

where η_V is the volume (bulk) viscosity and ξ is a cross coefficient which vanishes for $\mathbf{H} = 0$. Hence, for the non-divergent flow between two flat plates the cross-effect gives rise to an additional static pressure gradient

$$\nabla p_{\text{add}} = 3 \xi v'' h_y h_z \mathbf{n}, \quad (\text{A.50})$$

which has only a component parallel to \mathbf{n} .

The total static pressure gradient in \mathbf{n} -direction induced by a magnetic field is given by the sum of (A.48) and (A.50); e. g. if \mathbf{h} is perpendicular to $\mathbf{n} \times \mathbf{v}$ one has

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \delta p_{\text{tot}} = \frac{2\sqrt{2}}{9} \eta v'' (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) + \sqrt{2} \xi v'' \quad \text{for} \quad h_y = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad h_z = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

$$\text{and} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \delta p_{\text{tot}} = \frac{1}{4} \eta v'' (\varepsilon_0 - \varepsilon_2) + \frac{3}{2} \xi v'' \quad \text{for} \quad h_y = h_z = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

For known $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2$ such a measurement could be used to obtain experimental values for ξ . Subject to the assumption that the tensor polarization is the only type of alignment set up by a viscous flow a theoretical analysis yields $\varepsilon_0 = 0$ and $\xi = 0$. If other types of alignment are present $\varepsilon_0 \neq 0$ and $\xi \neq 0$ is obtained⁹. However, ε_0 and ξ/η can be expected to be small compared with ε_1 and ε_2 .

Zur Verbreiterung der Wasserstoff-Linie Ly- α durch starke Elektronenstöße

H. PFENNIG

Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München *

(Z. Naturforsch. 26 a, 1071—1087 [1971]; eingegangen am 16. März 1971)

On Stark Broadening of the Hydrogen Line Ly- α by Strong Electron Collisions

A study of how strong electron collisions will influence the profile of the line core is made within the framework of the impact theory. To this end the time-dependent Schrödinger-equation describing the change of state of the atom during the passage of one perturbing electron is solved numerically down to impact parameters equal to the de Broglie-wavelength λ . In this range the classical description of the perturbing electrons is assumed to be still valid. In the dipole-only case the solution can be expressed exactly by elementary functions. The line profile clearly shows how important it is to consider the strong collisions. All the different ways of doing this lead to nearly the same results.

1. Einleitung

Unabhängig voneinander haben BARANGER¹ und GRIEM und KOLB² eine Theorie entwickelt, um die Verbreiterung (und Verschiebung³) der Spektrallinien eines Atoms in einem Plasma zu erklären. Drei grundlegende Annahmen kennzeichnen diese Theorie:

a) Die Elektronen und Ionen des Plasmas dürfen als Teilchen im Sinne der klassischen Mechanik behandelt werden.

b) Die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Atom läßt sich in eine Folge von Zwei-Teilchen-Stö-

ßen Atom-Elektron zeitlich auflösen, die Übergänge zwischen den quantenmechanischen Zuständen des Atoms bewirken (verallgemeinerte Stoßdämpfungstheorie).

c) Demgegenüber kommt es auf die Zeitabhängigkeit des von den Ionen am Ort des Atoms erzeugten elektrischen Mikrofeldes nicht an, die einzelnen Komponenten, in die die Spektrallinie infolge des Stark-Effektes aufspaltet und die gemäß b) eine Elektronenstoßverbreiterung aufweisen, sind nach Maßgabe ihrer Intensität und der Mikrofeldverteilungsfunktion zu überlagern (quasistatische Theorie).

* Sonderdruckanforderungen an Dr. H. PFENNIG, Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, D-8000 München 23, Föhringer Ring 6.

¹ M. BARANGER, Phys. Rev. **111**, 494 [1958].

² H. R. GRIEM u. A. C. KOLB, Phys. Rev. **111**, 514 [1958].

³ Mit der Verbreiterung soll im folgenden zugleich auch immer die Verschiebung gemeint sein, wenn nicht etwas anderes ausdrücklich bemerkt ist.



Die Einzelheiten und Gültigkeitsgrenzen der Theorie sind z. B. bei BARANGER⁴, GRIEM⁵ und SMITH et al.^{6,7} ausführlich dargestellt.

Beim Vergleich theoretisch berechneter Profile – bis zum Jahr 1964 sind sie bei GRIEM⁸ aufgeführt – mit experimentell beobachteten – die neueste Zusammenstellung ist bei SCHLÜTER⁹ zu finden – wurde bald klar, daß im Fall von Wasserstoff-Linien die Theorie von Baranger, Griem und Kolb in ihrer ursprünglichen Fassung lediglich im Linien-Kern anwendbar ist, während sie im Linien-Flügel den Elektronen-Anteil an der Verbreiterung deutlich überschätzt und den Übergang zum quasistatischen Linienflügel, der auch für den Elektronen-Anteil gelten muß (Flügel-Theorem, siehe z. B. MARGENAU und LEWIS¹⁰), nicht wiederzugeben vermag.

Wie LEWIS¹¹ fand, ist das Versagen der Stoßdämpfungstheorie im Übergangsbereich zum Linienflügel auf die Annahme zurückzuführen, während eines bestimmten Zeitintervalles ändere sich der Zustand des Atoms infolge der Wechselwirkung mit dem Stör-Elektron nur dann, wenn der Zeitpunkt des kleinsten Abstandes zwischen Atom und Stör-Elektron in eben dieses Zeitintervall fällt, dann aber gleich so, als ob die Wechselwirkung unendlich lange Zeit bestünde. Diese Annahme der „vollendeten Stöße“ ist um so schlechter erfüllt, je größer der Stoßparameter ist.

Mehr im Sinne einer Interpolation zwischen der Stoßdämpfungs- und der quasistatischen Theorie für die Elektronen wurde dieser Umstand in einer Reihe von Arbeiten^{12–14} berücksichtigt, bis schließlich SMITH, COOPER und VIDAL¹⁵ und VOSLAMBER¹⁶ einheitliche Theorien vorschlugen, die für das gesamte Linienprofil näherungsweise gültig zu sein beanspruchen.

Die vorliegende Arbeit verbleibt ganz im Bereich der durch die Annahmen a) bis c) gekennzeichneten Theorie von Griem, Kolb und Baranger und hat das Ziel, am Beispiel der Linie Ly- α zu untersuchen, wie es sich auf das Linienprofil auswirkt, wenn die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung, die die Änderung des Atomzustandes beim Vorbeiflug des Störelektrons wiedergibt, exakt gelöst wird und nicht nur in der 2. Ordnung der zeitabhängigen Störungsrechnung, wie es in den bisher vorliegenden Arbeiten fast durchweg geschah.

Eine Arbeit¹⁷ mit derselben Zielsetzung erschien, als die numerischen Rechnungen der vorliegenden Arbeit im wesentlichen abgeschlossen waren. Auf die genannte Arbeit wird im Abschnitt 7 beim Vergleich der Ergebnisse näher eingegangen. Frühere Versuche in dieser Richtung hatten den Nachteil, daß in ihnen stillschweigend¹³ oder ausdrücklich¹⁸ nicht gerechtfertigte Annahmen über die Vertauschbarkeit gewisser Operatoren enthalten waren (siehe den Schlußteil des Abschnittes 5).

2. Einzelheiten zur Theorie, Bezeichnungsweise

Nach der Theorie von Baranger, Griem und Kolb gilt für das Profil $L(\omega)$ einer Linie im optischen Spektralbereich die Gleichung [siehe¹⁹, Gl. (2.10),⁵, Gl. 4-35)]²⁰:

$$L(\omega) = \int_0^\infty W(F) L(\omega; F) dF \quad (2.1a)$$

$$L(\omega; F) := -\frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \sum_{\alpha, \alpha', \beta, j} \langle \alpha | d_j | \beta \rangle^* \langle \alpha' | d_j | \beta \rangle \quad (2.1b)$$

$$\cdot \langle \alpha | \frac{1}{i[\Delta\omega_{nn'} - (eF/\hbar)(\tilde{x}_3 - \langle \beta | \tilde{x}_3 | \beta \rangle)] + \Phi_n} | \alpha' \rangle.$$

⁴ M. BARANGER, Spectral Line Broadening in Plasmas; *Atomic and Molecular Processes*, Ed. D. R. BATES, Academic Press, London 1962, S. 493.

⁵ H. R. GRIEM, *Plasma Spectroscopy*, McGraw-Hill, New York 1964.

⁶ E. W. SMITH, C. R. VIDAL u. J. COOPER, J. Res. Natl. Bur. Std. **73 A**, 389 [1969].

⁷ E. W. SMITH, C. R. VIDAL u. J. COOPER, J. Res. Natl. Bur. Std. **73 A**, 405 [1969].

⁸ H. R. GRIEM, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **4**, 669 [1964].

⁹ H. SCHLÜTER, Line Broadening; *Physics of the One- and Two-Electron Atoms*, Ed. F. BOPP u. H. KLEINPOPPEN, North-Holland, Amsterdam 1969, S. 824.

¹⁰ H. MARGENAU u. M. LEWIS, Rev. Mod. Phys. **31**, 569 [1959].

¹¹ M. LEWIS, Phys. Rev. **121**, 501 [1961].

¹² H. R. GRIEM, Astrophys. J. **136**, 422 [1962].

¹³ H. R. GRIEM, Phys. Rev. **140**, A 1140 [1965]. (Erratum: Phys. Rev. **144**, 366 [1966].)

¹⁴ P. KEPPEL u. H. R. GRIEM, Phys. Rev. **173**, 317 [1968].

¹⁵ E. W. SMITH, J. COOPER u. C. R. VIDAL, Phys. Rev. **185**, 140 [1969].

¹⁶ D. VOSLAMBER, Z. Naturforsch. **24 a**, 1458 [1969].

¹⁷ M. E. BACON, K. Y. SHEN u. J. COOPER, Phys. Rev. **188**, 50 [1969].

¹⁸ K. Y. SHEN u. J. COOPER, Astrophys. J. **155**, 37 [1969].

¹⁹ H. R. GRIEM, M. BARANGER, A. C. KOLB u. G. OERTEL, Phys. Rev. **125**, 177 [1962].

²⁰ Das Zeichen „... := ...“ ist zu lesen „... ist definiert durch ...“.

Die Bezeichnungsweise ist die folgende:

$W(F) dF$ Wahrscheinlichkeit dafür, daß der Absolutbetrag des von den Ionen erzeugten elektrischen Mikrofeldes zwischen F und $F + dF$ liegt.

d_1, d_2, d_3 Komponenten des elektrischen Dipolmomentes.

$|\alpha\rangle, |\alpha'\rangle$ Orthonormierte Eigenfunktionen des Hamilton-Operators \mathcal{H}_0 des freien Atoms in parabolischen Koordinaten zum Energie-Eigenwert E_n , n bezeichnet die obere Hauptquantenzahl der betrachteten Linie.

$|\beta\rangle$ Desgleichen für die untere Hauptquantenzahl $n' < n$.

$$\Delta\omega_{nn'} := \omega - \frac{1}{\hbar} (E_n - E_{n'})$$

Φ_n Elektronen-Stoßdämpfungsoperator, erklärt durch

$$\Phi_n := 2\pi N_e \iint \varrho v f(v) \{S_n(\mathbf{p}, v) - 1\} \text{Richtungen } d\varrho dv \quad (2.2)$$

$\{\dots\}$ Richtungen bedeutet im folgenden stets den Mittelwert der Größe zwischen den geschweiften Klammern über die Richtungen des Stoßparameters \mathbf{p} und der Geschwindigkeit v .

N_e Elektronendichte.

$f(v)$ Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen.

$$S_n(\mathbf{p}, v) := U_n(+\infty, -\infty; \mathbf{p}, v, 0) \quad (2.3)$$

$U_n(t, t'; \mathbf{p}, v, t_0)$ Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild. Er gibt an, wie sich der Zustand des Atoms im Zeitintervall t' bis t ändert, falls ein Stör-Elektron auf der Bahnkurve

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{p} + v(t - t_0), \quad \mathbf{p} \cdot v = 0 \quad (2.4)$$

an ihm vorbeifliegt.

In Gl. (2.2) sind also vollendete, d. h. von $t' = -\infty$ bis $t = +\infty$ erstreckte Stöße gemeint.

Die Gln. (2.1), (2.2) und (2.4) enthalten bereits eine Reihe von Näherungen, die in dem vorliegenden Fall einer Wasserstoff-Linie möglich sind und insoweit über die Annahmen a) bis c) der Einleitung hinausgehen:

d) Der Einfluß des quasistatischen Ionen-Mikrofeldes, als dessen Richtung vor der Mittelung über das Ionen-Mikrofeld die der positiven \tilde{x}_3 -Achse angenommen sei, kommt im Sinne einer zeitunabhängigen Störungsrechnung 1. Ordnung als linearer Stark-Effekt in dem Term $-(eF/\hbar)(\tilde{x}_3 - \langle\beta|\tilde{x}_3|\beta\rangle)$ in Gl. (2.1b) zum Ausdruck. Dieser Störung 1. Ordnung in der Energie entsprechen als Eigenzustände

nullter Ordnung die bereits oben erwähnten $|\alpha\rangle$, $|\alpha'\rangle$ und $|\beta\rangle$.

e) Die Wechselwirkung mit dem Stör-Elektron ruft Übergänge nur zwischen Zuständen hervor, die dem von den Eigenzuständen $|\alpha\rangle$ aufgespannten Unterraum angehören, nicht jedoch Übergänge in Zustände mit anderer Hauptquantenzahl.

Der untere Index n an den Operatoren Φ_n , S_n und U_n weist darauf hin, daß diese Operatoren nur in dem genannten Unterraum wirken.

f) Im Vergleich zu den $|\alpha\rangle$ entsprechen die $|\beta\rangle$ fester gebundenen Atom-Elektronen. Es ist daher angenommen, daß Zustände, die dem von den $|\beta\rangle$ aufgespannten Unterraum angehören, trotz der Wechselwirkung mit dem Stör-Elektron ungeändert bleiben.

3. Die Mittelung über die Richtungen der Stoßparameter und Geschwindigkeiten der Elektronen

Die Mittelung über die Richtungen von \mathbf{p} und v auf der rechten Seite der Gl. (2.2) läßt sich leicht ausführen, das Verfahren dafür ist als die „Zurückführung auf Stoßachsen“ bekannt (siehe z. B. ¹⁾) und besteht aus 3 Schritten, von denen b) der wesentliche ist. Das Verfahren wird an dem allgemeinen Operator $U_n(t, t'; \mathbf{p}, v, t_0) - 1$ dargestellt. Da es dabei auf die Zeiten t , t' und t_0 gar nicht ankommt, werden sie in diesem Abschnitt unter den unabhängigen Veränderlichen nicht mit aufgeführt.

a) Die Eigenfunktionen $|\alpha\rangle$ in parabolischen Koordinaten – sie seien jetzt ausführlicher durch ihre Quantenzahlen n_1, n_2, m gekennzeichnet, die bekanntlich die Gleichung

$$n = n_1 + n_2 + |m| + 1 \quad (3.1)$$

erfüllen – sind durch eine unitäre Transformation mit den Eigenfunktionen $|nlm\rangle$ in sphärischen Polar-Koordinaten verknüpft:

$$|n_1' n_2' m'\rangle = \sum_{l''', m'''} c_{n_1' n_2' m'; n l''' m'''} \cdot |n l''' m'''\rangle \quad (3.2)$$

$$c_{n_1' n_2' m'; n l''' m'''} = c_{n_1' n_2' m'; n l''' m'} \cdot \delta_{m', m'''} \quad (3.3)$$

$$= \langle n_1' n_2' m' | n l''' m' \rangle^* \cdot \delta_{m', m'''} \quad (3.4a)$$

Aus Gl. (3.2) folgt für den durch

$$\langle n_1, n_2, m | U_{n, \text{Ave}}(\varrho, v) | n_1', n_2', m' \rangle := \{ \langle n_1, n_2, m | U_n(\mathbf{p}, v) | n_1', n_2', m' \rangle \} \text{Richtungen} \quad (3.4a)$$

erklärten Operator $U_{n, \text{Ave}}(\varrho, v)$ die Gleichung

$$\langle n_1 n_2 m | U_{n, \text{Ave}}(\varrho, v) | n_1' n_2' m' \rangle = \sum_{l''} \sum_{l'''} c_{n_1 n_2 m; n l'' m}^* \cdot c_{n_1' n_2' m'; n l''' m'} \cdot \langle n l'' m | U_n(\varrho, v) | n l''' m' \rangle \}_{\text{Richtungen}}. \quad (3.4b)$$

Die Eigenfunktionen in sphärischen Polar- und in parabolischen Koordinaten sind in der vorliegenden Arbeit so wie bei BETHE und SALPETER²¹ definiert. In den Gln. (3.2) bis (3.4) sind die Koordinaten in einem Bezugssystem gemessen, in dem der Beobachter ruht und das \tilde{S} genannt werden möge.

Im Koordinatenursprung der sphärischen Polar-koordinaten, denen die parabolischen in der üblichen Weise (siehe²¹) zugeordnet sind, möge sich das Atom befinden.

b) Neben \tilde{S} wird als weiteres Bezugssystem S_0 eingeführt, dessen rechtwinklig-cartesische Koordinatenachsen so ausgerichtet sind, daß

die positive $x_{0,1}$ -Achse parallel zu v ,
die positive $x_{0,2}$ -Achse parallel zu $-v \times \varrho$,
die positive $x_{0,3}$ -Achse parallel zu ϱ ist.

S_0 geht aus \tilde{S} durch Drehung um die Eulerschen Winkel

$\alpha (0 \leq \alpha < 2\pi)$, $\beta (0 \leq \beta < \pi)$ und $\gamma (0 \leq \gamma < 2\pi)$ hervor²².

Mit \tilde{x}_1 , \tilde{x}_2 , \tilde{x}_3 und $x_{0,1}$, $x_{0,2}$, $x_{0,3}$ seien die cartesianischen Koordinaten ein und desselben Punktes in den beiden Koordinatensystemen bezeichnet. Die Werte der Eigenfunktionen für diese beiden Tripel von Koordinaten sind durch die Gleichung (siehe EDMONDS²², Abschnitt 4.1)

$$u_{nl'm''}(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3) = \sum_{m^{iv} = -l''}^{+l''} (-1)^{m^{iv} - m''} D_{m^{iv}m''}^{(l'')}(\alpha, \beta, \gamma) u_{nl'm^{iv}}(x_{0,1}, x_{0,2}, x_{0,3}) \quad (3.5)$$

miteinander verknüpft^{23, 24}. Die Matrizen $D^{(l')}$ bilden eine $(2l' + 1)$ -dimensionale irreduzible Darstellung der Gruppe der 3-dimensionalen Rotationen.

Aus dieser Gleichung folgt

$$\langle n l'' m'' | U_n(\varrho, v) | n l''' m''' \rangle = \sum_{m^{iv} = -l''}^{+l''} \sum_{m^v = -l'''}^{+l'''} D_{m^{iv}m''}^{(l'')}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m^v m'''}^{(l''')}(\alpha, \beta, \gamma) \cdot \langle n l'' m^{iv} | U_{n,c}(\varrho, v) | n l''' m^v \rangle. \quad (3.6)$$

Die Matrixelemente von $U_{n,c}(\varrho, v)$ sind mit den Eigenfunktionen $u_{nlm}(x_{0,1}, x_{0,2}, x_{0,3})$ gebildet, der Operator $U_{n,c}(\varrho, v)$ gehört zu dem Stoß eines Stör-Elektrons, für dessen Stoßparameter und Geschwindigkeit die Gleichungen

$$\varrho_{0,1} = 0, \quad \varrho_{0,2} = 0, \quad \varrho_{0,3} = \varrho, \quad v_{0,1} = v, \quad v_{0,2} = 0, \quad v_{0,3} = 0 \quad (3.7)$$

gelten.

Der Mittelung über die Richtungen von ϱ und v entspricht die über die Winkel α , β , γ , diese läßt sich leicht ausführen (siehe EDMONDS²², Abschnitt 4.6):

$$\{\langle n l'' m'' | U_n(\varrho, v) | n l''' m''' \rangle\}_{\text{Richtungen}} = \frac{1}{2l'' + 1} \delta_{m'', m'''} \cdot \delta_{l'', l'''} \cdot \sum_{m^{iv} = -l''}^{+l''} \langle n l'' m^{iv} | U_{n,c}(\varrho, v) | n l''' m^{iv} \rangle, \quad (3.8)$$

²¹ H. A. BETHE u. E. E. SALPETER, Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Systems; *Handbuch der Physik*, Ed. S. FLÜGGE, Springer-Verlag, Berlin 1957, Bd. XXXV, S. 88.

²² A. R. EDMONDS, Angular Momentum in Quantum Mechanics, University Press, Princeton 1957.

²³ Um die Abhängigkeit von den verschiedenen Koordinaten sichtbar werden zu lassen, ist vorübergehend von der Bezeichnungweise $|n l'' m''\rangle$ usw. abgewichen worden.

²⁴ Der gegenüber²² zusätzliche Faktor $(-1)^{m^{iv} - m''}$ ist darauf zurückzuführen, daß für die Koeffizienten $D_{m^{iv}m''}^{(l'')}(v)$ β, γ) die dort verwendete Definition beibehalten wird, die dort zugrunde gelegten Kugelflächenfunktionen sich aber von denen in der vorliegenden Arbeit, die dieselben wie bei²¹ sind, um einen Faktor unterscheiden:

$$Y_{lm}^{(E)}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^{(B-S)}(\vartheta, \varphi).$$

wenn man annimmt, $U_{n,c}(\varrho, v)$ sei unabhängig von dem Ionen-Mikrofeld und damit auch von dessen Richtung. Diese Annahme wird im Abschnitt 5 näher begründet.

c) Der Übergang zu den Eigenfunktionen in parabolischen Koordinaten $u_{n_1 n_2 m}(x_{0,1}, x_{0,2}, x_{0,3})$ ergibt

$$\langle n l' m' | U_{n,c}(\varrho, v) | n l'' m'' \rangle = \sum_{n_1^a n_1^b} \sum_{n_2^a n_2^b} c_{n_1^a n_2^a m' l'; n l' m'} \cdot c_{n_1^b n_2^b m'' l''; n l'' m''}^* \cdot \langle n_1^a n_2^a m' | U_{n,c}(\varrho, v) | n_1^b n_2^b m'' \rangle. \quad (3.9)$$

Das Gesamtergebnis folgt aus den Gln. (3.4), (3.8) und (3.9):

$$\langle n_1 n_2 m | U_{n, \text{Ave}}(\varrho, v) | n_1' n_2' m' \rangle = \delta_{m, m'} \cdot \sum_{l''} c_{n_1 n_2 m; n l' m}^* \cdot c_{n_1' n_2' m'; n l' m} \cdot \frac{1}{2 l'' + 1} \sum_{m^{lv} = -l''}^{+l''} \sum_{n_1^a n_1^b} \sum_{n_2^a n_2^b} c_{n_1^a n_2^a m^{lv}; n l' m'} \cdot c_{n_1^b n_2^b m^{lv}; n l' m'}^* \cdot \langle n_1^a n_2^a m^{lv} | U_{n,c}(\varrho, v) | n_1^b n_2^b m^{lv} \rangle. \quad (3.10)$$

Die allgemeine Formel^{25, 26} zur Berechnung der Koeffizienten $c_{n_1 n_2 m; n l m}$ führt im Fall $n=2$, d. h. Ly- α , auf die Gleichungen

$$c_{010:200} = c_{010:210} = c_{100:200} = -c_{100:210} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (3.11a)$$

$$c_{00-1:21-1} = -c_{00+1:211} = -1, \quad (3.11b)$$

alle übrigen $c_{n_1 n_2 m; 2 l m}$ verschwinden.

Einsetzen dieser Koeffizienten in die Gl. (3.10) ergibt:

$$\begin{aligned} \langle 00-1 | U_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 00-1 \rangle &= \langle 00+1 | U_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 00+1 \rangle \\ &= \frac{1}{6} [2 \langle 00-1 | U_{2,c}(\varrho, v) | 00-1 \rangle + 2 \langle 00+1 | U_{2,c}(\varrho, v) | 00+1 \rangle \\ &\quad + \langle 010 | U_{2,c}(\varrho, v) | 010 \rangle + \langle 100 | U_{2,c}(\varrho, v) | 100 \rangle \\ &\quad - \langle 010 | U_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 100 \rangle - \langle 100 | U_{2,c}(\varrho, v) | 010 \rangle]; \end{aligned} \quad (3.12a)$$

$$\begin{aligned} \langle 010 | U_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 010 \rangle &= \langle 100 | U_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 100 \rangle \\ &= \frac{1}{6} [\langle 00-1 | U_{2,c}(\varrho, v) | 00-1 \rangle + \langle 00+1 | U_{2,c}(\varrho, v) | 00+1 \rangle \\ &\quad + 2 \langle 010 | U_{2,c}(\varrho, v) | 010 \rangle + 2 \langle 100 | U_{2,c}(\varrho, v) | 100 \rangle \\ &\quad + \langle 100 | U_{2,c}(\varrho, v) | 010 \rangle + \langle 010 | U_{2,c}(\varrho, v) | 100 \rangle]; \end{aligned} \quad (3.12b)$$

$$\begin{aligned} \langle 010 | U_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 100 \rangle &= \langle 100 | U_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 010 \rangle \\ &= \frac{1}{6} [-\langle 00-1 | U_{2,c}(\varrho, v) | 00-1 \rangle - \langle 00+1 | U_{2,c}(\varrho, v) | 00+1 \rangle \\ &\quad + \langle 010 | U_{2,c}(\varrho, v) | 010 \rangle + \langle 100 | U_{2,c}(\varrho, v) | 100 \rangle \\ &\quad + 2 \langle 010 | U_{2,c}(\varrho, v) | 100 \rangle + 2 \langle 100 | U_{2,c}(\varrho, v) | 010 \rangle]. \end{aligned} \quad (3.12c)$$

Die übrigen Matrixelemente verschwinden. Aus den Gln. (3.12a) bis (3.12c) folgt

$$\langle 010 | U_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 010 \rangle = \langle 00-1 | U_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 00-1 \rangle + \langle 010 | U_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 100 \rangle. \quad (3.13)$$

4. Vereinfachungen der Gln. (2:1) im Fall der Spektrallinie Ly- α

Aus den bekannten Formeln (vgl. ²¹, Abschn. 60) für die Matrixelemente des elektrischen Dipolmomentes, gebildet mit den Eigenfunktionen in sphärischen Polarkoordinaten, erhält man mit Hilfe der Gl. (3.11) die entsprechenden Matrixelemente, gebildet mit den Eigenfunktionen in parabolischen Ko-

ordinaten:

$$\begin{aligned} \langle 00-1 | d_1 | 000 \rangle &= \langle 00+1 | d_1 | 000 \rangle \\ &= \langle 010 | d_3 | 000 \rangle \end{aligned} \quad (4.1a)$$

$$= -\langle 100 | d_3 | 000 \rangle = \frac{128}{243} e a_0,$$

$$\begin{aligned} \langle 00-1 | d_2 | 000 \rangle &= \\ &= -\langle 00+1 | d_2 | 000 \rangle = \frac{128}{243} e a_0 \cdot i. \end{aligned} \quad (4.1b)$$

²⁵ J. W. B. HUGHES, Proc. Phys. Soc. London **91**, 810 [1967].

²⁶ In der Gl. (27) der Arbeit ²⁵ ist der Ausdruck auf der rechten Seite mit $(-1)^{n-1}$ zu multiplizieren (J. W. B. HUGHES, private Mitteilung 1969).

Alle übrigen $\langle n_1 n_2 m | d_j | 000 \rangle$, bei denen [siehe Gl. (3.1)]

$$n_1 + n_2 + |m| + 1 = 2$$

ist, verschwinden.

Eine Möglichkeit, im Fall $n = 2$, $n' = 1$ den Operator

$$R_{21} := i[\Delta\omega_{21} - (eF/\hbar)(\tilde{x}_3 - \langle \beta | \tilde{x}_3 | \beta \rangle)] + \Phi_2 \quad (4.2)$$

auf der rechten Seite der Gl. (2.1) zu vereinfachen, bietet die Gl. (3.13). Aus ihr folgt [siehe Gl. (2.2)]

$$\begin{aligned} \langle 010 | \Phi_2 | 010 \rangle & \quad (4.3) \\ = \langle 00-1 | \Phi_2 | 00-1 \rangle + \langle 010 | \Phi_2 | 100 \rangle. \end{aligned}$$

Tab. 1. Matrixelemente $\langle \alpha' | R_{21} | \alpha'' \rangle$. Der Operator R_{21} ist durch die Gl. (4.2), die Größen $a(n_1 n_2 m)$ und b sind durch die Gl. (4.5) erklärt. Die Eigenfunktionen in parabolischen Koordinaten sind durch die Quantenzahlen n_1 , n_2 und m gekennzeichnet.

$\alpha' \backslash \alpha''$	00-1	010	100	00+1
00-1	$a(00-1)$	0	0	0
010	0	$a(010) + b$	b	0
100	0	b	$a(100) + b$	0
00+1	0	0	0	$a(00+1)$

Aus den Gln. (4.1) folgt im Fall Ly- α für den Ausdruck auf der rechten Seite der Gl. (2.1b) zunächst

$$\begin{aligned} L(\omega; F) = & -\frac{1}{\pi} \left(\frac{128}{243} e a_0 \right)^2 \text{Re} \{ 2 \langle 00-1 | R_{21}^{-1} | 00-1 \rangle + 2 \langle 00+1 | R_{21}^{-1} | 00+1 \rangle + \langle 010 | R_{21}^{-1} | 010 \rangle \\ & - \langle 100 | R_{21}^{-1} | 010 \rangle - \langle 010 | R_{21}^{-1} | 100 \rangle + \langle 100 | R_{21}^{-1} | 100 \rangle \} \end{aligned}$$

und schließlich durch Einsetzen der Matrixelemente aus Tab. 2

$$L(\omega; F) = -\frac{1}{\pi} \left(\frac{128}{243} e a_0 \right)^2 \text{Re} \left\{ 2 a^{-1}(00-1) + 2 a^{-1}(00+1) + \frac{a(100) + a(010) + 4b}{N} \right\}. \quad (4.7)$$

5. Die Berechnung der Matrixelemente des Operators $U_{n,c}(t, t'; \varrho, v, t_0)$

Im vorliegenden Fall hat der Hamilton-Operator für das Atom-Elektron die Gestalt

$$\mathcal{H} := \mathcal{H}_0 + eF\tilde{x}_3 + V(t). \quad (5.1a)$$

\mathcal{H}_0 ist als Hamilton-Operator des freien Atoms bereits in Abschnitt 2 eingeführt, der Term $eF\tilde{x}_3$ gibt die Wechselwirkung mit dem quasistatischen Ionenfeld wieder, von dem zunächst angenommen ist, es zeige in die Richtung der positiven \tilde{x}_3 -Achse. Für die Wechselwirkung mit dem Stör-Elektron gilt:

$$V(t) := -e \left[\frac{(-e)}{|\mathcal{R}(t) - \mathbf{r}|} + \frac{(+e)}{|\mathcal{R}(t)|} \right]; \quad (5.1b)$$

Wenn man ferner die Gl. (3.12a) bis (3.12c) und

$$\langle 000 | \tilde{x}_3 | 000 \rangle = 0 \quad (4.4)$$

beachtet, ist es daher möglich, die Matrixelemente von R_{21} durch die Größen

$$\begin{aligned} a(\alpha) := & i \left(\Delta\omega_{21} - \frac{eF}{\hbar} \cdot \frac{3}{2} \cdot 2(n_1^2 - n_2^2) \right) \\ & + \langle 00-1 | \Phi_2 | 00-1 \rangle \end{aligned} \quad (4.5a)$$

und

$$b := \langle 010 | \Phi_2 | 100 \rangle \quad (4.5b)$$

auszudrücken. Diese Matrix und die zu ihr inverse sind in den Tab. 1 und 2 angegeben.

Dabei ist

$$N := a(010) a(100) + b[a(010) + a(100)]. \quad (4.6)$$

Tab. 2. Matrixelemente $\langle \alpha' | R_{21}^{-1} | \alpha'' \rangle$. Die Inverse der Matrix in Tab. 1. Wegen N siehe Gl. (4.6).

$\alpha' \backslash \alpha''$	00-1	010	100	00+1
00-1	$a^{-1}(00-1)$	0	0	0
010	0	$\frac{a(100) + b}{N}$	$-\frac{b}{N}$	0
100	0	$-\frac{b}{N}$	$\frac{a(010) + b}{N}$	0
00+1	0	0	0	$a^{-1}(00+1)$

\mathbf{r} Ortsvektor des Atom-Elektrons; $\mathcal{R}(t)$ Ortsvektor des Stör-Elektrons [siehe Gl. (2.4)]; $-e$ Elektronenladung.

Der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung für die Zustände im Schrödinger-Bild

$$\{\mathcal{H}_0 + eF\tilde{x}_3 + V(t)\} \Psi_S(\mathbf{r}; t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_S(\mathbf{r}; t) \quad (5.2)$$

entspricht die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_I(\mathbf{r}; t) = & -\frac{i}{\hbar} \\ & \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0(t-t') \right\} [eF\tilde{x}_3 + V(t)] \\ & \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0(t-t') \right\} \Psi_I(\mathbf{r}; t) \end{aligned} \quad (5.3a)$$

für die Zustände in dem durch

$$\Psi_S(r; t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H_0(t-t') \right\} \Psi_I(r; t) \quad (5.3b)$$

erklärten Wechselwirkungsbild.

Der Zeitentwicklungsoperator $T'(t, t')$ überführt die Zustände in diesem Wechselwirkungsbild zu verschiedenen Zeiten ineinander:

$$\Psi_I(r; t) = T'(t, t') \Psi_I(r; t'), \quad (5.4a)$$

für ihn gilt die der Gl. (5.3a) entsprechende Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial T'(t, t')}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} H_0(t-t') \right\} [e F \tilde{x}_3 + V(t)] \\ & \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H_0(t-t') \right\} T'(t, t') \end{aligned} \quad (5.4b)$$

mit der Anfangsbedingung

$$T'(t', t') = 1. \quad (5.4c)$$

Die weiteren Rechnungen beruhen auf der Annahme, die Unterräume, die von den Eigenfunktionen von H_0 zu einer bestimmten Hauptquantenzahl aufgespannt werden, seien invariante Unterräume des Operators

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} H_0(t-t') \right\} [e F \tilde{x}_3 + V(t)] \\ \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H_0(t-t') \right\}, \end{aligned}$$

d. h. dieser Operator sei diagonal bezüglich der Hauptquantenzahl. Daraus und aus der Anfangsbedingung (5.4c) folgt, daß sich die Differentialgleichung (5.4b) in eine Folge von Differentialgleichungen zerlegen läßt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T'_n(t, t')}{\partial t} = & -(i/\hbar) [e F(\tilde{x}_3)_n + V_n(t)] T'_n(t, t'), \end{aligned} \quad (5.5a)$$

$$T'_n(t', t') = 1, \quad (5.5b)$$

von denen jede einzelne nur noch die von den Operatoren $T'(t, t')$, \tilde{x}_3 und $V(t)$ in dem jeweiligen Unterraum erzeugten Operatoren $T'_n(t, t')$, $(\tilde{x}_3)_n$ und $V_n(t)$ enthält, für die also z. B.

$$\langle n\kappa | T'_n(t, t') | n\kappa' \rangle := \langle n\kappa | T'(t, t') | n\kappa' \rangle \quad (5.5c)$$

gilt. Der Deutlichkeit halber sind in dieser Gleichung die Eigenfunktionen von H_0 mit $|n\kappa\rangle$ bezeichnet, κ steht für die übrigen (sphärischen oder parabolischen) Quantenzahlen. Matricelemente vom Typ $\langle n\kappa | T'_n(t, t') | n'\kappa' \rangle$ sind für $n \neq n'$ nicht erklärt und treten in Gl. (5.5a) auch gar nicht auf.

Vorübergehend bedeuten n und n' beliebige Hauptquantenzahlen, sie sind nicht (wie in Abschnitt 2) auf die obere und die untere Hauptquantenzahl der betrachteten Linie festgelegt.

Die genannte Annahme, die also schließlich [siehe Gl. (5.5c)] auf die Annahme e) in Abschnitt 2 führt, ist unter normalen Plasmabedingungen (Ionisationsenergie des Wasserstoffatoms $\gg kT$) für nicht zu große Hauptquantenzahlen ^{7, 13, 16} gerechtfertigt, es sei denn, der Stoß ist sehr stark [$(V_0/\hbar v) \gg 1$]. In diesem Fall läßt sich aber ohnehin die Berechnung des Zeitentwicklungsoperators umgehen (siehe Abschnitt 6).

Führt man schließlich ein weiteres Wechselwirkungsbild [Zustände $\Psi_I(r; t)$] ein, das durch

$$\Psi_I(r; t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} e F(\tilde{x}_3)_n(t-t') \right\} \Psi_I(r; t) \quad (5.6a)$$

erklärt ist, so hängt dessen Zeitentwicklungsoperator $U_n(t, t')$ mit $T'_n(t, t')$ folgendermaßen zusammen:

$$T'_n(t, t') = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} e F(\tilde{x}_3)_n(t-t') \right\} U_n(t, t'). \quad (5.6b)$$

Das Einsetzen in Gl. (5.5) ergibt

$$\frac{\partial U_n(t, t')}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \tilde{V}_n(t) U_n(t, t'), \quad (5.7a)$$

$$U_n(t', t') = 1, \quad (5.7b)$$

$$\begin{aligned} \tilde{V}_n(t) := & \exp \left\{ +\frac{i}{\hbar} e F(\tilde{x}_3)_n(t-t') \right\} V_n(t) \\ & \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} e F(\tilde{x}_3)_n(t-t') \right\}. \end{aligned} \quad (5.7c)$$

Diese Differentialgleichung braucht auf Grund der Annahme f) aus Abschnitt 2 nur für die Hauptquantenzahl n gelöst zu werden, die zum oberen Niveau der betrachteten Linie gehört. Wenn man die Eigenfunktionen $|\alpha\rangle$, d. h. die in parabolischen Koordinaten, als Basissystem benutzt und die Exponentialfunktionen sogleich durch 1 ersetzt, entspricht der Differentialgleichung (5.7) ein System linearer, gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha | U_n(t, t') | \alpha' \rangle \quad (5.8a)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha''} \langle \alpha | V_n(t) | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | U_n(t, t') | \alpha' \rangle$$

mit der Anfangsbedingung

$$\langle \alpha'' | U_n(t, t') | \alpha' \rangle = \delta_{\alpha'', \alpha'}. \quad (5.8b)$$

Wie man sieht, besteht es seinerseits aus einer Folge von Differentialgleichungssystemen, jedes für einen Spaltenvektor (Index α') der Matrix von $U_n(t, t')$.

Das Produkt der beiden Exponentialfunktionen darf nur dann durch 1 ersetzt werden, wenn für sein Argument $i \Delta\omega_s \cdot (t - t')$ die Ungleichung

$$i |\Delta\omega_s \cdot (t - t')| \ll 1 \quad (5.9a)$$

erfüllt ist, wobei

$$\Delta\omega_s := \frac{1}{\hbar} e F a_0 \cdot \frac{3}{2} n \cdot [(n_1^{\alpha} - n_2^{\alpha}) - (n_1^{\alpha''} - n_2^{\alpha''})] \quad (5.9b)$$

bedeutet. Soweit es sich – wie in der vorliegenden Arbeit – um Rechnungen für den Linienkern auf der Grundlage der Stoßdämpfungstheorie handelt, ist das Zeitintervall $(t - t')$ durch die Stoßzeit $\approx \varrho/v$ abzuschätzen.

Das Einsetzen mittlerer Werte für ϱ , v und F führt schließlich zu dem Ergebnis^{13, 27}, daß jedenfalls für $n = 2$, $T \geq 10^4$ K und $N_e \leq 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ die Ungleichung (5.9a) noch recht gut erfüllt ist.

Die Annahme, $V(t)$ brauche nur bis zu den Quadrupol-Termen einschließlich entwickelt zu werden²⁸, führt auf die Gleichung

$$V(t) = \sum_{k=0}^2 V^{(k)}(t) \quad (5.10)$$

$k = 0$ Monopol, $k = 1$ Dipol, $k = 2$ Quadrupol.

Die einzelnen Terme lauten folgendermaßen:

$$V^{(0)}(t) = e^2 \begin{cases} \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{R(t)} \right] & R(t) \leq r, \\ 0 & r \leq R(t), \end{cases} \quad (5.11a)$$

$$V^{(1)}(t) = e^2 \begin{cases} \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{R}(t)}{r^3} & R(t) \leq r, \\ \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{R}(t)}{R^3(t)} & r \leq R(t), \end{cases} \quad (5.11b)$$

$$V^{(2)}(t) = e^2 \begin{cases} \left[\frac{1}{2} \left[\frac{3(\mathbf{r} \cdot \mathbf{R}(t))^2}{r^5} - \frac{R^2(t)}{r^3} \right] \right] & R(t) \leq r, \\ \left[\frac{1}{2} \left[\frac{3(\mathbf{r} \cdot \mathbf{R}(t))^2}{R^5(t)} - \frac{r^2}{R^3(t)} \right] \right] & r \leq R(t). \end{cases} \quad (5.11c)$$

Der „reinen Dipol-Näherung“ entspricht die Gleichung

chung

$$V(t) = e^2 \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{R}(t)}{R^3(t)} \quad \text{für} \quad 0 \leq r < \infty. \quad (5.12)$$

Durch die Gln. (5.11)/(5.12) ist die rechte Seite des Differentialgleichungssystems (5.8) vollständig erklärt. Man braucht es zwar nur für die in den Gln. (3.7) angegebenen Richtungen von \mathbf{p} und \mathbf{v} zu lösen, um die in den Gln. (3.10) benötigten Matrixelemente von $U_{n,c}(t, t'; \varrho, v, t_0)$ zu erhalten, aber auch nach dieser Vereinfachung ist seine exakte Lösung im allgemeinen nur durch numerische Integration zu erhalten. Für $n = 2$ sind deren Einzelheiten im Anhang A angegeben.

Für den reinen Dipol-Fall gibt es einige Arbeiten (13, 18 für vollendete, 15 für nicht vollendete Stöße), denen die Annahme zugrunde liegt, die Operatoren $V_n(t)$ und $\int_{t'}^t V_n(t_1) dt_1$ seien auch in dem Unterraum mit der Hauptquantenzahl n miteinander vertauschbar:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \langle \alpha' | V_n(t) | \alpha \rangle \langle \alpha | \int_{t'}^t V_n(t_1) dt_1 | \alpha'' \rangle \\ = \sum_{\alpha} \langle \alpha' | \int_{t'}^t V_n(t_1) dt_1 | \alpha \rangle \langle \alpha | V_n(t) | \alpha'' \rangle, \end{aligned} \quad (5.13)$$

und infolgedessen (siehe z. B. 30) laute die Lösung

$$\begin{aligned} \langle \alpha' | U_{n,c}(t, t'; \varrho, v, t_0) | \alpha'' \rangle \\ = \langle \alpha' | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t V_n(t_1) dt_1 \right\} | \alpha \rangle. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Die Bedingung (5.13) ist keineswegs erfüllt. Die Lösung (5.14) und eine weitere, davon verschiedene Näherung¹⁶ haben aber immerhin im Vergleich zu dem Ergebnis der zeitabhängigen Störungsrechnung den Vorteil, daß sie Zeitentwicklungsoperatoren darstellen, die unitär sind und damit eine für die Normierung des Linienprofils wichtige Eigenschaft wahren.

Alle diese Näherungen sind aber gar nicht nötig, es ist im reinen Dipolfall möglich, die Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperators durch elementare Funktionen exakt auszudrücken³¹. Für vollendete Stöße und für die Hauptquantenzahl $n = 2$ sind die Matrixelemente im Anhang B angegeben.

²⁷ H. VAN REGEMORTER, Ann. Rev. Astron. Astrophys. **3**, 71 [1965].

²⁸ Im Fall $n = 2$ verschwinden sogar die Matrixelemente der Multipol-Terme höherer Ordnung exakt²⁹.

²⁹ C. R. VIDAL, J. COOPER u. E. W. SMITH, J. Quant. Spectroscop. Radiat. Transfer **10**, 1011 [1970].

³⁰ W. SCHMEIDLER, Vorträge über Determinanten und Matrizen, Akademie-Verlag, Berlin 1949.

³¹ H. PFENNIG, to be submitted to J. Quant. Spectroscop. Radiat. Transfer.

6. Die Integration über q und v

Die rechte Seite der Gl. (2.2) ist insoweit noch nicht vollständig erklärt, als die Integrationsgrenzen fehlen.

Wie in der Stoßdämpfungstheorie gemeinhin üblich (vgl. z. B. ⁵), wird als obere Grenze des Integrals über q der Debye-Radius

$$q_D := \sqrt{kT/4\pi N_e e^2} \quad (6.1)$$

gewählt. Überlegungen, die auf einen anderen als diesen Abschneideradius führen (siehe ³², dort weitere Literaturhinweise), sind nicht Gegenstand dieser Arbeit.

Die untere Grenze des Integrals über q ist 0. Wie die diesbezüglichen Abschätzungen (siehe z. B. ⁶) zeigen, dürfen allerdings die Stör-Elektronen (mit der Masse m ³³) im Bereich

$$\text{I} \quad 0 \leq q < \lambda \quad (6.2a)$$

$$\lambda := \hbar/mv \quad \text{de Broglie-Wellenlänge}$$

sicher nicht im Sinne der klassischen Mechanik beschrieben werden, im Bereich

$$\text{II} \quad \lambda \leq q \quad (6.2b)$$

ist dies erst für $\lambda \ll q$ voll gerechtfertigt.

Selbstverständlich ist es willkürlich, die Grenze zwischen diesen beiden Bereichen genau bei λ zu ziehen. Etwas mehr Spielraum, um verschiedene Rechnungen miteinander vergleichen zu können (siehe Abschnitt 7), verschafft der dimensionslose Zahlenfaktor

$$q \gtrsim 1, \quad (6.3)$$

mit dessen Hilfe der Radius

$$q_{\min}(v) := q\lambda \quad (6.4)$$

eingeführt wird, so daß für

$$\text{II}' \quad q_{\min}(v) \leq q \quad (6.2b')$$

die Annahme a) mit der oben genannten Einschränkung gerechtfertigt ist. Im Bereich II' sind somit die Ergebnisse der Abschnitte 3 und 5 anzuwenden.

Für den Bereich

$$\text{I}' \quad 0 \leq q < q_{\min}(v) \quad (6.2a')$$

wird die Näherung von Lorentz-Weißkopf benutzt. Sie beruht auf der Tatsache, daß ein vollendeter Stoß aus dem Bereich I' die Lage des Zustandes $\Psi_1(r; t)$ in dem von den $|\alpha\rangle$ aufgespannten Unterraum völlig ändert (starker Stoß), und besteht in der Annahme, daß eben deshalb die Lage des Zustandes nach dem Stoß als zufällig angesehen werden darf ³⁴. Die Mittelung in Gl. (2.2) ist infolgedessen denkbar einfach:

$$2\pi \int_0^{q_{\min}(v)} q v f(v) \{S_n(\mathbf{p}, v)\}_{\text{Richtungen}} d\mathbf{p} dv = 0. \quad (6.5)$$

$$\text{Für} \quad v \rightarrow 0 \quad (6.6a)$$

$$\text{wird schließlich} \quad q_{\min}(v) > q_D. \quad (6.6b)$$

Es stellt sich aber heraus, daß die implizit durch die Gleichung

$$q_{\min}(v_{\min}) = q_D \quad (6.7)$$

eingeführte Geschwindigkeit v_{\min} bei den in Betracht kommenden Werten der Elektronendichte und der Temperatur so klein ist, daß der Beitrag der Elektronen mit Geschwindigkeiten $v \leq v_{\min}$ vernachlässigt werden darf.

Auf Grund dieser Überlegungen und Annahmen geht die Gl. (2.2) über in die Gleichung

$$\begin{aligned} \Phi_n &= 2\pi N_e \left[- \int_{v_{\min}}^{\infty} \int_0^{q_{\min}(v)} q v f(v) d\mathbf{p} dv \cdot 1 + \int_{v_{\min}}^{\infty} \int_{q_{\min}(v)}^{q_D} q v f(v) \{S_n(\mathbf{p}, v) - 1\}_{\text{Richtungen}} d\mathbf{p} dv \right] \\ &= N_e \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \left(\frac{8\pi m}{kT} \right)^{1/2} \left[- \frac{q^2}{2} e^{-y_{\min}} + \frac{m}{kT} \int_{v_{\min}}^{\infty} v \exp \left\{ - \frac{mv^2}{2kT} \right\} \left[\int_{q_{\min}(v)}^{q_D} \left(\frac{q}{\lambda} \right) \{S_{n, \text{Ave}}(q, v) - 1\} d \left(\frac{q}{\lambda} \right) \right] dv \right]. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Die Größenordnung des Vorfaktors ist aus der Gleichung

$$\left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \left(\frac{8\pi m}{kT} \right)^{1/2} = 1,726 \cdot 10^{-7} \left(\frac{10^4 \text{ K}}{T} \right)^{1/2} \frac{\text{cm}^3}{\text{sec}} \quad (6.9)$$

zu ersehen. Für

$$y_{\min} := m v_{\min}^2 / 2kT \quad (6.10a)$$

gilt im allgemeinen [siehe die Bemerkungen im An-

³² D. D. BURGESS, J. Quant. Spectroscop. Radiat. Transfer **10**, 365 [1970].

³³ Der Buchstabe m bezeichnet auch die magnetische Quantenzahl. Es dürfte keinem Zweifel unterliegen, wann die eine und wann die andere Größe gemeint ist.

³⁴ Zu diesen Bemerkungen siehe ¹⁶.

schluß an Gl. (6.7)]

$$y_{\min} \ll 1. \quad (6.10b)$$

Nur die Diagonalelemente des Operators

$$- \frac{q^2}{2} \exp\{-y_{\min}\} \cdot 1$$

sind $\neq 0$, ein Ergebnis, auf das auch in ⁵ mehrmals hingewiesen ist. λ bezeichnet die bereits aus Gl. (6.2a) bekannte de Broglie-Wellenlänge, das Verhältnis q/λ mißt den Drehimpuls des Stör-Elektrons in atomaren Einheiten. Einige Hinweise zur numerischen Berechnung des Integrals in Gl. (6.8) im Fall $n=2$ sind am Schluß des Anhanges A zu finden.

Zu der Behandlung des Beitrages der starken Stöße in einer Reihe von Arbeiten mögen hier die folgenden Bemerkungen eingeschoben werden:

Für die schwachen Stöße ergibt die zeitabhängige Störungsrechnung 2. Ordnung im reinen Dipol-Fall ³⁵

$$S_{n, \text{Ave}}(q, v) - 1 = - \frac{2}{3} \left(\frac{\lambda}{q} \right)^2 \frac{(r)_n}{a_0} \cdot \frac{(r)_n}{a_0}, \quad (6.11a)$$

$$\frac{(r)_n}{a_0} \cdot \frac{(r)_n}{a_0} := \sum_{j=1}^3 \frac{(x_j)_n}{a_0} \cdot \frac{(x_j)_n}{a_0} \quad (6.11b)$$

In dieser Näherung folgt aus den Gln. (6.8) und (6.11)

$$\Phi_n = N_e \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \left(\frac{8 \pi m}{k T} \right)^{1/2} \cdot \left[- \frac{q^2}{2} \exp\{-y_{\min}\} \cdot 1 - \frac{1}{3} E_1(y_{\min}) \frac{(r)_n}{a_0} \cdot \frac{(r)_n}{a_0} \right]. \quad (6.12)$$

E_1 bezeichnet die Integraleponentialfunktion

$$E_1(y) := \int_y^\infty (e^{-y}/y) dy. \quad (6.13)$$

GRIEM, KOLB und SHEN ³⁶ verwendeten nun aber nicht etwa die Gl. (6.12), sondern die Gleichung

$$\Phi_n = - \frac{1}{3} N_e \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \left(\frac{8 \pi m}{k T} \right)^{1/2} \cdot [1 + E_1(y_{\min})] \frac{(r)_n}{a_0} \cdot \frac{(r)_n}{a_0}, \quad (6.12')$$

die sich von Gl. (6.12) vor allem dadurch unterscheidet, daß die 1 innerhalb der eckigen Klammer [], die dem Beitrag der starken Stöße entsprechen soll, mit dem aus der Störungsrechnung stammenden Term $[(r)_n/a_0] \cdot [(r)_n/a_0]$ multipliziert wird.

Auf diese Weise erhält der Beitrag der starken Stöße auch Nicht-Diagonalelemente, die $\neq 0$ sind. Dieses Ergebnis widerspricht dem früheren [hinter Gl. (6.10b)].

Die Gl. (6.12') ist offensichtlich falsch, was um so mehr überrascht, als dieselben Verfasser zeitweise ^{5, 35} durchaus die richtige Gl. (6.12) angegeben hatten. Aus der Gl. (21) in ³⁵ folgt eben die Gl. (6.12) und nicht die Gl. (6.12').

Dennoch wurde diese Gleichung in einer ganzen Reihe von Arbeiten ^{14, 37-39} — keineswegs nur für Ly- α — übernommen, deren Ergebnisse ebenso wie die in ³⁶ insoweit fragwürdig sind.

7. Die Ergebnisse

Um den Vergleich mit den Ergebnissen von BACON, SHEN und COOPER ^{17, 40} zu erleichtern, seien vorweg die Gleichungen

$$\{\langle 200 | S_2(\mathbf{p}, v) - 1 | 200 \rangle\}_{\text{Richtungen}} = \{\langle 00-1 | S_2(\mathbf{p}, v) - 1 | 00-1 \rangle + 2 \langle 010 | S_2(\mathbf{p}, v) - 1 | 100 \rangle\}_{\text{Richtungen}}, \quad (7.1a)$$

$$\{\langle 21 m | S_2(\mathbf{p}, v) - 1 | 21 m \rangle\}_{\text{Richtungen}} = \{\langle 00-1 | S_2(\mathbf{p}, v) - 1 | 00-1 \rangle\}_{\text{Richtungen}} \quad (m = -1, 0, +1) \quad (7.1b)$$

aufgeführt. Sie und die entsprechenden Gleichungen für Φ_2 [siehe Gl. (2.2)] folgen aus den Gln. (3.11) und (3.13). Auf der linken Seite sind die Matrixelemente wie bei BSC mit den sphärischen, auf der rechten Seite mit den parabolischen Eigenfunktionen gebildet.

Die Abb. 1 der vorliegenden Arbeit entspricht der Abb. 2 bei BSC. Die Kurven für den

$\text{Re} \{ \{ \langle 00-1 | S_2(\mathbf{p}, v) - 1 | 00-1 \rangle \}_{\text{Richtungen}} \}$ stimmen offensichtlich innerhalb der Zeichengenauigkeit überein, die Kurve für den Imaginärteil ist bei BSC nicht eingezeichnet.

Im reinen Dipol-Fall, in dem sich ja die Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperators durch elementare Funktionen exakt ausdrücken lassen (siehe ³¹), ist eine geringfügige Abweichung zu bemerken: Der $\text{Re} \{ \{ \langle 00-1 | S_2(\mathbf{p}, v) - 1 | 00-1 \rangle \}_{\text{Richtungen}} \}$ durchläuft an der Stelle $(q/\lambda) \approx 1,1$ ein Maximum, das in der Abb. 2 von BSC nicht zu erkennen ist.

³⁵ H. R. GRIEM, A. C. KOLB u. K. Y. SHEN, Phys. Rev. **116**, 4 [1959].

³⁶ H. R. GRIEM, A. C. KOLB u. K. Y. SHEN, Astrophys. J. **135**, 272 [1962].

³⁷ M. E. BACON u. D. F. EDWARDS, Phys. Rev. **170**, 125 [1968].

³⁸ M. E. BACON u. D. F. EDWARDS, J. Quant. Spectroscop. Radiat. Transfer **9**, 951 [1969].

³⁹ M. E. BACON u. D. F. EDWARDS, J. Quant. Spectroscop. Radiat. Transfer **10**, 563 [1970].

⁴⁰ Im folgenden mit BSC abgekürzt.

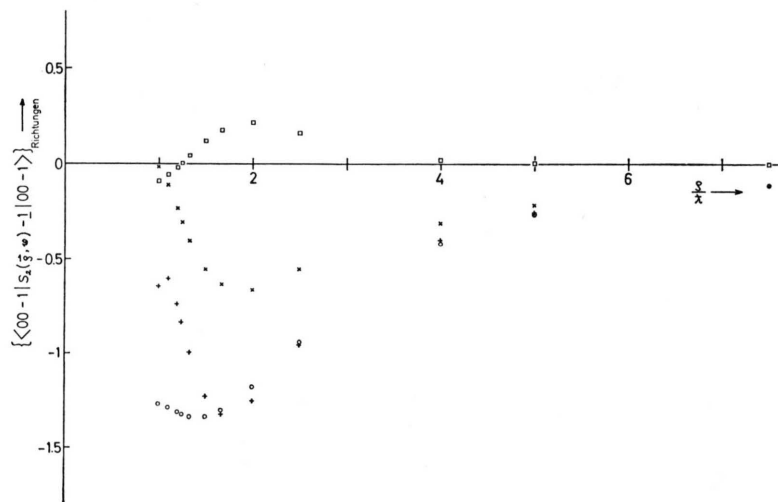


Abb. 1.

Abb. 1. $\langle 00-1 | S_2(\mathbf{r}, v) - 1 | 00-1 \rangle$ Richtungen als Funktion von q/λ . \circ, \square Real- (\circ) und Imaginär- (\square) Teil für den Parameterwert $a_0/\lambda = \frac{1}{3}$, d. h. bei fester Geschwindigkeit $v = \frac{1}{3}$ Elektronengeschwindigkeit in der 1. Bohrschen Bahn. + Reiner Dipol-Fall, exakte Lösung durch elementare Funktionen³¹. \times Reiner Dipol-Fall in der Näherung von SHEN u. COOPER¹⁸. Im reinen Dipol-Fall verschwindet der Imaginär-Teil.

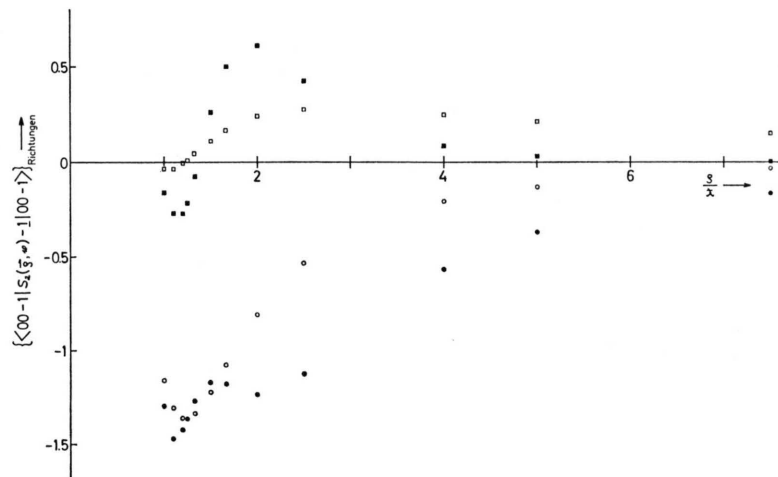


Abb. 2.

Abb. 2. $\langle 00-1 | S_2(\mathbf{r}, v) - 1 | 00-1 \rangle$ Richtungen als Funktion von q/λ für den Parameterwert $a_0/q = 0,25$, das heißt bei festem Stoßparameter $q = 4 a_0$. \circ, \square Real- (\circ) und Imaginär- (\square) Teil bei Beachtung der Fallunterscheidungen in den Gln. (5.11). \bullet, \blacksquare Real- (\bullet) und Imaginär- (\blacksquare) Teil unter der vereinfachenden Annahme, jeweils die untere der Gln. (5.11) gelte für den gesamten Bereich $0 \leq r < \infty$.

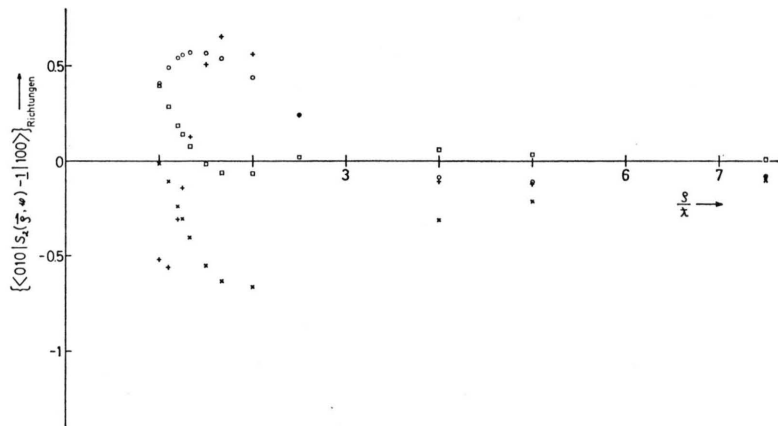


Abb. 3.

Abb. 3. $\langle 010 | S_2(\mathbf{r}, v) - 1 | 100 \rangle$ Richtungen, im übrigen wie Abb. 1.

Wenn man schon die reine Dipol-Näherung verbessern will, muß man sowohl den Mono- und den Quadrupol-Term hinzunehmen als auch die Fallunterscheidungen in den Gln. (5.11) beachten. Wie Abb. 2 zeigt, genügt es keinesfalls anzunehmen, daß das Stör-Elektron nicht in das Atom „eindringt“, d. h. daß jeweils die untere Zeile der Gln. (5.11) für alle r gelte.

Die Abb. 1 und 3 zusammen entsprechen der Abb. 1 bei BSC, beim Vergleich ist die Gl. (7.1a) heranzuziehen. Innerhalb der Zeichengenauigkeit besteht offensichtlich wieder Übereinstimmung. In den Abb. 1 und 3 ist bemerkenswert, wie sehr im reinen Dipol-Fall die Näherung (5.14) von dem exakten Ergebnis abweicht.

Die Ergebnisse nach der Integration über q und v , d. h. die für die Matrixelemente von Φ_2 , werden nach dem Vorbild von BSC in der folgenden Weise auf die von GRIEM, KOLB und SHEN³⁵ bezogen:

$$\text{Re} \{00-1 | \Phi_2 | 00-1\} = \{00-1 | \Phi_2 | 00-1\}_{\text{GKS}} - 3 N_e \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \left(\frac{8 \pi m}{k T}\right)^{1/2} \cdot K_2, \quad (7.2a)$$

$$\text{Re} \{010 | \Phi_2 | 100\} = \{010 | \Phi_2 | 100\}_{\text{GKS}} - 3 N_e \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \left(\frac{8 \pi m}{k T}\right)^{1/2} \cdot K_3. \quad (7.2b)$$

Aus Gl. (6.12) folgt für $n=2$

$$\langle 00-1 | \Phi_2 | 00-1 \rangle_{\text{GKS}} = \langle 010 | \Phi_2 | 100 \rangle_{\text{GKS}} = -N_e \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \left(\frac{8 \pi m}{k T}\right)^{1/2} \cdot 3 E_1(y_{\min}^{(1)}). \quad (7.3)$$

Dabei ist wie in³⁵ der Lorentz-Weißkopf-Term vernachlässigt und

$$q = q^{(1)} := \sqrt{\frac{2}{3}} 2^2 \quad (7.4)$$

gesetzt worden. Ferner ist

$$\langle 00-1 | \frac{(r)_2}{a_0} \cdot \frac{(r)_2}{a_0} | 00-1 \rangle = \langle 010 | \frac{(r)_2}{a_0} \cdot \frac{(r)_2}{a_0} | 100 \rangle = 9 \quad (7.5)$$

beachtet worden.

Die dimensionslosen Größen K_2 und K_3 sind in Tab. 3 angegeben, die einzelnen Näherungen unterscheiden sich durch die Art, in der das Differentialgleichungssystem (5.8) gelöst wurde, durch den Wert von q in Gl. (6.4) und dadurch, ob der Lorentz-Weißkopf-Term [siehe Gl. (6.8)] mitgenommen wurde – ihm entspricht in Tab. 3 die Größe

$$LW^{(j)} := \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} (q^{(j)})^2 \exp\{-y_{\min}^{(j)}\} \quad (7.6)$$

– oder nicht.

Zum Inhalt der Tab. 3 ist zu bemerken:

1. Die Größen K_2 und K_3 stellen ein sehr empfindliches Maß für die Differenzen

$$\text{Re} \{ \langle 00-1 | \Phi_2 | 00-1 \rangle - \langle 00-1 | \Phi_2 | 00-1 \rangle_{\text{GKS}} \}$$

und

$$\text{Re} \{ \langle 010 | \Phi_2 | 100 \rangle - \langle 010 | \Phi_2 | 100 \rangle_{\text{GKS}} \}$$

dar. Bei $T = 10^4$ K und $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ z. B. führt ein relativer Unterschied zweier Werte für

$$\text{Re} \{ \langle 00-1 | \Phi_2 | 00-1 \rangle \}$$

Tab. 3. Die dimensionslosen Größen K_2 und K_3 aus den Gln. (7.2). Die Größe $LW^{(j)}$ für den Lorentz-Weißkopf-Term ist durch Gl. (7.6) erklärt. Die verschiedenen Näherungen sind durch folgende Eigenschaften gekennzeichnet:

Reine Dipol-Näherung [siehe Gl. (5.12)]:

α) Exakte Lösung durch elementare Funktionen³¹; $q = q^{(2)} := 1$. β) Wie α , zusätzlich Lorentz-Weißkopf-Term. γ) Störungsrechnung 2. Ordnung; $q = q^{(1)}$ [siehe Gl. (7.4)]; zusätzlich Lorentz-Weißkopf-Term.

Wechselwirkung exakt [siehe Gl. (5.11) und²⁸] berücksichtigt:

δ) Numerische Integration; $q = q^{(2)}$. ε) Wie δ), zusätzlich Lorentz-Weißkopf-Term.

Näherung	T (K)	$N_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ K_2	K_3	$N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ K_2	K_3
α)	$5 \cdot 10^3$	1,65 ₂	– 1,49 ₇	1,64 ₆	– 1,47 ₅
	10^4	1,65 ₂	– 1,49 ₇	1,65 ₁	– 1,49 ₁
	$1,5 \cdot 10^4$	1,65 ₂	– 1,49 ₇	1,65 ₂	– 1,49 ₅
	$2 \cdot 10^4$	1,65 ₂	– 1,49 ₇	1,65 ₂	– 1,49 ₆
β)	wie α)	wie α) + $LW^{(2)}$ \approx wie α) + $\frac{1}{6}$	wie α)	wie α) + $LW^{(2)}$ \approx wie α) + $\frac{1}{6}$	wie α)
γ)	·/·	$LW^{(1)} \approx \frac{1}{9} = 1,77_8$	0	$LW^{(1)} \approx \frac{1}{9} = 1,77_8$	0
δ)	$5 \cdot 10^3$	1,71 ₅	– 1,53 ₃	1,72 ₆	– 1,49 ₈
	10^4	1,72 ₅	– 1,55 ₉	1,73 ₅	– 1,54 ₄
	$1,5 \cdot 10^4$	1,69 ₇	– 1,55 ₇	1,70 ₃	– 1,54 ₈
	$2 \cdot 10^4$	1,65 ₇	– 1,54 ₃	1,66 ₄	– 1,53 ₅
ε)	wie δ)	\approx wie δ) + $\frac{1}{6}$ (siehe β))	wie δ)	\approx wie δ) + $\frac{1}{6}$ (siehe β))	wie δ)

von 1,5% dazu, daß sich die entsprechenden Werte von K_2 bereits um 0,1 unterscheiden.

2. K_2 stimmt definitionsgemäß mit der ebenso bezeichneten Größe bei BSC überein, K_1 dort und K_3 hier sind mit dem gemeinsamen K_2 durch die Gleichung

$$K_1 = \frac{1}{3} (K_2 + 2 K_3) \quad (7.7)$$

verknüpft.

3. Die sehr schwache Temperaturabhängigkeit von K_2 und K_3 , die in den Fällen α) und β) zu bemerken ist, geht auf die untere Integrationsgrenze v_{\min} in Gl. (6.8) zurück und ist deshalb um so ausgeprägter, je höher die Elektronendichte und je niedriger die Temperatur ist.

$$\text{Für } K_2 = 1,65_2 \text{ und } K_3 = -1,49_7$$

findet man

$$K_1 = -0,44_7$$

im Gegensatz zu BSC, die

$$\text{und } \left. \begin{array}{l} K_1 = -0,39_0 \\ K_2 = 1,62 \end{array} \right\} \text{ unabhängig von } T$$

angeben.

Da es im reinen Dipol-Fall möglich ist, die Lösung des Differentialgleichungssystems (5.8) bzw. (A.5) durch elementare Funktionen exakt auszudrücken³¹ und das Gebietsintegral über ϱ und v in Gl. (6.8) auf ein einfaches Integral über v zurückzuführen (siehe Anhang A), sind die in der vorliegenden Arbeit für die Näherung α) gefundenen Werte von K_2 und K_3 und damit auch von K_1 wohl denen von BSC vorzuziehen.

4. Für die Näherung γ) sind bei BSC die Werte

$$K_1 = K_2 = 1$$

angegeben, aus denen infolge der Gl. (7.7) auch

$$K_3 = 1$$

folgen würde. Diese Werte sind falsch und auf das in den Gln. (6.12) und (6.12') erläuterte Mißverständnis zurückzuführen.

5. Je niedriger die Temperatur ist, desto größer ist wegen der Gl. (6.4) der Mittelwert derjenigen Stoßparameter, die auf den Bereich II' [siehe Gl. (6.2b')] entfallen. Infolgedessen sollte für

$$T \rightarrow 0$$

der Einfluß des Monopol- und des Quadrupol-Terms auf den Wert des Gebietsintegrals über ϱ und v in Gl. (6.8) immer mehr verschwinden, die Werte von K_2 und K_3 , die die Näherung δ) ergibt, sollten in die der Näherung α) übergehen.

Der Tab. 3 ist zu entnehmen, daß K_2 von seinem „reinen Dipol-Wert“ $K_2 = 1,65_2$ aus zunimmt, etwa bei $T = 10^4$ K ein Maximum durchläuft und dann abnimmt. In entsprechender Weise durchläuft K_3 ein Minimum⁴¹.

Die Werte von K_2 , die BSC angegeben haben, durchlaufen kein Maximum, sondern nehmen vom reinen Dipol-Wert aus monoton ab, im übrigen sind sie etwas kleiner.

6. Für hinreichend große Werte ϱ/λ wird $S_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) - 1$ immer besser durch die Näherung (6.11) für $n=2$ wiedergegeben. K_2 und K_3 , die ja aus dem Vergleich mit dieser Näherung hervorgehen, sollten daher von der Wahl des oberen Ab-

Tab. 4. Imaginärteile der Matrixelemente von Φ_2 bei exakter Berücksichtigung der Wechselwirkung. Die Imaginär-Teile der Matrixelemente von $\Phi_2 / [N_e (\hbar/m)^2 (8 \pi m/kT)^{1/2}]$ sind — wie die Größen K_2 und K_3 in Tab. 3 — dimensionslos, sie verschwinden im reinen Dipol-Fall. Für den Vergleich zwischen den Real- und den Imaginär-Teilen sind die Gln. (7.2) und (7.3) heranzuziehen.

T (K)	$N_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$		$N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	
	$\text{Im}\{\langle 00 - 1 \Phi_2 00 - 1 \rangle\}$ $N_e (\hbar/m)^2 (8 \pi m/kT)^{1/2}$	$\text{Im}\{\langle 010 \Phi_2 100 \rangle\}$ $N_e (\hbar/m)^2 (8 \pi m/kT)^{1/2}$	$\text{Im}\{\langle 00 - 1 \Phi_2 00 - 1 \rangle\}$ $N_e (\hbar/m)^2 (8 \pi m/kT)^{1/2}$	$\text{Im}\{\langle 010 \Phi_2 100 \rangle\}$ $N_e (\hbar/m)^2 (8 \pi m/kT)^{1/2}$
$5 \cdot 10^3$	0,595 ₇	0,376 ₈	0,595 ₃	0,370 ₄
10^4	0,737 ₀	0,611 ₈	0,737 ₀	0,609 ₅
$1,5 \cdot 10^4$	0,856 ₅	0,810 ₃	0,855 ₈	0,808 ₉
$2 \cdot 10^4$	0,989 ₈	0,966 ₀	0,989 ₈	0,965 ₂

⁴¹ Dieses Verhalten paßt erstaunlich gut zu dem Korrekturglied, das GRIEM¹³ eingeführt hat, um den Einfluß der Quadrupol-Terme näherungsweise zu erfassen. Da GRIEM

aber die zeitabhängige Störungsrechnung und auch ein anderes $\varrho_{\min}(v)$ gewählt hat, ist kaum zu entscheiden, ob die Übereinstimmung notwendig oder zufällig ist.

schneideradius bei der Integration über ϱ nahezu unabhängig sein.

Derselbe Sachverhalt erklärt im reinen Dipol-Fall, in dem $S_{2, \text{Ave}}(\varrho, \nu) - 1$ nur ϱ/λ abhängt, weshalb K_2 und K_3 von T und N_e nahezu unabhängig sind, wenn man von der unter 3. erwähnten schwachen Abhängigkeit absieht.

Zu der Tabelle 3, die nur die Real-Teile von $\langle 00-1 | \Phi_2 | 00-1 \rangle$ und $\langle 010 | \Phi_2 | 100 \rangle$ betrifft, tritt die Tab. 4.

Die Gl. (7.1a) ermöglicht es, aus den Werten der Tab. 4 auch den mit den sphärischen Eigenfunktionen gebildeten Matrixelementes

$$\text{Im}\{\langle 200 | \Phi_2 | 200 \rangle\}$$

zu berechnen. Dessen Werte ergaben sich um etwa 20% größer als bei BSC, bei dem Matrix-Element $\text{Im}\{\langle 00-1 | \Phi_2 | 00-1 \rangle\}$ ist die Abweichung erheblich geringer⁴². Die Imaginärteile kommen im Linienprofil als sehr kleine Verschiebung zum Vorschein, sie beträgt bei $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $T = 2 \cdot 10^4 \text{ K}$ etwa 10^{-3} \AA , und zwar in Richtung auf größere Wellenlängen hin, siehe in Abb. 4 die Kurven \square und \triangle einer- und die Kurven \times und \bullet andererseits, die den Näherungen δ) und ε) mit und ohne die Imaginärteile entsprechen.

Wie die Abb. 4 ferner zeigt, führen im Fall der Linie Ly- α die verschiedenen Näherungen, die über die zeitabhängige Störungsrechnung 2. Ordnung für den reinen Dipol-Fall ohne Lorentz-Weißkopf-Term (Kurve $+$) hinausgehen und auf die eine oder andere Weise die starken Stöße mit Stoßparametern

$$\varrho \leq \varrho_{\min}(\nu)$$

berücksichtigen, zu etwa demselben Ergebnis. Dieser Befund sollte nicht auf andere Linien verallgemeinert werden. Bei Ly- α liegen die Verhältnisse insoweit besonders einfach, als sogar noch in dem Wellenzahlbereich $-5 \text{ cm}^{-1} \leq \Delta \bar{\nu} \leq +5 \text{ cm}^{-1}$, der also doppelt so groß wie der in Abb. 4 wiedergegebene ist, der Beitrag der unverschobenen Mittelkomponente, für die nur das Matrixelement

$$\langle 00-1 | \Phi_2 | 00-1 \rangle$$

wichtig ist [siehe Gl. (4.5)], den der verschobenen Komponenten bei weitem (mehr als 23 zu 1) überwiegt.

⁴² In der vorliegenden Arbeit ist Φ_2 etwas anders erklärt [s. Gl. (2.2)] als bei BSC. Dies wirkt sich gerade so aus, daß die Imaginärteile der Matrixelemente von Φ_2 in den beiden Arbeiten einander entgegengesetzte Vorzeichen haben. Dieser Umstand ist beim Vergleich mit BSC zu beachten.

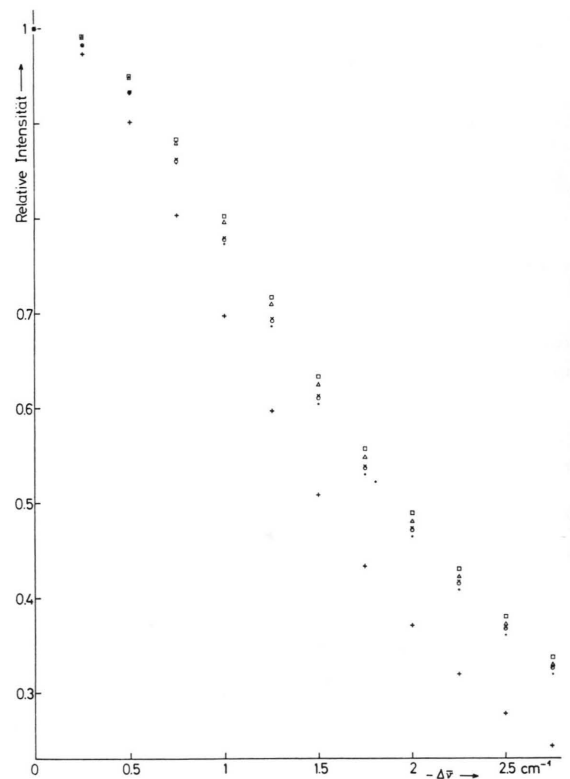


Abb. 4. Die relative Intensität $L(\bar{\nu}_{21} + \Delta \bar{\nu})/L(\bar{\nu}_{21})$ [siehe Gl. (2.1a)] im langwelligen Teil des Profils der Linie Ly- α als Funktion des Abstandes von der Linienmitte bei $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $T = 2 \cdot 10^4 \text{ K}$. \square Näherung ε) (siehe Überschrift zu Tab. 3); \triangle Näherung δ); \circ Näherung γ); $+$ Näherung γ), aber ohne Lorentz-Weißkopf-Term; entspr. der Kurve GKS bei BSC; \times Näherung ε), aber $\text{Im}\{\langle 00-1 | \Phi_2 | 00-1 \rangle\} = \text{Im}\{\langle 010 | \Phi_2 | 100 \rangle\} = 0$ gesetzt. \bullet Näherung δ), aber $\text{Im}\{\langle 00-1 | \Phi_2 | 00-1 \rangle\} = \text{Im}\{\langle 010 | \Phi_2 | 100 \rangle\} = 0$ gesetzt; entspricht der Kurve "This calculation" bei BSC.

Die beiden Kurven, die in Abb. 4 der vorliegenden Arbeit und in Abb. 3 bei BSC gemeinsam vorkommen (nämlich $+$ und \bullet hier, „GKS“ und „This calculation“ dort) stimmen sehr gut überein, wie z. B. die Angaben über den Unterschied der Halbwertsbreiten dieser beiden Kurven zeigen. BSC geben 21% an, in der vorliegenden Arbeit wurden 21,9% gefunden.

Als Mikrofeldverteilungsfunktion ist der Einfachheit halber die von Holtsmark benutzt worden, da es ja hier nur auf den Vergleich verschiedener Rechnungen für die Elektronenstoßdämpfung ankommt.

Die oben erwähnte Asymmetrie sollte nicht mit der Asymmetrie verwechselt werden, die im fernen Linienflügel zu erwarten und in erster Linie auf die

Inhomogenität des von den Ionen erzeugten elektrischen Mikrofeldes zurückzuführen ist⁴³.

Frau Dr. E. TREFFTZ hat dankenswerterweise die Arbeit durch Diskussionen gefördert und das Manuskript kritisch durchgesehen. Der Verfasser dankt ferner Frau A. HRALA und Frau A. TROSTEL für die Hilfe bei den numerischen Rechnungen an der elektronischen Rechenmaschine G 3 des Max-Planck-Instituts für Physik und Astrophysik, Herrn K. KATTERBACH † für die zur Kontrolle unabhängig ausgeführte Berechnung zahlreicher Integrale, Frau D. LINDNER und Frau R. MIRMIKLIS für das Schreiben des Manuskriptes und Frau G. WIMMERSBERGER für das Anfertigen der Zeichnungen.

Anhang A

Die numerische Berechnung der Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperators für vollendete Stöße

Da der Stoßparameter ρ und die Geschwindigkeit v in dem Koordinatensystem S_0 die durch die Gl. (3.7) angegebenen Richtungen haben, gelten im Fall $n=2$ für die mit den Eigenfunktionen $u_a(x_{01}, x_{02}, x_{03})$ gebildeten Matrixelemente von $V_2(t)$, soweit sie $\neq 0$ sind, die Gln. (A.2), in denen die folgenden Abkürzungen vorkommen:

$$\tilde{R}(t) := R(t)/a_0, \quad (\text{A.1a})$$

$$\tilde{F}(\tilde{R}) := 1 - e^{-\tilde{R}} \sum_{k=0}^4 \tilde{R}^k/k!, \quad (\text{A.1b})$$

$$\tilde{G}(\tilde{R}) := 1 - e^{-\tilde{R}} \sum_{k=0}^5 \frac{\tilde{R}^k}{k!} + \frac{\tilde{R}^5 \cdot e^{-\tilde{R}}}{720}. \quad (\text{A.1c})$$

a_0 bezeichnet den 1. Bohrschen Radius, λ die bereits in Gl. (6.2) eingeführte de Broglie-Wellenlänge.

Monopol:

$$\begin{aligned} \langle 00-1 | V_2^{(0)}(t) | 00-1 \rangle &= \langle 00+1 | V_2^{(0)}(t) | 00+1 \rangle \\ &= -\frac{e^2}{4a_0} \exp\{-\tilde{R}(t)\} \left\{ \frac{4}{\tilde{R}(t)} + 3 + \tilde{R}(t) + \frac{\tilde{R}^2(t)}{6} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.2a})$$

$$\begin{aligned} \langle 010 | V_2^{(0)}(t) | 010 \rangle &= \langle 100 | V_2^{(0)}(t) | 100 \rangle \quad (\text{A.2b}) \\ &= -\frac{e^2}{2a_0} \exp\{-\tilde{R}(t)\} \left\{ \frac{2}{\tilde{R}(t)} + \frac{3}{2} + \frac{\tilde{R}(t)}{2} + \frac{\tilde{R}^2(t)}{6} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 010 | V_2^{(0)}(t) | 100 \rangle &= \langle 100 | V_2^{(0)}(t) | 010 \rangle \\ &= -\frac{e^2}{a_0} \exp\{-\tilde{R}(t)\} \frac{\tilde{R}^2(t)}{24}. \end{aligned} \quad (\text{A.2c})$$

Dipol:

$$\begin{aligned} \langle 00-1 | V_2^{(1)}(t) | 010 \rangle &= \langle 00-1 | V_2^{(1)}(t) | 100 \rangle \\ &= \langle 010 | V_2^{(1)}(t) | 00-1 \rangle = \langle 010 | V_2^{(1)}(t) | 00+1 \rangle \\ &= \langle 100 | V_2^{(1)}(t) | 00-1 \rangle = \langle 100 | V_2^{(1)}(t) | 00+1 \rangle \\ &= \langle 00+1 | V_2^{(1)}(t) | 010 \rangle = \langle 00+1 | V_2^{(1)}(t) | 100 \rangle \\ &= -\frac{3e^2}{2} \frac{v(t-t_0)}{R^3(t)} a_0 \tilde{F}(\tilde{R}(t)), \end{aligned} \quad (\text{A.2d})$$

$$\begin{aligned} \langle 010 | V_2^{(1)}(t) | 010 \rangle &= -\langle 100 | V_2^{(1)}(t) | 100 \rangle \\ &= -3e^2 \frac{v(t-t_0)}{R^3(t)} \tilde{F}(\tilde{R}(t)). \end{aligned} \quad (\text{A.2e})$$

Quadrupol:

$$\begin{aligned} \langle 00-1 | V_2^{(2)}(t) | 00-1 \rangle &= \langle 00+1 | V_2^{(2)}(t) | 00+1 \rangle \\ &= \langle 010 | V_2^{(2)}(t) | 100 \rangle = \langle 100 | V_2^{(2)}(t) | 010 \rangle \\ &= -\langle 010 | V_2^{(2)}(t) | 010 \rangle = -\langle 100 | V_2^{(2)}(t) | 100 \rangle \\ &= 3e^2 \frac{a_0^2}{R^5(t)} \tilde{G}(\tilde{R}(t)) [(v(t-t_0))^2 - 2\rho^2], \end{aligned} \quad (\text{A.2f})$$

$$\begin{aligned} \langle 00-1 | V_2^{(2)}(t) | 00+1 \rangle &= \langle 00+1 | V_2^{(2)}(t) | 00-1 \rangle \\ &= 9e^2 \frac{a_0^2}{R^5(t)} \tilde{G}(\tilde{R}(t)) (v(t-t_0))^2; \end{aligned} \quad (\text{A.2g})$$

$$\begin{aligned} \langle 00-1 | V_2^{(2)}(t) | 010 \rangle &= \langle 010 | V_2^{(2)}(t) | 00-1 \rangle \\ &= \langle 010 | V_2^{(2)}(t) | 00+1 \rangle = \langle 00+1 | V_2^{(2)}(t) | 010 \rangle \\ &= -\langle 00-1 | V_2^{(2)}(t) | 100 \rangle = -\langle 100 | V_2^{(2)}(t) | 00-1 \rangle \\ &= -\langle 100 | V_2^{(2)}(t) | 00+1 \rangle = -\langle 00+1 | V_2^{(2)}(t) | 100 \rangle \\ &= 9e^2 \frac{a_0^2}{R^5(t)} \tilde{G}(\tilde{R}(t)) v(t-t_0) \rho. \end{aligned} \quad (\text{A.2h})$$

Wenn man annimmt, daß das Stör-Elektron in dem zu Beginn des Abschnittes 7 erläuterten Sinne nicht in das Atom eindringe, verschwinden die Matrixelemente von $V^{(0)}(t)$ und es wird

$$\tilde{F}(\tilde{R}(t)) = \tilde{G}(\tilde{R}(t)) = 1. \quad (\text{A.3})$$

Führt man statt t die dimensionslose Größe

$$\tau := v(t-t_0)/\rho \quad (\text{A.4})$$

als unabhängige Veränderliche ein, so folgt aus Gl. (5.8) für den vorliegenden Fall das Differentialgleichungssystem

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \langle \alpha | U_{2,c}(\tau, \tau'; \rho, v, 0) | \alpha' \rangle \quad (\text{A.5a})$$

$$= -i \sum_{\alpha''} C_{\alpha\alpha''} \left(\tau; \frac{\rho}{\lambda}; \frac{a_0}{\lambda} \right) \langle \alpha'' | U_{2,c}(\tau, \tau'; \rho, v, 0) | \alpha' \rangle$$

mit der Anfangsbedingung

$$\langle \alpha'' | U_{2,c}(\tau', \tau'; \rho, v, 0) | \alpha' \rangle = \delta_{\alpha'', \alpha'}. \quad (\text{A.5b})$$

Der Koeffizient $C_{\alpha\alpha''}(\tau; \rho/\lambda; a_0/\lambda)$ ist durch die Gleichung

$$C_{\alpha\alpha''} \left(\tau; \frac{\rho}{\lambda}; \frac{a_0}{\lambda} \right) := \frac{1}{\hbar} \frac{1}{d\tau/dt} \langle \alpha | V(t-t_0) | \alpha'' \rangle \quad (\text{A.6})$$

⁴³ G. V. SHOLIN, Optika i Spektroskopiya **26**, 489 [1969]; Optics and Spectroscopy **26**, 275 [1969].

erklärt, auf deren rechter Seite jetzt genauer $V(t-t_0)$ statt bisher $V(t)$ geschrieben ist.

Gemäß der Definitionsgleichung (2.3) stimmt die Matrix von $S_{2,c}(\varrho, v)$ mit derjenigen Lösung des Differentialgleichungssystems (A.5) überein, die man erhält, wenn man in Gl. (A.6)

$$t_0 = 0$$

setzt und die Integration von $\tau = \tau' = -\infty$ bis $\tau = +\infty$ erstreckt. Es zeigte sich, daß für

$$|\tau| > \tau_{\text{Dfgl}} \quad (\text{A.7})$$

die zeitabhängige Störungsrechnung 2. Ordnung die Lösung des Differentialgleichungssystems (A.5) sehr genau ergibt, wenn τ_{Dfgl} groß genug gewählt ist:

$$\tau_{\text{Dfgl}} = 16. \quad (\text{A.8})$$

Für $|\tau| < \tau_{\text{Dfgl}}$ (A.9)

läßt sich die numerische Integration nicht umgehen, es wurde das Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung (siehe z. B. ⁴⁴) angewandt, dessen Verallgemeinerung auf den vorliegenden Fall – die Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperators sind komplexwertig – trivial ist. Die Matrix von $S_{2,c}(\varrho, v)$ müßte unitär sein. Die Abweichungen davon erwiesen sich als sehr gering:

$$\sum_{\alpha} \langle \alpha' | S_{2,c}(\varrho, v) | \alpha \rangle \langle \alpha'' | S_{2,c}(\varrho, v) | \alpha \rangle^* = \delta_{\alpha', \alpha''} + \varepsilon, \quad (\text{A.10a})$$

$$|\varepsilon| < 5 \cdot 10^{-4} \quad (\text{A.10b})$$

für alle ϱ und v , für die die Matrix von $S_{2,c}(\varrho, v)$ auf die oben beschriebene Weise berechnet worden war.

Dieser Bereich in ϱ und v ist durch die Ungleichungen

$$1 \leq \varrho/\lambda \leq 30 \quad (\text{A.11a})$$

$$\text{und} \quad 0 \leq a_0/\lambda \leq 1 \quad (\text{A.11b})$$

festgelegt.

Die untere Grenze für ϱ/λ ist aus den Gln. (6.3) und (6.4) bekannt, die obere ist so gewählt, daß die über das gesamte Zeitintervall $\tau = \tau' = -\infty$ bis $\tau = +\infty$ erstreckte zeitabhängige Störungsrechnung 3. Ordnung ausreicht, $S_{2,c}(\varrho, v)$ genau zu berechnen, falls

$$\varrho/\lambda > 30 \quad (\text{A.12})$$

ist und a_0/λ in dem Bereich (A.11b) liegt.

Die obere Grenze von a_0/λ wurde lediglich deshalb bei 1 gezogen, weil die Gesamt-Rechenzeit nicht zu lang werden sollte. Bei Maxwell'scher Geschwindigkeitsverteilung entfallen nur etwa 2,1% der Stör-Elektronen auf den Geschwindigkeitsbereich

$$v > 2,4 \bar{v}. \quad (\text{A.13a})$$

In dieser Ungleichung bezeichnet \bar{v} die mittlere thermische Geschwindigkeit:

$$\bar{v} := \sqrt{8kT/\pi m}. \quad (\text{A.13b})$$

Vernachlässigt man diese wenigen Elektronen, so bedeutet die Ungleichung (A.11b), daß die Temperatur der Stör-Elektronen nicht zu hoch sein darf:

$$T \leq 2 \cdot 10^4 \text{ K}. \quad (\text{A.14})$$

Wie man aus den Gln. (A.8), (A.11) und (A.12) leicht ersieht, ist $\tilde{R}(t)$ in den Zeitintervallen, für die die Störungsrechnung 2. und 3. Ordnung angewandt wurde, so groß:

$$\tilde{R}(t) = (\varrho/a_0) \sqrt{1 + \tau^2} > 16 \text{ bzw. } 30, \quad (\text{A.15})$$

daß die Matrixelemente des Monopolterms $V^{(0)}$ vernachlässigt und im übrigen die Gl. (A.3) benutzt werden dürfen.

Um in Gl. (6.8) die Integration über ϱ/λ schnell und genau, aber ohne zu großen numerischen Aufwand ausführen zu können, wurden die Matrixelemente von $S_{2,c}(\varrho, v) - 1$ bei festem v für 21 in dem Intervall (A.11a) geeignet verteilte Werte von ϱ/λ numerisch berechnet. Durch die so gewonnenen Punkte ϱ/λ , Re bzw. Im $\{S_{2,c}(\varrho, v) - 1\}$ wurde die Spline-Funktion (siehe z. B. ⁴⁵) vom Grade 3 gelegt, die ja ein Polynom in ϱ/λ und daher in elementarer Weise zu integrieren ist. Die Integration über v wurde mit Hilfe der 4-Punkte-Integrationsformel von Lagrange mit konstanter Schrittweite ausgeführt und nur bis $v = 2,4 \bar{v}$ erstreckt, diese Näherung ist bereits im Anschluß an Gl. (A.13) begründet. In dem Teil des Integrationsgebietes, der der Ungleichung (A.12) entspricht, liefert die dort erwähnte Störungsrechnung 3. Ordnung für die Matrixelemente von $S_{2,c}(\varrho, v) - 1$ Funktionen von ϱ/λ und a_0/λ , die elementar integriert werden können.

Im reinen Dipol-Fall ist die Lage viel einfacher, da der Koeffizient $C_{\alpha\alpha''}$ in Gl. (A.6) in diesem Fall gar nicht von a_0/λ und infolgedessen der Operator

⁴⁴ L. COLLATZ, Numerische Behandlung von Differentialgleichungen, 2. Auflage, Springer-Verlag, Berlin 1955.

⁴⁵ R. BURLISCH u. H. RUTISHAUSER, Interpolation und genäherte Quadratur; *Mathematische Hilfsmittel des Ingenieurs*, Ed. R. SAUER u. I. SZABO, Springer-Verlag, Berlin 1968, Teil III, S. 232.

$S_{2,c}(\varrho, v)$ nur von dem Verhältnis ϱ/λ abhängt. In Gl. (6.8) kann aus diesem Grunde über v partiell integriert werden, es bleibt statt des Gebietsintegrals nur ein einfaches Integral (über v) nach. Da dessen Integrand zudem noch aus elementaren Funktionen besteht³¹ (siehe auch Anhang B), ist es möglich, mit Hilfe der 4-Punkte-Integrationsformel von Lagrange durch hinreichend kleine Wahl der Schrittweite den Wert des Integrals sehr genau zu berechnen.

Anhang B

Die Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperators für vollendete Stöße im reinen Dipol-Fall

Wie mehrfach erwähnt, ist es im reinen Dipol-Fall [siehe Gl. (5.12)] möglich, die Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperators durch elementare Funktionen exakt auszudrücken.

Das Verfahren wird in³¹ dargestellt, in diesem Anhang werden die Endergebnisse für vollendete Stöße und für die Hauptquantenzahl $n=2$ ohne Beweis angegeben:

$$\langle 00-1 | S_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 00-1 \rangle = \frac{1 + (-\delta^2 - 2) \cos(\sigma\pi)}{3\sigma^2}, \quad (\text{B.1a})$$

$$\langle 010 | S_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 010 \rangle = \frac{2 + (\delta^2 - 1) \cos(\sigma\pi)}{3\sigma^2}, \quad (\text{B.1b})$$

$$\langle 010 | S_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 100 \rangle = \frac{1 + (2\delta^2 + 1) \cos(\sigma\pi)}{3\sigma^2}. \quad (\text{B.1c})$$

$$\text{Dabei ist} \quad \sigma := \sqrt{1 + \delta^2} \quad (\text{B.2a})$$

$$\text{und} \quad \delta := \frac{e^2 \langle 100 | x_3 | 100 \rangle}{\hbar v \varrho} = 3 \frac{\lambda}{\varrho}. \quad (\text{B.2b})$$

Für schwache Stöße, d. h. für

$$\frac{\lambda}{\varrho} \ll 1 \quad \text{und damit auch} \quad |\delta| \ll 1 \quad (\text{B.3})$$

führt die Entwicklung nach Potenzen von δ auf die Gleichungen

$$\langle 00-1 | S_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 00-1 \rangle = 1 - \frac{2}{3} \delta^2 + \dots, \quad (\text{B.4a})$$

$$\langle 010 | S_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 010 \rangle = 1 - \frac{4}{3} \delta^2 + \dots, \quad (\text{B.4b})$$

$$\langle 010 | S_{2, \text{Ave}}(\varrho, v) | 100 \rangle = -\frac{2}{3} \delta^2 + \dots. \quad (\text{B.4c})$$

Diese Gleichungen stimmen mit denen der zeitabhängigen Störungsrechnung 2. Ordnung [siehe Gl. (6.11a)] überein, wie man sofort sieht, wenn man neben den Gln. (7.5) auch noch die Gleichung

$$\langle 010 | \left| \frac{(\mathbf{r})_z}{a_0} \cdot \frac{(\mathbf{r})_z}{a_0} \right| | 010 \rangle = 18 \quad (\text{B.5})$$

beachtet.