

elements of the Green-operator which we can calculate with our model. If, for example, m should be an one particle operator, the characterizing quantum numbers of the model states must be the same as for a one particle state.

In Sect. 4 we considered an example for such a model space. In this case, the self energy operator of the retarded Green-function is the effective interaction. Migdal used the self energy operator to give a new justification of the one particle model. Here,

we do not want to prefer his justification, but would rather state that there are various possibilities.

In another paper⁵ we used the quasiparticle quasihole space as modelspace to establish a model to determine excitation energies and transition probabilities of atomic nuclei. The equations derived show a remarkable correspondence to those in Migdal's⁶ quasiparticle theory.

I am indebted to Prof. Dr. G. EDER and Dr. I. GANS for valuable and interesting discussions.

¹ H. BOLTERAUER, Z. Physik **235**, 474 [1970], this article will be referred to as A.

² T. T. S. KUO and G. E. BROWN, Nucl. Phys. **85**, 40 [1966].

³ M. KLEBER, Z. Physik **239**, 395 [1970].

⁴ B. R. BARRETT and M. W. KIRSON, Nucl. Phys. A **148**, 145 [1970].

⁵ H. BOLTERAUER, Z. Naturforsch. **27 a**, 1 [1972].

⁶ A. B. MIGDAL, Theory of Finite Fermi Systems, Interscience Publ., New York 1967.

⁷ H. FESHBACH, Ann. Phys. **5**, 357 [1958].

⁸ D. MÜLLER, Z. Phys. **241**, 466 [1971].

Induzierte Stoßprozesse

G. FRÖHLICH und K. H. SEWING

Institut für Kernenergetik der Universität Stuttgart

(Z. Naturforsch. **27 a**, 1558—1563 [1972]; eingegangen am 14. Oktober 1972)

Stimulated Collision Processes

Similar to the stimulated emission in radiation processes there are stimulated collisions in collision processes too. These stimulated collisions do not lead to an amplification of the electron transitions like in radiation processes but attenuate the transitions. So the occurrence of stimulated collisions can stabilize the population density of the levels.

1. Einleitung

Nachdem bei den Strahlungsprozessen durch den Bau von Lasern und Masern die induzierte Emission eine große Bedeutung erlangt hat, ist es angebracht zu untersuchen, ob auch bei Stoßprozessen induzierte Übergänge auftreten können und was sie bewirken können.

Historisch gesehen war die Situation, die zu der Auffindung der induzierten Emission führte, anders als sie jetzt bei den Stoßprozessen vorliegt. EINSTEIN versuchte mit seinen Veröffentlichungen^{1, 2} eine neue Ableitung der kurz vorher gefundenen Strahlungsformel zu geben, und zwar durch Einführung von Hypothesen über die Ein- und Ausstrahlung der Atome oder Moleküle. Bei den Elektron-Atomstößen dagegen kann man heute davon ausgehen, daß die Energieverteilungsfunktion der Elektronen

im thermodynamischen Gleichgewicht (Maxwell-Verteilung bei Voraussetzung der klassischen Statistik und Fermi-Verteilung bei Voraussetzung der Quantenstatistik) als allgemein bekannt und gesichert angesehen werden können. Das ermöglicht bei den Stößen ein anderes Vorgehen als das von Einstein. Durch Vorgabe der Fermi-Verteilung sowie der bekannten Ausdrücke für die Elektronenstoßanregung und der Stöße zweiter Art läßt sich die Existenz von induzierten Stößen und eine Beziehung zur Berechnung ihrer Größe herleiten (Abschn. 3). Zum Beweis, daß dieser Weg gangbar ist, ist es zweckmäßig Analogien zwischen Stoß- und Strahlungsprozessen herauszuarbeiten und zu zeigen, daß die induzierte Emission auf eine ähnliche Weise (unter Vorgabe der Planckschen Formel und der Ausdrücke von spontaner Emission und normaler Absorption) herleitbar ist (Abschn. 2). Bei dieser Gegenüberstellung entspricht der Fermi-Verteilung die Plancksche Formel und da für $e^{E/kT} \gg 1$ die Fermi-Verteilung in die Maxwell-Verteilung und die Plancksche For-

Sonderdruckanforderungen an Dr. G. FRÖHLICH, Institut für Kernenergetik der Universität Stuttgart, D-7000 Stuttgart 80, Pfaffenwaldring 31.



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.

mel in das Wiensche Strahlungsgesetz übergeht, entspricht der Maxwell-Verteilung das Wiensche Strahlungsgesetz. Im thermodynamischen Gleichgewicht sind die Übergangszahlen entsprechender Anregungsreaktionen und Rückreaktionen gleich. Diese Gleichheit drückt Gl. (10) (in Abschn. 3) für Stöße unter Annahme der Maxwell-Verteilung und Gl. (1) (in Abschn. 2) für Strahlung unter der Annahme des Wienschen Strahlungsgesetzes aus.

2. Strahlungsprozesse

Angenommen, es würden nur die spontane Emission und die Strahlungsabsorption als Strahlungsübergänge existieren, dann sind diese im thermodynamischen Gleichgewicht gleichzusetzen.

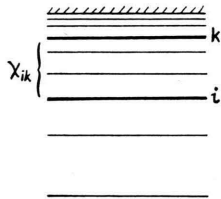


Abb. 1. Energieniveauschema eines beliebigen Atoms.

Zwischen den Niveaus i und k ergibt sich damit die Beziehung:

$$N_k \cdot A_{ki} = N_i B_{ik} u_{vik} \quad (1)$$

A_{ki} und B_{ik} sind die Einsteinschen Übergangswahrscheinlichkeitskoeffizienten, N_k und N_i die Besetzungsdichten und u_{vik} die Strahlungsdichte. Im thermodynamischen Gleichgewicht ist:

$$N_k/N_i = (g_k/g_i) e^{-h\nu_{ik}/kT} = (g_k/g_i) e^{-\chi_{ik}/kT}; \quad (2)$$

g_k und g_i sind die statistischen Gewichte, h die Planck-Konstante, k die Boltzmann-Konstante, T die Temperatur, ν_{ik} die Strahlungsfrequenz und χ_{ik} die Anregungsenergie für den Übergang von i nach k .

Setzt man Gl. (2) in Gl. (1) und für die Strahlungsdichte u_{vik} das Wiensche Strahlungsgesetz:

$$u_{vik} = (8\pi h \nu_{ik}^3/c^3) e^{-h\nu_{ik}/kT} \quad (3)$$

ein (c = Lichtgeschwindigkeit), dann ergibt sich eine temperaturunabhängige Beziehung zwischen den Einsteinschen Übergangswahrscheinlichkeiten:

$$A_{ki} = \frac{g_i}{g_k} \frac{8\pi h \nu_{ik}^3}{c^3} B_{ik} \quad (4)$$

Setzt man dagegen in Gl. (1) anstatt Gl. (3) für u_{vik} die richtige Strahlungsdichte, nämlich das

Plancksche Strahlungsgesetz

$$u_{vik} = (8\pi h \nu_{ik}^3/c^3) \cdot 1/(e^{h\nu_{ik}/kT} - 1), \quad (5)$$

ein, dann ergibt sich an Stelle von Gl. (4):

$$A_{ki} e^{h\nu_{ik}/kT} - A_{ki} = (g_i/g_k) (8\pi h \nu_{ik}^3/c^3) B_{ik} e^{h\nu_{ik}/kT} \quad (6)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeiten sind atomare Größen und sollten damit unabhängig von der Temperatur sein. Diese Eigenschaft ist in Gl. (6) nicht enthalten, wir fügen deshalb auf der rechten Seite von (6) die Konstante $-C$ ein:

$$A_{ki} e^{h\nu_{ik}/kT} - A_{ki} = (g_i/g_k) (8\pi h \nu_{ik}^3/c^3) B_{ik} e^{h\nu_{ik}/kT} - C \quad (6a)$$

Durch Gleichsetzung der ersten beiden Ausdrücke der rechten und linken Seite von Gl. (6a) ergibt sich wiederum die Beziehung von Gl. (4) und durch Gleichsetzen der zweiten Ausdrücke:

$$A_{ki} = C \quad (7)$$

Um die physikalische Bedeutung des Hinzufügens der Konstanten C in Gl. (6a) zu erkennen, ist es zweckmäßig, die Umformung von (1) nach (6) jetzt von (6a) aus zurückzuvollziehen. Dies führt auf folgende erweiterte Beziehung:

$$N_k A_{ki} = N_i B_{ik} u_{vik} - N_k (c^3/8\pi h \nu_{ik}^3) C u_{vik} \quad (8)$$

Die Größe $(c^3/8\pi h \nu_{ik}^3) \cdot C$ gibt die Übergangswahrscheinlichkeit für den zusätzlichen Prozeß an, die zweckmäßigerweise gleich B_{ki} gesetzt wird:

$$N_k A_{ki} + N_k B_{ki} u_{vik} = N_i B_{ik} u_{vik} \quad (8a)$$

Aus Gl. (8) bzw. (8a) sieht man, daß der induzierte Strahlungsprozeß die Emission verstärkt und daß er von der Größe des Strahlungsfeldes abhängt.

Die Größe B_{ki} läßt sich wegen Gl. (7) aus folgender Beziehung ausrechnen:

$$B_{ki} = (8\pi h \nu_{ik}^3/c^3) A_{ki} \quad (9)$$

3. Stoßprozesse bei Übergängen zwischen zwei Atomniveaus

Es sind zwei Arten von Stoßprozessen bekannt, die Übergänge zwischen den Atomniveaus bewirken können: die Stoßanregung und die Stöße zweiter Art. Die Anzahl der Stoßanregungsprozesse zwischen zwei Niveaus ist im thermodynamischen Gleichgewicht gleich der Anzahl der Stöße zweiter Art. Zwischen den Niveaus i und k ergibt sich damit

für Elektronenstöße im Energiebereich dE die Beziehung (Atome als ruhend angenommen):

$$N_i N_e \int \frac{2}{m} q_{ik} f(E_1) \sqrt{E_1} dE_1 \\ = N_k N_e \int \frac{2}{m} \bar{q}_{ki} f(E_2) \sqrt{E_2} dE_2, \quad (10)$$

wobei zwischen E_1 und E_2 die Beziehung

$$E_1 = \chi_{ik} + E_2 \quad \text{bzw.} \quad dE_1 = dE_2 = dE \quad (11)$$

besteht.

N_e ist die Elektronendichte, q_{ik} der Stoßanregungsquerschnitt, \bar{q}_{ki} der Wirkungsquerschnitt für Stöße zweiter Art, m die Elektronenmasse, E_1 die Energie der Elektronen vor dem Stoß, E_2 die Energie der Elektronen nach dem Stoß, χ_{ik} die Energiedifferenz zwischen den Niveaus i und k , $f(E)$ die Verteilungsfunktion.

Im thermodynamischen Gleichgewicht ist N_k/N_i wiederum durch Gl. (2) gegeben. Setzt man Gl. (2) in Gl. (10) und für $f(E)$ die Maxwell-Verteilung der Elektronen ein, dann ergibt sich die als Klein-Rosseland-Beziehung bekannte Gleichung:

$$g_i q_{ik} E_1 = g_k \bar{q}_{ki} E_2. \quad (12)$$

Zur Beschreibung der Verteilungsfunktion der freien Elektronen im thermodynamischen Gleichgewicht ist die klassische Beziehung von Maxwell (entsprechend der Wienschen Formel bei der Strahlung) nur näherungsweise geeignet. Die exakte Beschreibung ist die Fermi-Verteilung (entsprechend der Planck-Funktion bei der Strahlung):

$$\frac{4g\sqrt{2}\pi m^{3/2}}{h^3} E_1 q_{ik} \frac{1}{e^\alpha e^{E_1/kT} + 1} + C_2 \frac{1}{g_i} e^{-\chi_{ik}/kT} \frac{4g\sqrt{2}\pi m^{3/2}/h^3}{(e^\alpha e^{E_1/kT} + 1)(e^\alpha e^{E_2/kT} + 1)} \\ = \frac{g_k}{g_i} e^{-\chi_{ik}/kT} \frac{4g\sqrt{2}\pi m^{3/2}}{h^3} E_2 \bar{q}_{ki} \frac{1}{e^\alpha e^{E_2/kT} + 1} + C_1 \frac{1}{g_i} \frac{4g\sqrt{2}\pi m^{3/2}/h^3}{(e^\alpha e^{E_1/kT} + 1)(e^\alpha e^{E_2/kT} + 1)}. \quad (17)$$

Nach Berücksichtigung von Gl. (2) und Gl. (13) ergibt sich an Stelle von Gl. (10):

$$N_i N_e \sqrt{2/m} q_{ik} f(E_1) \sqrt{E_1} dE + N_k N_e^2 \sqrt{2/m} \frac{C_2 h^3}{g_k 4g\sqrt{2} m^{3/2} \sqrt{E_1 E_2}} f(E_1) f(E_2) dE \\ = N_k N_e \sqrt{2/m} \bar{q}_{ki} f(E_2) \sqrt{E_2} dE + N_i N_e^2 \sqrt{2/m} \frac{C_1 h^3}{g_i 4g\sqrt{2} m^{3/2} \sqrt{E_1 E_2}} f(E_1) f(E_2) dE. \quad (17a)$$

Gegenüber (10) treten zwei zusätzliche Terme auf, die wir analog zu (8) als neue Prozesse betrachten.

Wie man sieht, sind für das Zustandekommen dieser neuen Prozesse 3 Teilchen notwendig (zwei Elektronen und ein Atom). Es ist deshalb zweck-

$$f(E) = \frac{4g\sqrt{2}m^{3/2}}{N_e h^3} \sqrt{E} \frac{1}{e^\alpha e^{E/kT} + 1}. \quad (13)$$

Setzt man Gl. (13) und (2) in Gl. (10) ein, ergibt sich:

$$g_i q_{ik} E_1 e^\alpha e^{E_2/kT} + g_i q_{ik} E_1 = g_k \bar{q}_{ki} E_2 e^\alpha e^{E_2/kT} \\ + g_k \bar{q}_{ki} E_2 e^{-\chi_{ik}/kT}. \quad (14)$$

Diese Gleichung muß für jede beliebige Temperatur gültig sein. Es muß also jedem Glied auf der rechten Seite der Gl. (14) ein Glied auf der linken Seite gleich sein. Gleichsetzen der ersten Glieder auf beiden Seiten ergibt wiederum die Klein-Rosseland-Beziehung. Die zweiten Glieder können jedoch nicht einander gleichgesetzt werden, da das eine davon temperaturabhängig ist und das andere nicht. Die Wirkungsquerschnitte sind atomare Größen und damit unabhängig von der Temperatur. Diesen Widerspruch in Gl. (14) können wir dadurch lösen, daß wir auf der rechten Seite eine Konstante C_1 (bezüglich der Temperatur) einführen und auf der linken Seite eine Konstante $C_2 \cdot e^{-\chi_{ik}/kT}$:

$$g_i q_{ik} E_1 e^\alpha e^{E_2/kT} + g_i q_{ik} E_1 + C_2 e^{-\chi_{ik}/kT} \quad (14a) \\ = g_k \bar{q}_{ki} E_2 e^\alpha e^{E_2/kT} + g_k \bar{q}_{ki} E_2 e^{-\chi_{ik}/kT} + C_1.$$

Neben der Klein-Rosseland-Beziehung besteht damit durch Vergleich der entsprechenden Gleichungen:

$$C_1 = g_i q_{ik} E_1 \quad (15)$$

und

$$C_2 = g_k \bar{q}_{ki} E_2. \quad (16)$$

Die Bedeutung der von uns hinzugefügten Glieder erkennt man, wenn wir die Gl. (14a) so umformen, daß die beiden Ausdrücke, die in Gl. (10) vorkommen, wieder entstehen. Es ergibt sich:

mäßig, diesen Ausdrücken die Form von Dreierstoßreaktionen zu geben:

$$\frac{2}{m} \sqrt{E_1} \sqrt{E_2} f(E_1) f(E_2) \sigma dE.$$

Die einzuführenden Wirkungsquerschnitte nennen wir $\bar{\sigma}_{ki}$ und σ_{ik} . Dadurch erhält Gl. (17 a) die folgende Form:

$$\begin{aligned} N_i N_e \sqrt{2/m} q_{ik} f(E_1) dE \\ + N_k N_e^2 (2/m) \bar{\sigma}_{ki} f(E_1) f(E_2) \sqrt{E_1} \sqrt{E_2} dE \\ = N_k N_e \sqrt{2/m} \bar{q}_{ki} f(E_2) dE_2 \\ + N_i N_e^2 (2/m) \sigma_{ik} f(E_1) f(E_2) \sqrt{E_1} \sqrt{E_2} dE, \end{aligned} \quad (18)$$

mit (19)

$$\sqrt{\frac{2}{m}} \frac{C_2 h^3}{g_i 4 g \sqrt{2} m^{3/2} \pi \sqrt{E_1} \sqrt{E_2}} = \frac{2}{m} \bar{\sigma}_{ki} \sqrt{E_1} \sqrt{E_2}$$

und (20)

$$\sqrt{\frac{2}{m}} \frac{C_1 h^3}{g_i 4 g \sqrt{2} m^{3/2} \pi \sqrt{E_1} \sqrt{E_2}} = \frac{2}{m} \sigma_{ik} \sqrt{E_1} \sqrt{E_2}.$$

Im weiteren werden wir die beiden neuen Prozesse entsprechend Gl. (8 a) als induzierte Stoßprozesse bezeichnen. Den zu N_i (Dichte des unteren Niveaus) proportionalen Ausdruck nennen wir induzierte

Stoßanregung und den zu N_k proportionalen Ausdruck entsprechend induzierten Stoß zweiter Art. Die induzierten Wirkungsquerschnitte $\bar{\sigma}_{ki}$ und σ_{ik} lassen sich aus den bisher bekannten Wirkungsquerschnitten q_{ki} und \bar{q}_{ik} berechnen. Aus Gl. (15) und (20) ergibt sich mit $g=2$:

$$q_{ik} = (16 \pi m/h^3) E_2 \sigma_{ik} \equiv (16 \pi m/h^3) \sigma_{ik} \cdot (E_1 - \chi_{ik}) \quad (21)$$

und entsprechend folgt aus Gl. (16) und (19):

$$\bar{q}_{ki} = (16 \pi m/h^3) E_1 \bar{\sigma}_{ki}. \quad (22)$$

Das Verhältnis $\sigma_{ik}/\bar{\sigma}_{ki}$ ergibt sich aus Gl. (12), (21) und (23)

$$\sigma_{ik}/\bar{\sigma}_{ki} = g_k/g_i. \quad (23)$$

Um die Zahl der Übergänge von Niveaus i nach k und umgekehrt zu erhalten, muß über E integriert werden. Damit läßt sich Gl. (18) auf folgende Art schreiben:

$$\begin{aligned} N_i N_e \int_{E_1=\chi_{ik}}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{m}} q_{ik} f(E_1) \sqrt{E_1} dE_1 - N_i N_e^2 \int_{E_1=\chi_{ik}}^{\infty} \frac{2}{m} \sigma_{ik} f(E_1) f(E_1 - \chi_{ik}) \sqrt{E_1} \sqrt{E_1 - \chi_{ik}} dE_1 \\ = N_i N_e \int_{E_2=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{m}} \bar{q}_{ki} f(E_2) \sqrt{E_2} dE_2 - N_k N_e^2 \int_{E_2=0}^{\infty} \frac{2}{m} \bar{\sigma}_{ki} f(E_2 + \chi_{ik}) f(E_2) \sqrt{E_2 + \chi_{ik}} \sqrt{E_2} dE_2; \end{aligned} \quad (24)$$

abgekürzt:

$$N_i N_e S_{ik} - N_i N_e^2 I_{ik} = N_k N_e \bar{S}_{ki} - N_k N_e^2 \bar{I}_{ki}, \quad (24 a)$$

wobei S_{ik} , \bar{S}_{ki} , I_{ik} , \bar{I}_{ki} die Integrale der Stoßanregung, des Stoßes zweiter Art, des induzierten Anregungsstoßes und des induzierten Stoßes zweiter Art bedeuten.

Ein Vergleich von Gl. (24 a) mit Gl. (8 a) zeigt den Unterschied zwischen den induzierten Stoßprozessen und den induzierten Strahlungsprozessen. Bei der Strahlung existiert für jeden Übergang nur ein einziger induzierter Prozeß, die induzierte Emission; bei den Stoßprozessen ergeben sich für Hin- und Rückreaktionen je ein induzierter Stoß. Noch entscheidender ist der Unterschied des Vorzeichens bei Strahlung und Stoßprozessen. Das positive Vorzeichen bei Strahlungsemission bedeutet, daß durch den induzierten Prozeß die Zahl der Übergänge vom oberen Niveau k zum unteren Niveau i vergrößert wird, die Emission also verstärkt wird.

Durch Schaffung von günstigen Bedingungen zur Erhöhung der induzierten Emission wird es ermöglicht, Laser und Maser zu bauen.

Das negative Vorzeichen bei den induzierten Stoßprozessen bedeutet dagegen, daß die Zahl der Übergänge vom unteren Niveau zum oberen und umgekehrt kleiner wird als ohne induzierte Stöße, daß also keine Verstärkung möglich ist. Dafür ist aber eine Schwächung der Umsatzrate gegeben. Das bedeutet, daß die induzierten Stoßprozesse eine stabilisierende Wirkung auf die Atomzustände ausüben können. Gelingt es, den induzierten Stoßprozeß für eine bestimmte Reaktionsrichtung zu vergrößern und den induzierten Prozeß für Rückreaktion klein zu halten, dann kann das zu einer Anreicherung der Atome in dem entsprechenden Zustand führen.

Um hierüber etwas aussagen zu können, muß die Größe der beiden induzierten Stoßarten $N_i N_e^2 I_{ik}$ und $N_k N_e^2 \bar{I}_{ki}$ miteinander verglichen werden. Wird der Ausdruck für I_{ik} in Gln. (24 a) bzw. (24) unter Beachtung von Gl. (11) auf E_1 umgeschrieben,

dann sieht man, daß sich I_{ik} und \bar{I}_{ki} nur in den Wirkungsquerschnitten σ_{ik} und $\bar{\sigma}_{ki}$ unterscheiden. Nach Gl. (23) sind diese über die statistischen Gewichte miteinander verknüpft. Das bedeutet, daß auch I_{ik} und \bar{I}_{ki} im allgemeinen in der gleichen Größenordnung sind und sich nur um das Verhältnis der statistischen Gewichte der entsprechenden Atomzustände unterscheiden. Wie man daraus sieht, ist bei Besetzungsinversion (unter der Voraussetzung $g_k = g_i$) der induzierte Stoß zweiter Art größer als der induzierte Anregungsprozeß. Somit kann bei nichtstationären Vorgängen der Abbau der Besetzungsinversion verlangsamt werden, wenn es gelingt, für die induzierten Stoßprozesse günstige Bedingungen zu schaffen.

In den meisten Fällen ist $N_i > N_k$ und damit der induzierte Anregungsstoß der größere von beiden induzierten Prozessen. Im Gleichgewicht ist die induzierte Anregung um den Faktor $e^{z_{ik}/kT}$ größer als der induzierte Stoß zweiter Art, siehe Gleichung (2).

Wie groß die induzierten Stoßprozesse im Vergleich zu den bisher bekannten Stoßprozessen sind, hängt von vier Größen ab: der Elektronendichte N_e , der Verteilungsfunktion $f(E)$, dem Energieunterschied der Niveaus und dem Wirkungsquerschnitt $q_{ik}(E)$. Hohe Elektronendichte und kleiner Energieabstand zwischen den Niveaus vergrößern die induzierten Stöße. Um die günstigsten Verhältnisse herauszufinden, sind umfangreiche Rechnungen notwendig*.

4. Stoßprozesse bei Übergängen zwischen freien und gebundenen Zuständen

Ähnlich wie bei Stoßübergängen zwischen zwei diskreten Niveaus müssen wir auch für Übergänge zwischen gebundenen und freien Elektronen (Ionisation und Rekombination) induzierte Stöße einführen. Man kann diese Ausdrücke wiederum dadurch erhalten, daß man im thermodynamischen Gleichgewicht die Stoßionisation gleich der Dreierstoßrekombination setzt und für die Gleichgewichtsverteilungsfunktion die Fermi-Verteilung einführt. Daraus ergibt sich für die Ionisation folgender Ausdruck:

$$\begin{aligned}
 & + N_e N_i \int \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E_1} f(E_1) q_{i\infty} dE_1 dE_2 \\
 & - N_e^2 N_i (2/m) \sqrt{E_1 E_2} f(E_1) f(E_2) \sigma_1 dE_1 dE_2 \\
 & - N_e^2 N_i (2/m) \sqrt{E_1 (E_1 - E_2 - \chi_{i\infty})} \cdot f(E_1) f(E_1 - E_2 - \chi_{i\infty}) \sigma_2 dE_1 dE_2 \\
 & + N_e^3 N_i (2/m)^{3/2} \sqrt{E_1 E_2 (E_1 - E_2 - \chi_{ik})} \cdot f(E_1) f(E_2) f(E_1 - E_2 - \chi_{ik}) \sigma_3 dE_1 dE_2
 \end{aligned} \quad (25)$$

und für die Rekombination:

$$\begin{aligned}
 & + N_e^2 N^+ (2/m) \sqrt{E_2 E_3} f(E_2) f(E_3) \bar{q}_{\infty i} dE_2 dE_3 \\
 & - N_e^3 N^+ (2/m)^{3/2} \sqrt{(E_2 + E_3 + \chi_{i\infty}) E_2 E_3} \cdot f(E_2 + E_3 + \chi_{i\infty}) f(E_2) f(E_3) \bar{\sigma}_4 dE_2 dE_3.
 \end{aligned} \quad (26)$$

N^+ bezeichnet die Ionendichte und g^+ das statistische Gewicht der Ionen. Die bekannten Wirkungsquerschnitte für Stoßionisation $q_{i\infty}$ und für die Dreierstoßrekombination $\bar{q}_{\infty i}$ sind durch die entsprechende Klein-Rosseland-Beziehung verknüpft:

$$\begin{aligned}
 g_i E_1 q_{i\infty} dE_1 dE_2 \\
 = g^+ (16 \pi m_e / h^3) \cdot E_2 E_3 \bar{q}_{\infty i} dE_2 dE_3.
 \end{aligned} \quad (27)$$

Die neu einzuführenden Wirkungsquerschnitte σ_1 , σ_2 , σ_3 und $\bar{\sigma}_4$ lassen sich aus $q_{i\infty}$ bzw. $\bar{q}_{\infty i}$ berechnen:

$$\begin{aligned}
 E_2 \sigma_1 dE_1 dE_2 &= (h^3 / 16 \pi m_e) q_{i\infty} dE_1 dE_2, \\
 E_3 \sigma_2 dE_1 dE_3 &= \frac{h^3}{16 \pi m_e} q_{i\infty} dE_1 dE_2 \\
 E_2 E_3 \sigma_3 dE_1 dE_2 &= \left(\frac{h^3}{16 \pi m_e} \right)^2 q_{i\infty} dE_1 dE_2, \\
 E_1 \bar{\sigma}_4 dE_2 dE_3 &= \frac{h^3}{16 \pi m_e} \bar{q}_{\infty i} dE_2 dE_3.
 \end{aligned} \quad (28)$$

5. Schlußbemerkung

Daß induzierte Stöße tatsächlich auftreten, ist auch aus den quantenmechanischen Stoßansätzen für das Fermi-Dirac-Gas zu verstehen, da auf Grund der zweiten Quantelung die Übergangswahrscheinlichkeiten nicht nur von den Teilchenzahlen in den Ausgangszuständen, sondern auch von den Dichten der Endzustände abhängen³.

Der Unterschied zwischen Elektronenstoßprozessen (Fermi-Teilchen) und den Strahlungsprozessen (Bose-Teilchen) besteht im Vorzeichen der induzierten Übergänge. Das bedeutet, daß die induzierte Strahlung die Übergangszahlen erhöht, während die induzierten Stöße die Stoßübergangszahlen erniedrigen. Die Größe dieser induzierten Stöße hängt von der Elektronendichte, der Verteilungsfunktion und

* Die in Punkt 1–3 ausgeführten Gedankengänge sind von den Autoren in Kurzform schon auf der Tagung der DPG in München (1970) vorgetragen worden, s. G. FRÖHLICH u. K. H. SEWING, Verhandlungen der DPG 2/1970, PP.71.

dem Energieunterschied der Niveaus ab, ähnlich wie die Größe der induzierten Emission von der Strahlungsdichte, ihrer Frequenzverteilung und der Anregungsenergie des Überganges abhängt. Genauso wie für die technische Anwendung der induzierten Emission eine spezielle Strahlungsverteilung (es

wird nicht die Planck-Verteilung sein) günstig ist, so wird auch bei den induzierten Stoßprozessen eine spezielle Elektronenverteilung (es wird nicht die Fermi-Verteilung sein) vorteilhaft sein.

Herrn Dr. M. SCHINDLER danken wir für wertvolle Hinweise.

¹ A. EINSTEIN, Berichte der Deutschen Physikalischen Gesellschaft Nr. 13/14, S. 318 [1916].

² A. EINSTEIN, Physik. Z. 18, 121 [1917].

³ D. J. BLOCHINZEW, Grundlagen der Quantenmechanik, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1961, S. 462 ff.

The Dipole Moment Function of H⁷⁹Br Molecule

D. N. URQUHART, T. D. CLARK, and B. S. RAO

Department of Physics, University of North Dakota

(Z. Naturforsch. 27 a, 1563—1565 [1972]; received 2 August 1972)

The radial Schrödinger wave equation with Morse potential function is solved for H⁷⁹Br molecule. The resulting vibration-rotation eigenfunctions are then used to compute the matrix elements of $(r-r_e)^n$. These are combined with the experimental values of the electric dipole matrix elements to calculate the dipole moment coefficients, M_1 and M_2 .

Introduction

In the case of the vibration-rotation transitions occurring in a given electronic state of a heteronuclear diatomic molecule, the electric dipole matrix element $M_{v',J',v'',J''}^{e'}$ is given by

$$M_{v',J',v'',J''}^{e'} = \int \Psi_{v',J'}^*(r) M(r) \Psi_{v'',J''}(r) r^2 dr \quad (1)$$

where $\Psi_{v',J'}(r)$ and $\Psi_{v'',J''}(r)$ are the radial eigenfunctions of the upper and lower vibration-rotation states respectively. $M(r)$ is the molecular electric dipole moment function which is conveniently expanded about the equilibrium internuclear distance, r_e , and is written as

$$M(r) = M_0 + M_1(r-r_e) + M_2(r-r_e)^2 + \dots \quad (2)$$

where M_0 is the permanent dipole moment and M_1 , M_2 , etc. are the dipole moment coefficients. Substituting Eq. (2) in Eq. (1) we get

$$M_{v',J',v'',J''}^{e'} = M_1 \int \Psi_{v',J'}^*(r) (r-r_e) \Psi_{v'',J''}(r) r^2 dr + M_2 \int \Psi_{v',J'}^*(r) (r-r_e)^2 \Psi_{v'',J''}(r) r^2 dr + \dots \quad (3)$$

The coefficients M_1 , M_2 , etc. can be determined if the values of the dipole matrix elements for the various vibration-rotation transitions and the eigenfunctions of the states involved are known. The for-

mer can be obtained from the experimentally measured spectral line strengths whereas the latter depend on the type of the potential function $V(r)$ used to represent the diatomic molecule.

In the present work we have chosen the Morse potential function¹ which adequately represents the true potential of the diatomic molecule. It is given by

$$V(r) = D_e [1 - \exp\{-\beta(r-r_e)\}]^2 \quad (4)$$

where D_e is the dissociation energy of the molecule expressed in cm⁻¹ units and β is a constant to be determined.

The radial Schrödinger wave equation for a diatomic molecule can be written as

$$\frac{d^2 \Psi_{v,J}(r)}{dr^2} + \left\{ \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} [E_{v,J} - V(r)] - \frac{J(J+1)}{r^2} \right\} \Psi_{v,J}(r) = 0 \quad (5)$$

where μ is the reduced mass of the molecule and $E_{v,J}$ is the energy of the vibration-rotation state characterized by the vibrational quantum number v and the rotational quantum number J . When the Morse potential [Eq. (4)] is substituted for $V(r)$, the above equation can be solved rigorously for the case $J=0$ to yield the pure vibrational eigenfunctions, Ψ_v . Using these eigenfunctions HEAPS and HERZBERG² evaluated the two integrals in Eq. (3)

Reprint requests to Dr. B. SESH RAO, Department of Physics, University of North Dakota, Grand Forks, N.D. 58201, USA.