	−0,1630 (−03)	−0,3305 (−03)	0,1001 (−04)	−0,1831 (−06)	0,1268 (−08)
	$B_{i,2}$	0,7041 (−06)	0,1246 (−05)	−0,3752 (−07)	0,7089 (−09)	−0,5062 (−11)
C 6	$B_{i,0}$	0,8827 (−02)	0,4868 (−01)	−0,1399 (−02)	0,2238 (−04)	−0,1381 (−06)
	$B_{i,1}$	−0,6203 (−04)	−0,4251 (−03)	0,1221 (−04)	−0,1972 (−06)	0,1223 (−08)
	$B_{i,2}$	0,2245 (−06)	0,1693 (−05)	−0,4905 (−07)	0,8018 (−09)	−0,5037 (−11)
N 7	$B_{i,0}$	0,1175 (−01)	0,4989 (−01)	−0,1211 (−02)	0,1989 (−04)	−0,8642 (−07)
	$B_{i,1}$	−0,8338 (−04)	−0,4348 (−03)	0,1054 (−04)	−0,3507 (−06)	0,7764 (−09)
	$B_{i,2}$	0,2984 (−06)	0,1732 (−05)	−0,4239 (−07)	0,2154 (−08)	−0,3266 (−11)
O 8	$B_{i,0}$	0,3036 (−01)	0,4573 (−01)	−0,6726 (−03)	0,2008 (−05)	0,3006 (−07)
	$B_{i,1}$	−0,3757 (−03)	−0,3508 (−03)	0,2145 (−05)	0,7677 (−07)	−0,1008 (−08)
	$B_{i,2}$	0,1745 (−05)	0,1296 (−05)	−0,9642 (−09)	−0,4996 (−09)	0,5541 (−11)
F 9	$B_{i,0}$	0,3543 (−01)	0,4615 (−01)	−0,5545 (−03)	−0,6303 (−06)	0,4989 (−07)
	$B_{i,1}$	−0,2936 (−03)	−0,3959 (−03)	0,4455 (−05)	0,1077 (−07)	−0,4682 (−09)
	$B_{i,2}$	0,1145 (−05)	0,1566 (−05)	−0,1734 (−07)	−0,4794 (−10)	0,1895 (−11)
Ne 10	$B_{i,0}$	0,5334 (−01)	0,4229 (−01)	−0,1537 (−03)	−0,1010 (−04)	0,1216 (−06)
	$B_{i,1}$	−0,4439 (−03)	−0,3622 (−03)	0,1041 (−05)	0,9021 (−07)	−0,1063 (−08)
	$B_{i,2}$	0,1732 (−05)	0,1434 (−05)	−0,4046 (−08)	−0,3541 (−09)	0,4170 (−11)
Na 11	$B_{i,0}$	0,5940 (−01)	0,5502 (−01)	−0,7509 (−03)	0,2422 (−05)	0,2831 (−07)
	$B_{i,1}$	−0,5429 (−03)	−0,4809 (−03)	0,7071 (−05)	−0,3657 (−07)	−0,1295 (−09)
	$B_{i,2}$	0,2202 (−05)	0,1900 (−05)	−0,2811 (−07)	0,1468 (−09)	0,5321 (−12)
Mg 12	$B_{i,0}$	0,6356 (−01)	0,6368 (−01)	−0,1094 (−02)	0,9628 (−05)	−0,2659 (−07)
	$B_{i,1}$	−0,5550 (−03)	−0,5609 (−03)	0,1046 (−04)	−0,1082 (−06)	0,4137 (−09)
	$B_{i,2}$	0,2205 (−05)	0,2225 (−05)	−0,4232 (−07)	0,4500 (−09)	−0,1776 (−11)
Al 13	$B_{i,0}$	0,6641 (−01)	0,7240 (−01)	−0,1451 (−02)	0,1714 (−04)	−0,8360 (−07)
	$B_{i,1}$	−0,5706 (−03)	−0,6378 (−03)	0,1369 (−04)	−0,1751 (−06)	0,9076 (−09)
	$B_{i,2}$	0,2280 (−05)	0,2523 (−05)	−0,5475 (−07)	−0,5027 (−09)	−0,3598 (−11)
Si 14	$B_{i,0}$	0,6367 (−01)	0,8094 (−01)	−0,1799 (−02)	0,2450 (−04)	−0,1394 (−06)
	$B_{i,1}$	−0,5180 (−03)	−0,7176 (−03)	0,1718 (−04)	−0,2501 (−06)	0,1478 (−08)
	$B_{i,2}$	0,2025 (−05)	0,2852 (−05)	−0,6968 (−07)	0,1033 (−08)	−0,6155 (−11)
P 15	$B_{i,0}$	0,5765 (−01)	0,8885 (−01)	−0,2120 (−02)	0,3098 (−04)	−0,1871 (−06)
	$B_{i,1}$	−0,4273 (−03)	−0,7951 (−03)	0,2079 (−04)	−0,3243 (−06)	0,2030 (−08)
	$B_{i,2}$	0,1561 (−05)	0,3191 (−05)	−0,8698 (−07)	0,1402 (−08)	−0,8998 (−11)
S 16	$B_{i,0}$	0,5187 (−01)	0,9568 (−01)	−0,2358 (−02)	0,3547 (−04)	−0,2179 (−06)
	$B_{i,1}$	−0,3678 (−03)	−0,8535 (−03)	0,2285 (−04)	−0,3611 (−06)	0,2262 (−08)
	$B_{i,2}$	0,1329 (−05)	0,3418 (−05)	−0,9489 (−07)	0,1543 (−08)	−0,9863 (−11)
Cl 17	$B_{i,0}$	0,4472 (−01)	0,1019	−0,2573 (−02)	0,3928 (−04)	−0,2430 (−06)
	$B_{i,1}$	−0,2810 (−03)	−0,9119 (−03)	0,2518 (−04)	−0,4028 (−06)	0,2526 (−08)
	$B_{i,2}$	0,9875 (−06)	0,3645 (−05)	−0,1041 (−06)	0,1698 (−08)	−0,1076 (−10)
Ar 18	$B_{i,0}$	0,4164 (−01)	0,1060	−0,2624 (−02)	−0,3873 (−04)	−0,2300 (−06)
	$B_{i,1}$	−0,2649 (−03)	−0,9392 (−03)	0,2509 (−04)	−0,3794 (−06)	0,2219 (−08)
	$B_{i,2}$	0,9625 (−06)	0,3734 (−05)	−0,1025 (−06)	0,1568 (−08)	−0,9161 (−11)
K 19	$B_{i,0}$	0,4221 (−01)	0,1189	−0,3185 (−02)	0,4977 (−04)	−0,3062 (−06)
	$B_{i,1}$	−0,2430 (−03)	−0,1053 (−02)	0,3049 (−04)	−0,4871 (−06)	0,2962 (−08)
	$B_{i,2}$	0,7875 (−06)	0,4209 (−05)	−0,1264 (−06)	0,2062 (−08)	−0,1268 (−10)
Ca 20	$B_{i,0}$	0,4063 (−01)	0,1286	−0,3560 (−02)	0,5608 (−04)	−0,3129 (−06)
	$B_{i,1}$	−0,2136 (−03)	−0,1137 (−02)	0,3410 (−04)	−0,5461 (−06)	0,2595 (−08)
	$B_{i,2}$	0,6554 (−06)	0,4539 (−05)	−0,1414 (−06)	0,2312 (−08)	−0,1039 (−10)

Tab. 3 b.

Z		b_0	b_1	b_2	b_3	b_4
Sc 21	$B_{i,0}$	0,3711 (− 01)	0,1315	− 0,3532 (− 02)	0,5399 (− 04)	− 0,3211 (− 06)
	$B_{i,1}$	− 0,1728 (− 03)	− 0,1157 (− 02)	0,3370 (− 04)	− 0,5248 (− 06)	0,3061 (− 08)
	$B_{i,2}$	0,4643 (− 06)	0,4621 (− 05)	− 0,1402 (− 06)	0,2234 (− 08)	− 0,1321 (− 10)
Ti 22	$B_{i,0}$	0,3427 (− 01)	0,1335	− 0,3488 (− 02)	0,5136 (− 04)	− 0,2941 (− 06)
	$B_{i,1}$	− 0,1449 (− 03)	− 0,1172 (− 02)	0,3348 (− 04)	− 0,5053 (− 06)	0,2892 (− 08)
	$B_{i,2}$	0,3643 (− 06)	0,4679 (− 05)	− 0,1395 (− 06)	0,2162 (− 08)	− 0,1279 (− 10)
V 23	$B_{i,0}$	0,3477 (− 01)	0,1339	− 0,3330 (− 02)	0,4626 (− 04)	− 0,2467 (− 06)
	$B_{i,1}$	− 0,1381 (− 03)	− 0,1173 (− 02)	0,3220 (− 04)	− 0,4624 (− 06)	0,2417 (− 08)
	$B_{i,2}$	0,3429 (− 06)	0,4673 (− 05)	− 0,1339 (− 06)	0,1979 (− 08)	− 0,1050 (− 10)
Cr 24	$B_{i,0}$	0,3829 (− 01)	0,1331	− 0,3114 (− 02)	0,3989 (− 04)	− 0,1917 (− 06)
	$B_{i,1}$	− 0,1618 (− 03)	− 0,1163 (− 02)	0,3043 (− 04)	− 0,4086 (− 06)	0,1950 (− 08)
	$B_{i,2}$	0,4571 (− 06)	0,4621 (− 05)	− 0,1264 (− 06)	0,1752 (− 08)	− 0,8461 (− 11)
Mn 25	$B_{i,0}$	0,5048 (− 01)	0,1327	− 0,2868 (− 02)	0,3030 (− 04)	− 0,9144 (− 07)
	$B_{i,1}$	− 0,4158 (− 03)	− 0,1191 (− 02)	0,2904 (− 04)	− 0,2720 (− 06)	0,1015 (− 09)
	$B_{i,2}$	0,2257 (− 05)	0,4886 (− 05)	− 0,1236 (− 06)	0,9250 (− 09)	0,3720 (− 11)
Fe 26	$B_{i,0}$	0,5073 (− 01)	0,1292	− 0,2562 (− 02)	0,2520 (− 04)	− 0,7166 (− 07)
	$B_{i,1}$	− 0,2254 (− 03)	− 0,1130 (− 02)	0,2620 (− 04)	− 0,2952 (− 06)	0,1008 (− 08)
	$B_{i,2}$	0,6518 (− 06)	0,4496 (− 05)	− 0,1105 (− 06)	0,1323 (− 08)	− 0,4937 (− 11)
Co 27	$B_{i,0}$	0,5751 (− 01)	0,1317	− 0,2402 (− 02)	0,1901 (− 04)	− 0,1391 (− 07)
	$B_{i,1}$	− 0,2391 (− 03)	− 0,1202 (− 02)	0,2663 (− 04)	− 0,2679 (− 06)	0,6357 (− 09)
	$B_{i,2}$	0,6393 (− 06)	0,4829 (− 05)	− 0,1146 (− 06)	0,1260 (− 08)	− 0,3764 (− 11)
Ni 28	$B_{i,0}$	0,6982 (− 01)	0,1229	− 0,1916 (− 02)	0,9209 (− 05)	0,5455 (− 07)
	$B_{i,1}$	− 0,3398 (− 03)	− 0,1076 (− 02)	0,2120 (− 04)	− 0,1716 (− 04)	− 0,2303 (− 10)
	$B_{i,2}$	0,1050 (− 05)	0,4286 (− 05)	− 0,9152 (− 07)	0,8535 (− 09)	− 0,1177 (− 11)
Cu 29	$B_{i,0}$	0,8091 (− 01)	0,1192	− 0,1579 (− 02)	0,1187 (− 05)	0,1160 (− 06)
	$B_{i,1}$	− 0,4031 (− 03)	− 0,1047 (− 02)	0,1861 (− 04)	− 0,1102 (− 06)	− 0,4501 (− 09)
	$B_{i,2}$	0,1257 (− 05)	0,4175 (− 05)	− 0,8179 (− 07)	0,6223 (− 09)	0,6107 (− 12)
Zn 30	$B_{i,0}$	0,9289 (− 01)	0,1154	− 0,1242 (− 02)	− 0,6628 (− 05)	0,1747 (− 06)
	$B_{i,1}$	− 0,4735 (− 03)	− 0,1018 (− 02)	0,1601 (− 04)	− 0,5041 (− 07)	− 0,9018 (− 09)
	$B_{i,2}$	0,1502 (− 05)	0,4071 (− 05)	− 0,7187 (− 07)	0,3946 (− 09)	0,2339 (− 11)
Ga 31	$B_{i,0}$	0,9385 (− 01)	0,1208	− 0,1460 (− 02)	− 0,2780 (− 05)	0,1495 (− 06)
	$B_{i,1}$	− 0,4528 (− 03)	− 0,1066 (− 02)	0,1867 (− 04)	− 0,9789 (− 07)	− 0,6116 (− 09)
	$B_{i,2}$	0,1380 (− 05)	0,4262 (− 05)	− 0,8361 (− 07)	0,6100 (− 09)	0,1011 (− 11)
Ge 32	$B_{i,0}$	0,9615 (− 01)	0,1256	− 0,1641 (− 02)	0,3976 (− 06)	0,1287 (− 06)
	$B_{i,1}$	− 0,4426 (− 03)	− 0,1112 (− 02)	0,2093 (− 04)	− 0,1382 (− 06)	− 0,3721 (− 09)
	$B_{i,2}$	0,1305 (− 05)	0,4450 (− 05)	− 0,9350 (− 07)	0,7918 (− 09)	− 0,6073 (− 13)
As 33	$B_{i,0}$	0,9843 (− 01)	0,1298	− 0,1791 (− 02)	0,2656 (− 05)	0,1159 (− 06)
	$B_{i,1}$	− 0,4329 (− 03)	− 0,1152 (− 02)	0,2281 (− 04)	− 0,1661 (− 06)	− 0,2463 (− 09)
	$B_{i,2}$	0,1234 (− 05)	0,4611 (− 05)	− 0,1017 (− 06)	0,9184 (− 09)	− 0,6411 (− 12)
Se 34	$B_{i,0}$	0,1000	0,1340	− 0,1945 (− 02)	0,5052 (− 05)	0,1021 (− 06)
	$B_{i,1}$	− 0,4222 (− 03)	− 0,1189 (− 02)	0,2468 (− 04)	− 0,1940 (− 06)	− 0,1255 (− 09)
	$B_{i,2}$	0,1182 (− 05)	0,4757 (− 05)	− 0,1096 (− 06)	0,1037 (− 08)	− 0,1118 (− 11)
Br 35	$B_{i,0}$	0,1008	0,1380	− 0,2095 (− 02)	0,4532 (− 05)	0,9136 (− 07)
	$B_{i,1}$	− 0,4041 (− 03)	− 0,1226 (− 02)	0,2654 (− 04)	− 0,1599 (− 06)	− 0,4443 (− 10)
	$B_{i,2}$	0,1098 (− 05)	0,4900 (− 05)	− 0,1173 (− 06)	0,8282 (− 09)	− 0,1429 (− 11)
Kr 36	$B_{i,0}$	0,1011	0,1418	− 0,2244 (− 02)	0,9205 (− 05)	0,7972 (− 07)
	$B_{i,1}$	− 0,3858 (− 03)	− 0,1259 (− 02)	0,2846 (− 04)	− 0,2455 (− 06)	0,9310 (− 10)
	$B_{i,2}$	0,1018 (− 05)	0,5029 (− 05)	− 0,1254 (− 06)	0,1262 (− 08)	− 0,2100 (− 11)

Tab. 3 b. Zusammenstellung der Koeffizienten $B_{n,m}$ zur Berechnung der Phasen der komplexen Formfaktoren nach Gl. (6) für die Atome der Kernladungszahlen 1–36 (die in Klammer gestellten Zahlen geben die Zehnerpotenz der Werte an).