

# Stueckelberg-Landau-Zener-(SLZ)-Modell für atomare Stoßprozesse

G.-P. Raabe \*

Institut für Angewandte Physik der Universität Bonn und  
Max-Planck-Institut für Strömungsforschung Göttingen

(Z. Naturforsch. **28 a**, 1642—1653 [9173]; eingegangen am 25. Mai 1973)

*Stueckelberg-Landau-Zener-(SLZ) Model for Atomic Scattering Processes*

Scattering processes of atoms, molecules and ions with two crossing electronic potentials may be treated in the Stueckelberg-Landau-Zener-(SLZ) model. In this paper the WKB-solutions for the radial wave functions, given by Stueckelberg are used to calculate differential cross sections. The effects on the cross sections are explained in a semiclassical picture, following the procedures of Ford and Wheeler, and Berry. In the scattering of  $H^+$  by rare gases, some effects in the elastic cross sections are observed which can be explained by the influence of the potential of the charge-exchanged particles, using the SLZ-model. The structure in the elastic cross sections for  $H_2^+-Kr$  can be explained as a rainbow structure with superimposed Stueckelberg oscillations.

## 1. Einleitung

Aus Untersuchungen von Stoßprozessen zwischen Atomen, Molekülen und Ionen können detaillierte Aussagen über die zwischen den Teilchen wirkenden Kräfte gewonnen werden. Die rein elastische Streuung ist in den letzten Jahren experimentell und theoretisch ausführlich untersucht worden. So konnten etwa für die Streuung von Alkaliatomen an Edelgasatomen im thermischen Energiebereich alle theoretisch vorhergesagten Effekte im Experiment nachgewiesen werden und mit teilweise sehr großer Genauigkeit ausgemessen werden, so daß daraus speziell für derartige Stoßsysteme die Wechselwirkungspotentiale recht genau bestimmt werden konnten<sup>1-3</sup>.

Bei Stoßprozessen zwischen Atomen, Molekülen und Ionen können im allgemeinen, je nach Wahl der Partner und der Stoßenergie, neben der elastischen Streuung noch eine ganze Reihe inelastischer Prozesse, wie etwa die Rotations- und Schwingungsanregung, Änderungen der elektronischen Zustände, chemische Reaktionen, Dissoziation und Ionisation auftreten. Die prinzipielle Möglichkeit solcher inelastischer Prozesse kann sich auch auf die elastische Streuung auswirken, selbst dann, wenn die inelastischen Prozesse aus energetischen Gründen nicht stattfinden können (geschlossene inelastische Kanäle). Von der Theorie her stellen derartige Stoß-

prozesse ein quantenmechanisches Vielkörperproblem dar, über dessen allgemeine oder auch nur näherungsweise Lösung außer beim Drei- und Vierkörperproblem noch wenig Untersuchungen vorliegen. Man versucht deshalb statt der vollständigen Lösung Möglichkeiten zu finden, die es gestatten, Teilprobleme angenähert zu lösen.

Einen solchen Lösungsweg für ein Teilproblem stellt das Stueckelberg-Landau-Zener-(SLZ-) Modell dar, mit dem Probleme beschrieben werden können, bei denen nur zwei Zustände eine Rolle spielen, deren Potentiale sich in einem Punkt kreuzen oder zumindest dort sehr nahe kommen. Die Verfahren von Landau<sup>4</sup> und Zener<sup>5</sup> liefern eine Formel zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten, aus denen durch Analogieschlüsse Formeln für den totalen Streuquerschnitt in klassischer Näherung erhalten werden können. Stueckelberg<sup>6</sup> führte für dieses Zweizustandsproblem eine Behandlung in der WKB-Näherung durch und erhält so angenäherte radiale Wellenfunktionen. Er hat damit nur totale Streuquerschnitte berechnet und so einen Vergleich mit den Ergebnissen von Landau und Zener erhalten. Das asymptotische Verhalten der radialen Wellenfunktionen bestimmt aber die *S*-Matrix für dieses Problem vollständig. Ist die *S*-Matrix bekannt, so lassen sich totale und differentielle Streuquerschnitte unmittelbar berechnen.

## 2. Theoretische Grundlagen

Das Streuproblem wird vollständig durch einen Hamilton-Operator  $H$  und eine Gesamtwellenfunk-

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. H. Pauly, Abt. Atom- und Molekülphysik, MPI für Strömungsforschung, D-3400 Göttingen, Böttingerstr. 6—8.

\* jetzt: Rechenzentrum der Universität Regensburg.



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.

tion  $\psi$  beschrieben, die beide von den Kern- und Elektronenkoordinaten abhängen. Der erste Schritt zu einer praktisch brauchbaren Näherung besteht darin, daß man entsprechend der Born-Oppenheimer-Näherung eine Separation von Kern- und Elektronenbewegung durchführt, was wegen des großen Unterschieds der Kern- und Elektronenmassen erlaubt ist. Die Gesamtwellenfunktion wird dabei als Summe über Produkte von Funktionen dargestellt, von denen ein Faktor nur von den Kernkoordinaten abhängt und somit die Bewegung der Kerne beschreibt und deren anderer Faktor nur von den Elektronenkoordinaten abhängt, also den elektronischen Zustand angibt.

Im Schwerpunktsystem werden mit  $\mathbf{r}$  der Vektor des Kernabstandes und mit  $\mathbf{R}$  die Koordinaten aller Elektronen bezeichnet. Der Hamilton-Operator ist

$$H = H_0 + H' = H_0 + T_e + V(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (2.1)$$

mit

$$H_0 = (1/2m)\mathbf{p}_0^2.$$

$T_e$  ist der Operator der kinetischen Energie der Elektronen,  $H_0$  der der Kerne,  $\mathbf{p}_0$  ist der Impuls der relativen Kernbewegung und  $V(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  ist das vollständige Wechselwirkungspotential aller beteiligten Teilchen. Die Gesamtwellenfunktion  $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  kann nach der Born-Oppenheimer-Näherung in

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_{k=1}^N u_k(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (2.2)$$

separiert werden, wobei die  $u_k(\mathbf{r})$  die Kernbewegung angeben.  $\psi_k(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  ist die Elektronenfunktion des  $k$ -ten Zustandes, die parametrisch vom Kernabstand  $\mathbf{r}$  abhängt;  $N$  ist die Anzahl der Elektronenzustände.

Diese Separation ist so noch nicht eindeutig festgelegt. Es bleibt eine gewisse Freiheit in der Wahl der Elektronenfunktionen, was im wesentlichen zu zwei Darstellungen der Methode führt, nämlich der adiabatischen und der diabatischen Darstellung. Wie die Elektronenfunktionen zu wählen sind und den Zusammenhang zwischen den beiden Darstellungen hat Smith<sup>7</sup> angegeben.

Zur Behandlung von Streuproblemen ist die diabatische Darstellung vorzuziehen. In ihr ist die Matrix der Relativimpulse der Teilchen diagonal und die Kopplung der Elektronen mit der Bahnbewegung wird durch die nicht-diagonale Potentialmatrix beschrieben. Es ist somit das System von  $N$ -gekoppel-

ten Differentialgleichungen

$$[1 \, d^2/dr^2 + 1 \, E - U(r)] u(r) = 0 \quad (2.3)$$

zu lösen, wobei  $U(r)$  die nichtdiagonale Potentialmatrix bezeichnet,  $E$  die Gesamtenergie und  $u(r)$  den Vektor der Kernfunktion  $u_k(r)$ .

In dem speziellen Fall des SLZ-Modells werden nur zwei Zustände als wesentlich vorausgesetzt, d. h. es sind zwei gekoppelte Differentialgleichungen der Form (2.3) zu lösen. Stueckelberg hat dafür die radialen Wellenfunktionen in WKB-Näherung angegeben, aus denen sich die Elemente der S-Matrix bestimmen lassen<sup>8</sup>.

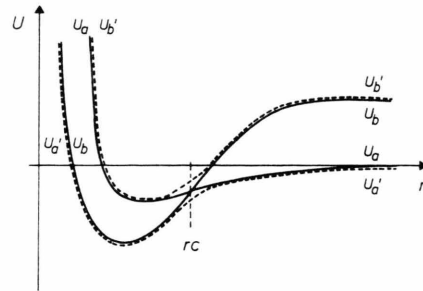


Abb. 1. Diabatische und adiabatische Potentiale.

In der Abb. 1 sind die diabatischen Potentiale  $U_a$  und  $U_b$  dargestellt. Die gestrichelten Kurven sind die adiabatischen Potentiale  $U_a$  und  $U_b$ . Die beiden Kanäle werden mit a und b bezeichnet.

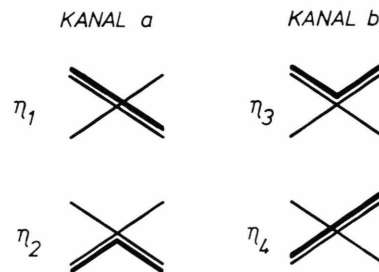


Abb. 2. Diagramme der Potentialbereiche, die den vier Phasen zugehören, die zur Berechnung der Streumatrixelemente benötigt werden.

Abbildung 2 zeigt schematisch die vier möglichen Integrationswege für die auslaufenden Partialwellen der Kanäle a und b, die zu den Streuphasen  $\eta_i$  ( $i = 1, \dots, 4$ ) führen.

Die Wahrscheinlichkeit für ein Überwechseln auf den adiabatischen Potentialkurven oder gleichbedeutend damit die Wahrscheinlichkeit für ein Verbleiben auf der diabatischen Kurve ist  $e^{-\delta}$ . Für  $\delta$  erhält

Stueckelberg denselben Ausdruck wie auch Landau und Zener, nämlich

$$\delta = \frac{\pi}{2} \cdot \left[ \frac{U_{ab}^2(r_c)}{\frac{d}{dr} U_a - \frac{d}{dr} U_b} v(r) \right]_{r=r_c}, \quad (2.4)$$

wobei  $U_{ab}(r_c)$  das nichtdiagonale Element in der Potentialmatrix an der Stelle  $r_c$  ist.  $v(r_c)$  ist die Relativgeschwindigkeit der Teilchen am Kreuzpunkt  $r_c$ . Mit den Bezeichnungen  $V = e^{-\delta}$  und  $W = 1 - V$  ergeben sich die interessierenden Elemente der S-Matrix zu:

$$S_a = V e^{2i\eta_1} + W e^{2i\eta_2},$$

$$S_b = \sqrt{VW} (e^{i(\eta_1 + \eta_2)} - e^{-i(\eta_2 + \eta_1)}) \quad (2.5)$$

mit

$$\eta_i(l) = (l + \frac{1}{2}) \frac{\pi}{2} - k_i r_{ui}$$

$$+ k_i \int_{r_{ui}}^{\infty} \left( \sqrt{1 - \frac{U_i(r) - U_i(\infty)}{E - U_i(\infty)}} - \frac{(l + \frac{1}{2})^2}{(k_i r)^2} - 1 \right) dr. \quad (2.6)$$

$U_i$  sind die Potentiale, die in den Diagrammen der Abb. 2 für die  $\eta_i$  angegeben sind. Die  $r_{ui}$  sind die zugehörigen klassischen Umkehrpunkte und die  $k_i$  die entsprechenden Wellenzahlen. Bei dieser Form für die Streuphasen ist vorausgesetzt, daß das nichtdiagonale Element der Potentialmatrix an der Stelle  $r_c$  klein ist verglichen mit den Potentialen  $U_a$  und  $U_b$  und daß die Störung auf einen kleinen Bereich um  $r_c$  beschränkt ist.

Die Streuamplituden für die beiden Kanäle sind:

$$f_a(\Theta) = (1/2 i k_a) \sum_l (2l+1) (S_a(l) - 1) P_l(\cos \vartheta),$$

$$f_b(\Theta) = (1/2 i k_b) \sum_l (2l+1) S_b(l) P_l(\cos \vartheta). \quad (2.7)$$

Dabei wird der Streuwinkel mit  $\Theta$  bezeichnet. Die differentiellen Streuquerschnitte werden nach

$$\sigma_a(\Theta) = |f_a(\Theta)|^2, \quad \sigma_b(\Theta) = |f_b(\Theta)|^2 \quad (2.8)$$

berechnet.

### 3. Halbklassische Näherung

Für die einfache Streuung (Einkanalstreuung) an einem zentralsymmetrischen Potential haben Ford und Wheeler<sup>9</sup> eine halbklassische Näherung angegeben, die den Zusammenhang zwischen klassischer und quantenmechanischer Behandlung der Streuung

darstellt. In dieser Näherung können die Strukturen im differentiellen Streuquerschnitt und deren Ursachen in einem übersichtlichen Bild erklärt werden<sup>10, 11</sup>. Die Methoden der Ford-Wheeler-Näherung sind auch geeignet, die differentiellen Streuquerschnitte für die hier behandelten Probleme zu berechnen<sup>12, 13</sup>.

Mit den Annahmen der halbklassischen Näherung erhält man für die Streuamplituden

$$f_a(\Theta) = [-1/k_a \sqrt{2\pi \sin \Theta}] \int dl \sqrt{l+1} [V_l(e^{i\varphi_1^+(l)} - e^{-i\varphi_1^-(l)}) + W_l(e^{i\varphi_2^+(l)} - e^{i\varphi_2^-(l)})] \quad (3.1)$$

mit

$$\varphi_n^{\pm} = 2\eta_n \pm (l + \frac{1}{2})\Theta + \frac{\pi}{4}; \quad n = 1, 2 \quad (3.2)$$

und entsprechend

$$f_b(\Theta) = -\frac{1}{k_b \sqrt{2\pi \sin \Theta}} \int dl \sqrt{l+1} V_l \bar{W}_l \cdot$$

$$\left( (e^{i\varphi_3^+(l)} - e^{i\varphi_3^-(l)} + e^{i\varphi_4^+(l)} + e^{i\varphi_4^-(l)}) \right) \quad (3.3)$$

mit

$$\varphi_{\frac{3}{4}}^{\pm} = \eta_{\frac{1}{2}}(l) + \eta_{\frac{3}{4}}(l) \pm ((l + \frac{1}{2})\Theta + \pi/4). \quad (3.4)$$

Die Auswertung dieser Integrale kann mit der Methode der stationären Phase erfolgen. Im Fall der Einkanalstreuung führt dies zu den bekannten Interferenzeffekten (Regenbogenstruktur und überlagerte schnelle Oszillationen). Die Besonderheit des vorliegenden Falles besteht darin, daß in einem Ausgangskanal zwei Phasenfunktionen auftreten, nämlich  $\varphi_1$  und  $\varphi_2$  in  $f_a(\Theta)$  und  $\varphi_3$  und  $\varphi_4$  in  $f_b(\Theta)$ . Diese sind gemäß Gln. (3.2) und (3.4) mit den Streuphasen  $\eta_i$  ( $i = 1, \dots, 4$ ) verknüpft.

Abbildung 3 zeigt als Beispiel schematisch die Phasen  $\eta_1$  und  $\eta_2$ , wie sie die SLZ-Theorie für dia-

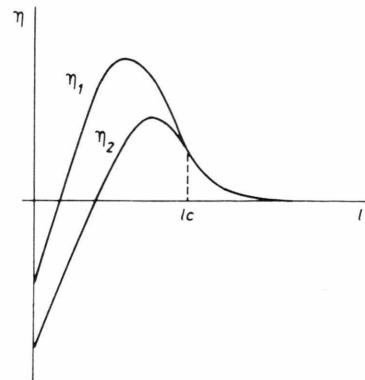


Abb. 3. Die Phasenfunktionen  $\eta_1(l)$  und  $\eta_2(l)$ .

batische Potentiale liefert, die beide ein Minimum haben (wie in Abbildung 1). Bei einem  $l = l_c$  laufen die beiden Phasenfunktionen ineinander. Dies ist für alle  $l \geq l_c$  der Fall, weil durch den Zentrifugalterm  $b^2/r^2$  das effektive Potential an der Stelle  $r_c$  größer als die Einschußenergie  $E$  geworden ist, also der klassische Umkehrpunkt  $r_u > r_c$  wird. Es kann dann der Kreuzungspunkt nicht mehr erreicht werden und die Phasen  $\eta_1$  und  $\eta_2$  fallen von  $l_c$  ab zusammen

Die Funktionen  $\varphi_1^\pm$  und  $\varphi_2^\pm$  können somit insgesamt bis sechs Stellen  $l_i$  mit stationärem Verhalten haben, wie dies in der Abb. 4 qualitativ dargestellt ist.

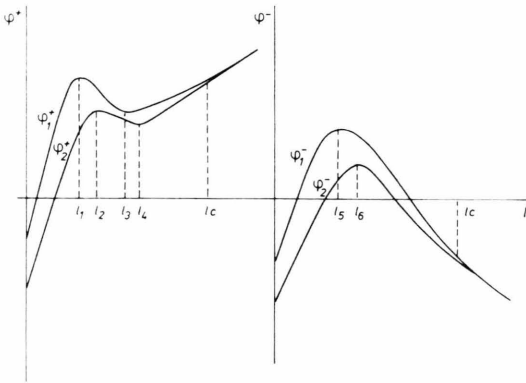


Abb. 4. Die Funktionen  $\varphi_1^\pm(l)$  und  $\varphi_2^\pm(l)$ .

Dabei können die beiden Minima in  $\varphi_1^+$  und  $\varphi_2^+$  bei  $l_3$  und  $l_4$  zusammenfallen, wenn  $l_c$  entsprechend kleiner ist. Anhand der Abb. 4 kann man im Prinzip schon erkennen, welche Strukturen im differentiellen Streuquerschnitt zu erwarten sind: Zunächst je zwei Regenbogensysteme und schnelle Oszillationen, die durch die stationären Phasen bei  $l_1, l_3, l_5$  einerseits und die bei  $l_2, l_4, l_6$  andererseits bestimmt werden. Jede dieser Interferenzstrukturen erwartet man in der gleichen Art wie bei der Streuung an einem einzigen Potential. Darüber hinaus wird man noch Interferenzen beobachten, die aus Beiträgen herrühren, die einen ersten Anteil von  $\eta_1$  her haben und einen zweiten von  $\eta_2$ . Diese Interferenzen bezeichnet man als Stueckelberg-Oszillationen. Wenn die Gebiete mit stationärer Phase in der  $l$ -Skala genügend voneinander getrennt sind, kann das Integral (3.1) als Summe über die einzelnen Beiträge geschrieben werden:

$$f_a(\Theta) = \sum_n X_n(l_n) \sqrt{\sigma_n^{kl}(l_n)} e^{i\beta_n} \quad (3.5)$$

wobei  $X_n(l_n)$  entweder  $V_{l_n}$  oder  $W_{l_n}$  bezeichnet,

$$\sigma_n^{kl}(l_n) = \frac{l_n}{2 \sin \Theta \left| \frac{d\Theta}{db} \right|_{b=b_n}} \quad (3.6)$$

der klassische Streuquerschnitt ist und die  $\beta_n$  die stationären Phasen sind. Im halbklassischen Querschnitt  $\sigma^{hk}(\Theta)$  treten die Interferenzterme

$$\cos(\beta_n - \beta_m)$$

auf, die Strukturen im Winkelabstand (näherungsweise)

$$\Delta\Theta = 2\pi/(l_n - l_m) \quad (3.7)$$

hervorrufen.

In der Umgebung des Regenbogenwinkels gilt die Annahme voneinander getrennter Gebiete mit stationärer Phase nicht mehr und eine spezielle Behandlung ist erforderlich. Deshalb ist es zweckmäßiger, eine von Berry<sup>14</sup> angegebene Methode zu benutzen, die den differentiellen Streuquerschnitt im gesamten Winkelbereich liefert (s. auch<sup>2</sup>). Mittels einer Modifikation der Poissonschen Summenformel und der Näherungsformel für die Legendre Polynome wird die Streuamplitude dargestellt durch

$$f_a(\Theta) = -\frac{i}{k_a \sqrt{2\pi \sin \Theta}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-im\pi} \{e^{-i\pi/4} (I_{(1)m}^+ + I_{(2)m}^+) + e^{i\pi/4} (I_{(1)m}^- + I_{(2)m}^-)\} \quad (3.8)$$

mit  $\lambda = l + \frac{1}{2}$  und

$$I_{(1)m}^\pm = \int_0^\infty d\lambda \sqrt{\lambda} V_{\lambda-1/2} \exp \{i[2\eta_1(\lambda - \frac{1}{2}) + \lambda(\pm\Theta + 2m\pi)]\} \quad (3.9)$$

und

$$I_{(2)m}^\pm = \int_0^\infty d\lambda \sqrt{\lambda} W_{\lambda-1/2} \exp \{i[2\eta_2(\lambda - \frac{1}{2}) + \lambda(\pm\Theta + 2m\pi)]\}. \quad (3.10)$$

Die Integrale  $I^+$  bestimmen die Regenbogenstruktur, die kleinen Oszillationen ergeben sich aus der Überlagerung der Beiträge von den  $I^+$ - und  $I^-$ -Integralen. Für Regenbogenwinkel  $\Theta_r < \pi$  tragen nur die Integrale  $I_{(1)0}^\pm$  und  $I_{(2)0}^\pm$  zur Streuamplitude bei, so daß man die Regenbogenstruktur durch

$$f_a(\Theta) = -i/(k_a \sqrt{2\pi \sin \Theta}) \exp \{-i\pi/4\} (I_{(1)}^+ + I_{(2)}^+) \quad (3.11)$$

beschreiben kann (der Index 0 ist der Einfachheit halber weggelassen). Für den Winkelbereich mit  $\Theta < \Theta_r$  ergibt dies folgende Form des differentiellen



Streuquerschnittes (natürlich ohne schnelle Oszillationen):

$$\sigma_a(\Theta) = \pi \{ V_1 \sqrt{\sigma_1^{kl}} + V_3 \sqrt{\sigma_3^{kl}} \}^2 \sqrt{z_1} \text{Ai}^2(-|z_1|) + (W_2 \sqrt{\sigma_2^{kl}} + W_4 \sqrt{\sigma_4^{kl}})^2 \times \sqrt{|z_2|} \text{Ai}^2(-|z_2|) + (V_1 \sqrt{\sigma_1^{kl}} + V_3 \sqrt{\sigma_3^{kl}}) (W_2 \sqrt{\sigma_2^{kl}} + W_4 \sqrt{\sigma_4^{kl}}) (|z_1| |z_2|)^{1/4} \text{Ai}(-|z_1|) \text{Ai}(-|z_2|) \quad (3.12)$$

mit

$$\frac{4}{3} z^{\frac{3}{2}} = |\Delta \gamma_{\frac{1}{2}}|$$

und

$$\Delta \gamma_1 = 2 \eta_1(l_1) - 2 \eta_1(l_3) + \Theta(l_1 - l_3),$$

$$\Delta \gamma_2 = 2 \eta_2(l_2) - 2 \eta_2(l_4) + \Theta(l_2 - l_4).$$

Die Extrema der Regenbogenstruktur liegen an den Stellen, die durch  $\text{Ai}(-|z_{\frac{1}{2}}|) = 0$  und  $\text{Ai}'(-|z_{\frac{1}{2}}|) = 0$  bestimmt sind\*. Aus (3.12) läßt sich ablesen, wie sich der differentielle Streuquerschnitt im Regenbogengebiet verhält. Dazu wird (3.12) in einer übersichtlicheren Form neu geschrieben:

$$\sigma_a(\Theta) = S_1^2 \text{Ai}^2(-|z_1|) + S_2^2 \text{Ai}^2(-|z_2|) + S_1 S_2 \text{Ai}(-|z_1|) \text{Ai}(-|z_2|), \quad (3.13)$$

wobei der zweite Term weggelassen wurde.

Für  $V_l = 1$  ( $W_l = 0$ ) erfolgt die Streuung nur am Potential a (s. Abb. 2) und der differentielle Querschnitt ist  $S_1^2 \text{Ai}^2(-|z_1|)$ . Entsprechend gilt für den anderen Extremfall mit  $V_l = 0$  ( $W_l = 1$ ), in dem die Streuung nur an dem Potential b erfolgt und damit der Querschnitt gleich  $S_2^2 \text{Ai}^2(-|z_2|)$  ist. Für Wahrscheinlichkeiten  $V_l$  und  $W_l$ , die zwischen 0 und 1 variieren, beschreibt (3.3) die Verschiebung der Struktur von dem einen Extremfall in den anderen. Dieses Verhalten zeigt die Abbildung 5. In Teil a sind die nach der SLZ-Theorie gerechneten Querschnitte einschließlich der kleinen Oszillationen abgebildet. Abbildung 5 zeigt die gleichen Querschnitte, bei denen über die kleinen Oszillationen gemittelt wurde. Querschnitt 1 ist der Fall mit  $V_l = 1$  und  $W_l = 0$ , Querschnitt 3 der mit  $V_l = 0$  und  $W_l = 1$ .

Bei dem Querschnitt 2 ist  $V_l$  etwa 0,7, entsprechend  $W_l$  etwa 0,3 ( $V_l$  und  $W_l$  ändern sich um etwa 0,1 wegen der Abhängigkeit von  $l$ ). In der Abb. 5 läßt sich die Verschiebung der Regenbogenstruktur erkennen, die sich aus der kohärenten Streuung an zwei Potentialen ergibt. Daraus ergibt sich in geeigneten Fällen die Möglichkeit, die Potentiale durch ein Inversionsverfahren zu bestimmen, das dem von

\* Die Extrema des zweiten Terms liegen bei  $\text{Ai}'(-|z_{\frac{1}{2}}|) = 0$  und  $\text{Ai}(-|z_{\frac{1}{2}}|) = 0$ . Wegen der kleinen Faktoren können diese Beiträge vernachlässigt werden.

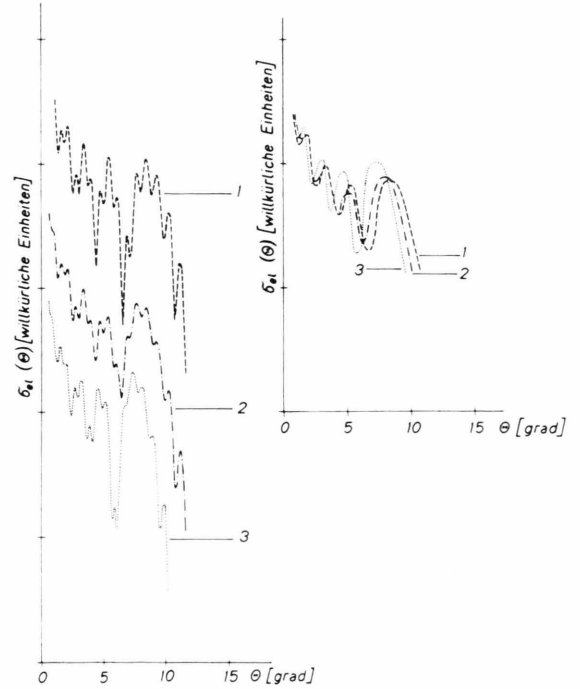


Abb. 5. Veränderung der Regenbogenstruktur durch das Potential  $U_b$ . a) Mit den SLZ-Programmen gerechnete differentielle Streuquerschnitte mit kleinen Oszillationen. b) Die gleichen Querschnitte nach der Mittelung über die kleinen Oszillationen.

Buck<sup>2</sup> entspricht. Voraussetzung dafür sind Messungen, in denen genügend Extrema der Regenbogenstruktur aufgelöst sind. Dies ist natürlich nur bei Stoßpartnern zu erwarten, deren Potentiale eine genügend große Tiefe besitzen. Ferner muß das Potential  $U_a$  des Eingangszustandes aus anderen Messungen bekannt sein. Daraus kann der Querschnitt, der  $V_l = 1$  entspricht, berechnet werden und aus der Verschiebung des gemessenen Querschnitts von diesem Referenzquerschnitt kann auf die Beiträge  $z_2$  des Potentials  $U_b$  geschlossen werden. Weitere Information über das Potential  $U_b$  liefern die Stueckelberg-Oszillationen, die auf der Schattenseite des Regenbogens auftreten.

Die stationären Phasen  $\varphi_1^+(l_1)$ ,  $\varphi_1^+(l_3)$ ,  $\varphi_2^+(l_2)$  und  $\varphi_2^+(l_4)$  bestimmen die Regenbogenstruktur, der zusätzlich die kleinen Oszillationen überlagert sind,

die sich aus Interferenztermen der obigen Phasen mit den stationären Phasen  $\varphi_1^-(l_5)$  und  $\varphi_2^-(l_6)$  ergeben. Für die Winkel  $\Theta < \Theta_r$  hat die Gleichung  $(d/dl)\Theta_{\pm}^{\pm} = 0$  stets zwei reelle Nullstellen bei  $l_1, l_3$  und  $l_2, l_4$ . Für Winkel  $\Theta > \Theta_r$  sind nur noch je zwei konjugiert komplexe Nullstellen vorhanden, nämlich  $l_1 = l_3^*$  und  $l_2 = l_4^*$ . Die Gebiete mit stationärem Verhalten von  $\varphi_1^+$  und  $\varphi_2^+$  liegen bei komplexen  $l$ -Werten symmetrisch zur reellen  $l$ -Achse und sie wandern mit wachsendem  $\Theta$  weiter von der reellen Achse weg. Dies erklärt das Verhalten der kleinen Oszillationen für  $\Theta > \Theta_r$ , die auf der Schattenseite des Regenbogens stark gedämpft abklingen. Zusätzlich tritt noch der Interferenzterm

$$V_{l_5} W_{l_6} \sqrt{\sigma_5^{kl} \sigma_6^{kl}} \cos(\varphi_2^-(l_5) - \varphi_2^-(l_6)) = S \cos \Delta\varphi \quad (3.14)$$

auf, der die Stueckelberg-Oszillationen verursacht.

$$\begin{aligned} \Delta\varphi &= 2\eta_1(l_5) - (l_5 + \tfrac{1}{2})\Theta - 2\eta_2(l_6) + (l_6 + \tfrac{1}{2})\Theta \\ &= 2(\eta_1(l_5) - \eta_2(l_6)) + \Theta(l_6 - l_5). \end{aligned} \quad (3.15)$$

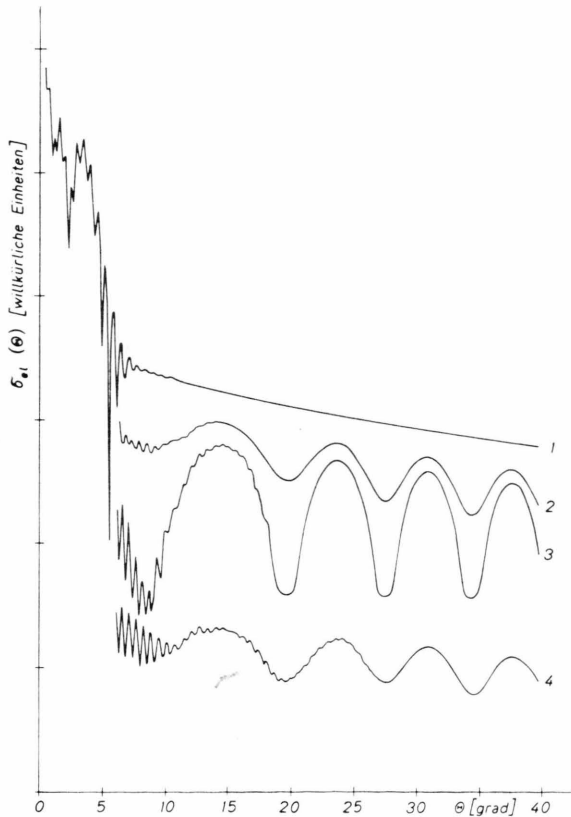


Abb. 6. Stueckelberg-Oszillationen für verschiedene Störenergien  $U_{ab}(r_c)$ : 1)  $U_{ab}=0$  meV; 2)  $U_{ab}=50$  meV; 3)  $U_{ab}=100$  meV; 4)  $U_{ab}=150$  meV.

Da die Maxima der Funktionen  $\varphi_1^-$  und  $\varphi_2^-$  in der Nähe der Maximalphasen von  $\eta_1(l)$  und  $\eta_2(l)$  liegen, sind die Stueckelberg-Oszillationen empfindlich gegenüber relativen Verschiebungen der Minima der Potentiale  $U_a$  und  $U_b$ . Ist einmal das Potential  $U_a$  bekannt, so können die Stueckelberg-Oszillationen dazu benutzt werden, Tiefe und Lage des Minimums von Potential  $U_b$  und dessen Umgebung zu bestimmen.

Die Amplitude der Stueckelberg-Oszillationen hängt von dem Faktor  $V_{l_5} W_{l_6}$  ab, der für  $V$ -Werte nahe bei 0 und nahe bei 1 klein ist und für  $V$ -Werte nahe bei 0,5 am größten wird (Maximalwert  $VW = 0,25$  für  $V=0,5=W=0,5$ ). Die Abb. 6 zeigt als Beispiel elastische differentielle Streuquerschnitte für verschiedene Übergangswahrscheinlichkeiten, gegeben durch die Störenergie  $U_{ab}(r_c)$ . In Abb. 7 ist ein Beispiel für die Veränderung der Stueckelberg-Oszillationen bei Verschiebung des Potentials  $U_b$  ge-

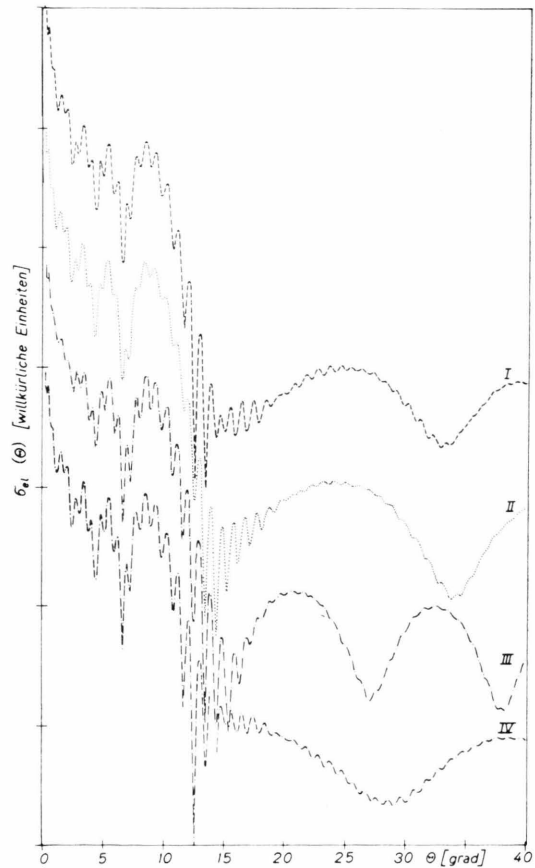


Abb. 7 a. Veränderung der Stueckelberg-Oszillationen bei der Verschiebung des Potentials  $U_b$  (Potential  $U_a$  und Störenergie  $U_{ab}$  unverändert),  $E=9770$  meV.

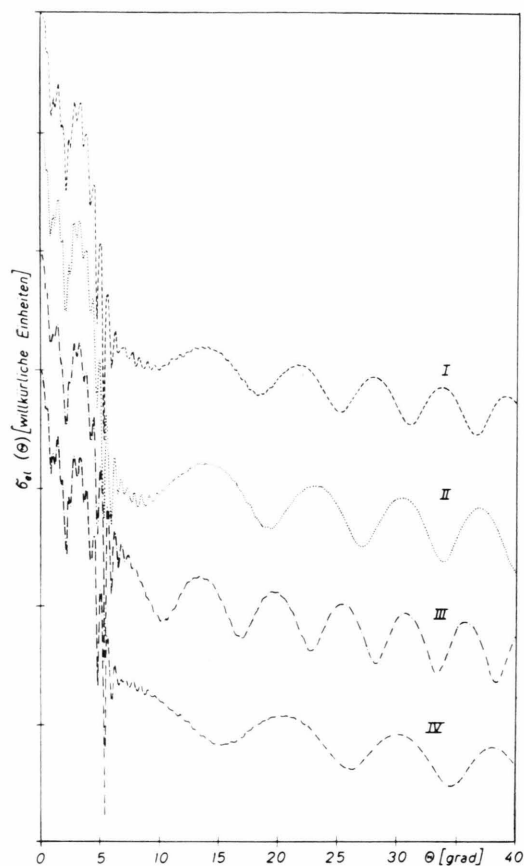


Abb. 7 b. Veränderung der Stueckelberg-Oszillationen bei der Verschiebung des Potentials  $U_b$ ;  $E=25390$  meV.

geben, wobei die Energie und die Störenergie  $U_{ab}(r_c)$  festgelassen wurde. Die Abb. 8 gibt die dazu gehörigen Potentiale wieder.

Für den inelastischen Kanal kann eine analoge Behandlung durchgeführt werden. Dabei ist allerdings zu berücksichtigen, daß die Phasenfunktionen  $\eta_3(l)$  und  $\eta_4(l)$  bei  $l=l_c$  abgeschnitten sind, da für  $l \geq l_c$  der Kreuzungspunkt nicht mehr erreicht werden kann und damit der inelastische Kanal geschlossen ist. Es wird deshalb eine Andeutung einer regenbogenähnlichen Struktur beobachtet und für größere Winkel wieder die Stueckelberg-Oszillationen. Ein Beispiel für die inelastischen differentiellen Streuquerschnitte gibt die Abbildung 9.

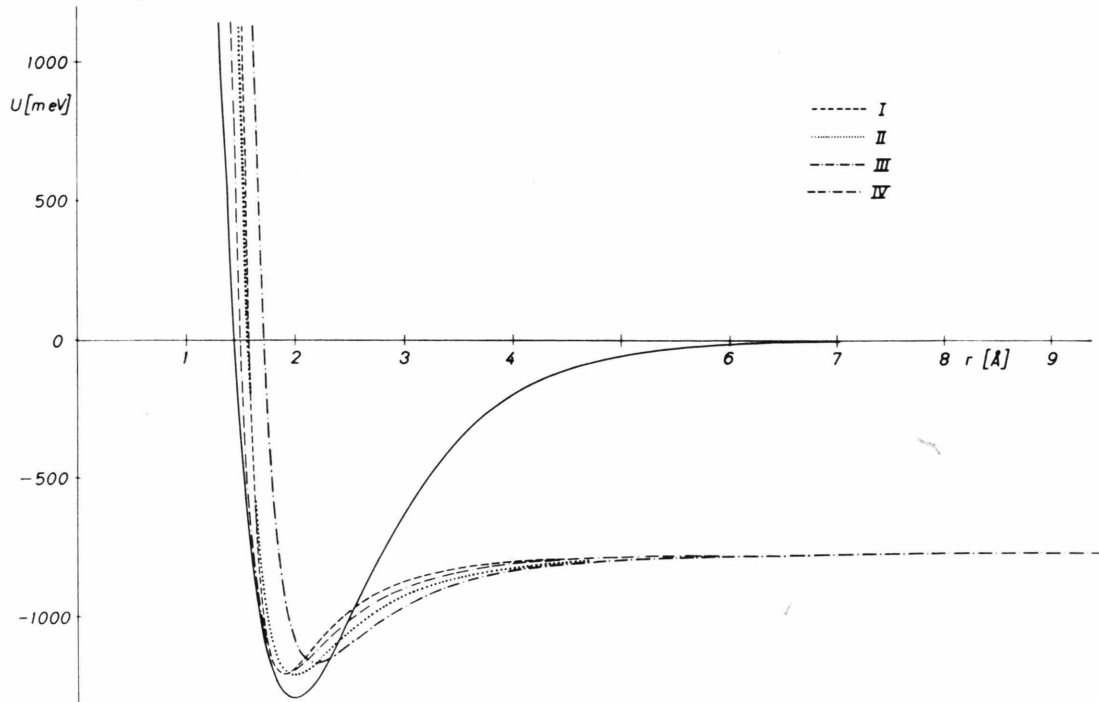
Abb. 8. Potentiale zu den Streuquerschnitten der Abb. 7 a und b.

$$U_a = \varepsilon_a [\exp(2G(1-x)) - 2 \exp(G(1-x))]; \quad x = r/r_{ma}.$$

$$U_b = \varepsilon_b \frac{4}{N-4} y^{-N} - \frac{N}{N-4} y^{-4} + U_b(\infty); \quad y = r/r_{mb}.$$

$$G = 2.5; \quad U_b(\infty) = -770 \text{ meV}, \quad r_{ma} = 2.0 \text{ \AA}; \quad \varepsilon_a = 1300 \text{ meV}.$$

	$r_{mb}$	$\varepsilon_b$	$N$
I	1,9 \AA	440 meV	8
II	2,0 \AA	440 meV	8
III	2,2 \AA	400 meV	8
IV	1,9 \AA	440 meV	12



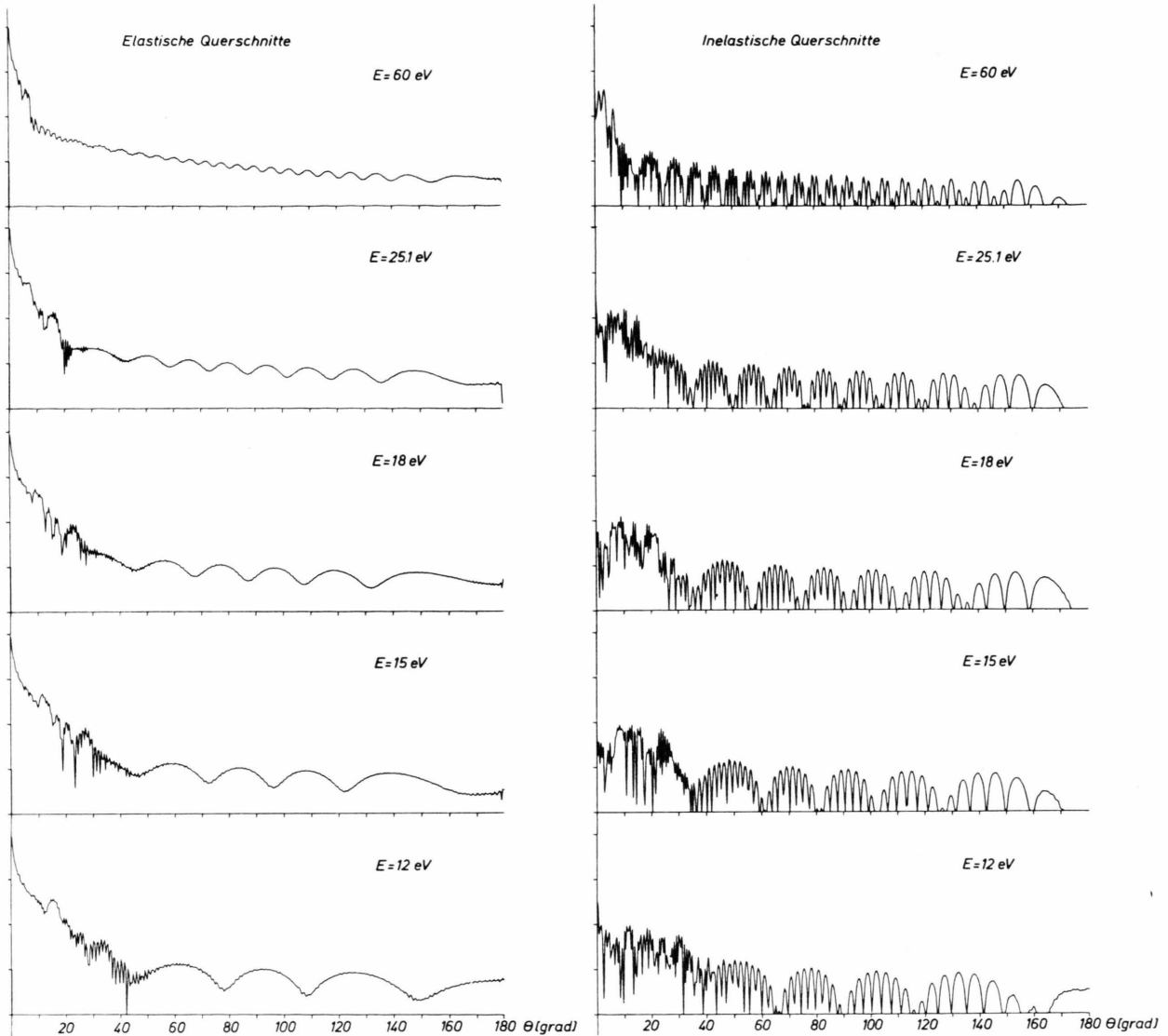


Abb. 9. Elastische und inelastische differentielle Streuquerschnitte.

Diabatische Potentiale:

Kanal a:  $U_a = \varepsilon_a [\exp(2G(1-x)) - 2 \exp(G(1-x))]$ ;  
 $x = r/r_{ma}$ ;

Kanal b:  $U_b = \varepsilon_b [y^{-8} - 2y^{-4}] + U_b(\infty)$ ;  $y = r/r_{mb}$ ;  
 $r_{ma} = 1,74 \text{ \AA}$ ;  $\varepsilon_a = 6000 \text{ meV}$ ;  
 $r_{mb} = 1,6 \text{ \AA}$ ;  $\varepsilon_b = 3000 \text{ meV}$ ;  
 $U_b(\infty) = -1460 \text{ meV}$ ;  $\mu = 1,003 \text{ g/Mol}$ .

#### 4. Interpretation von Streumessungen mit der SLZ-Theorie

Mit der SLZ-Theorie können Zweikanalprobleme beschrieben werden, soweit die angegebenen Näherungen für das betreffende Streuproblem zulässig sind. Es ist damit prinzipiell möglich, aus gemessenen Streuquerschnitten die beiden Potentiale zu konstruieren, wie dies schon für die Einkanalstreuung

durchgeführt wurde<sup>1-3</sup>. Eine der Inversion nach Buck<sup>2</sup> entsprechende Methode erfordert dazu aber sehr genau gemessene differentielle Streuquerschnitte. Sie ist dazu nur für solche Stoßsysteme gut anwendbar, die Regenbogenstrukturen mit vielen Extrema aufweisen. Eine Auswertung entsprechend der in<sup>3</sup> läßt sich zwar auch für Systeme mit weniger ausgeprägter Regenbogenstruktur durchführen, erfordert dafür aber sehr viele verschiedene, möglichst genaue

Meßdaten, wie etwa die Lagen der Extrema in den differentiellen Streuquerschnitten und die totalen Streuquerschnitte und deren Energieabhängigkeit. Derartige genaue und umfangreiche experimentelle Ergebnisse standen zur Zeit nicht zur Verfügung, so daß eine intensive Auswertung mittels der SLZ-Theorie noch nicht möglich war.

Die Autoren<sup>15-17</sup> haben elastische differentielle Streuquerschnitte für die Streuung von Ionen an Neutralteilchen gemessen und eine rein elastische Auswertung (Berücksichtigung nur des elastischen Kanals) für einen Teil der gemessenen Systeme angegeben. Für die Streuung von Wasserstoffionen an Xenon können sie die Energieabhängigkeit der Regenbögen nur durch energieabhängige Potentiale beschreiben. Dieses Verhalten der Regenbogenstruktur kann durch die SLZ-Theorie befriedigend erklärt werden.

Wegen der elektrischen Polarisierung der Neutralteilchen durch die Ionen haben die Potentiale Minima in der Größenordnung eV. Die Einschußenergien der Ionen von einigen eV entsprechen reduzierten Energien  $K = E/\varepsilon$  von etwa 2 bis 30. Die reduzierten Wellenzahlen  $A = k r_m$  haben Werte von über 50. Bei diesen Verhältnissen ist die WKB-Näherung sehr gut anwendbar und damit auch die SLZ-Theorie. Als zweiter elektronischer Zustand kommt der ladungsausgetauschte in Betracht, also der Übergang



In den Arbeiten<sup>15, 16</sup> wird über die Messungen der Regenbogenstruktur für die Streuung von Wasserstoffionen an den Edelgasen Helium, Neon, Argon, Krypton und Xenon berichtet und eine rein elastische Auswertung angegeben, die für das System  $H^+ - Xe$  die zuvor erwähnten, mit der Energie veränderlichen Potentiale liefert.

Aus den Polarisierbarkeiten und aus den Ionisierungsenergien der in Frage kommenden Teilchen können einige wesentliche Aussagen über die Potentiale gewonnen werden (Tabelle 1).

Tab. 1. Ionisierungsenergien  $I$  in eV und Polarisierbarkeiten  $\alpha$  in  $10^{-25} \text{ cm}^3$  (s. <sup>18</sup>).

	$I$	$\alpha$
Wasserstoff	13,59	6,6
Helium	24,56	2,11
Neon	21,56	3,98
Argon	15,76	16,3
Krypton	14,0	24,8
Xenon	12,13	40,1

Für den Übergang in den ladungsausgetauschten Zustand ergeben sich damit folgende Anregungsenergien  $U_b(\infty)$  [bezogen auf  $U_a(\infty) = 0$ ].

- 1)  $H^+ + He$  10,97 eV
- 2)  $H^+ + Ne$  7,97 eV
- 3)  $H^+ + Ar$  2,17 eV
- 4)  $H^+ + Kr$  0,41 eV
- 5)  $H^+ + Xe$  — 1,46 eV

Die Tiefe der Potentiale wird im wesentlichen durch die Polarisierbarkeiten der Neutralteilchen bestimmt. Näherungsweise kann man annehmen, daß sich die  $\varepsilon$ -Werte der beiden Zustände wie die Polarisierbarkeiten verhalten:

Mit den  $\varepsilon$  aus<sup>15, 16</sup> für  $\varepsilon_a$  können so die  $\varepsilon_b$  berechnet werden.

	$\alpha_a/\alpha_b$	$\varepsilon_a$	$\varepsilon_b$	$U_b(\infty) - \varepsilon_b$	$U_a(\infty) - \varepsilon_a$
1)	0,32	2,0	6,26	4,71	— 2,0
2)	0,60	2,28	3,78	4,19	— 2,28
3)	2,47	4,04	1,64	0,53	— 4,04
4)	3,76	4,45	1,18	— 0,77	— 4,45
5)	6,08	6,75	1,11	— 2,57	— 6,75

In den beiden letzten Spalten sind die Energien für die Lage der Potentialminima, bezogen auf den Eingangskanal [ $U_a(\infty) = 0$ ], angegeben. Vergleicht man diese Lagen mit den Anregungsenergien  $U_b(\infty)$ , so sieht man, daß die Potentiale für den ladungsausgetauschten Zustand der Systeme 1 bis 4 entweder stets über denen des Eingangszustandes liegen, also überhaupt keinen Kreuzungspunkt besitzen oder daß der Kreuzungspunkt im Repulsivterm bei relativ hohen Energien liegt. Im ersten Fall würde der ladungsausgetauschte Zustand überhaupt keinen Einfluß auf den Streuprozess haben. Falls der zweite Fall zutrifft, so würde nur bei den ersten Partialwellen (für kleine  $l$ ) ein Einfluß des ladungsausgetauschten Zustandes vorhanden sein. Da diese aber keine entscheidenden Auswirkungen auf die Streuquerschnitte haben, ist auch in diesem Fall kein signifikanter Einfluß auf die Regenbogenstruktur zu erwarten. Deshalb gelingt es auch, die ersten vier Systeme durch eine rein elastische Auswertung zu interpretieren.

Beim System  $H^+ - Xe$  dagegen sind die Verhältnisse anders: Mit  $-1,46 \text{ eV}$  für  $U_b(\infty)$  liegt der ladungsausgetauschte Zustand für  $r = \infty$  energetisch unter dem Eingangszustand. Das Potentialminimum des ladungsausgetauschten Zustandes bei  $-2,57 \text{ eV}$  liegt jedoch über dem des Eingangszustandes bei  $-6,75 \text{ eV}$ . Die Potentialkurven müssen sich deshalb bei einem Abstand kreuzen, der größer ist als der Minimumabstand der Potentiale. In der Abb. 10 sind Potentiale angegeben, die sich so verhalten. Das



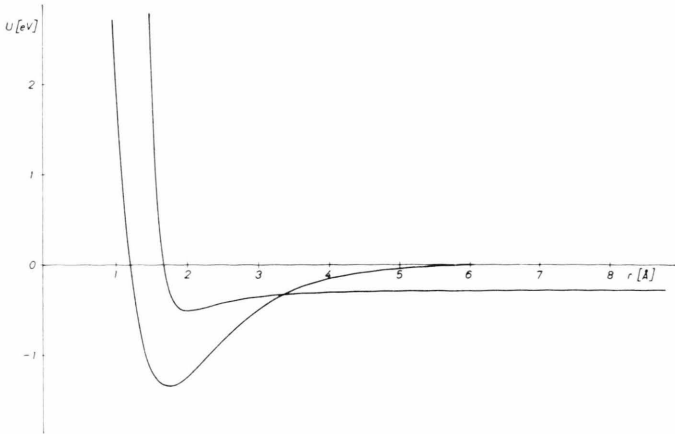


Abb. 10. Potentiale für die  $H^+$ -Xe-Rechnungen. ( $U_a$  = Morse-Potential;  $U_b$  = L.J.-(12,4);  $r_{ma} = 1,75$  Å;  $\epsilon_a = 6750$  meV;  $r_{mb} = 2,0$  Å;  $\epsilon_b = 1110$  meV;  $U_b(\infty) = 1460$  meV;  $\mu = 1,003$  g/Mol).

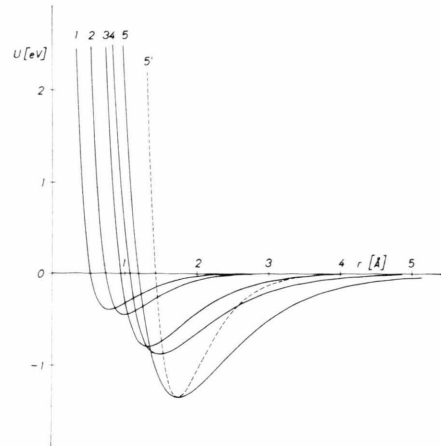


Abb. 11. Potentiale für die Streuung von  $H^+$  an Edelgasen. 1)  $H^+$ -He; 2)  $H^+$ -Ne; 3)  $H^+$ -Ar; 4)  $H^+$ -Kr; 5) und 5')  $H^+$ -Xe. Die Potentiale 1 bis 4 und 5' sind den Arbeiten <sup>16</sup>, <sup>16</sup> entnommen. Potential 5 ist das Potential  $U_a$  der Abbildung 10.

Potential für  $H^+$ -Xe wurde aus der Folge der  $H^+$ -Edelgas-Potentiale der Arbeiten <sup>15</sup>, <sup>16</sup> extrapoliert (Abbildung 11). Für  $H$ -Xe<sup>+</sup> wurde ein Lennard-Jones-(12,4)-Potential gewählt. Mit einer Störenergie  $U_{ab} = 300$  meV wurden damit die elastischen differentiellen Streuquerschnitte für die in <sup>16</sup> angegebenen Energien gerechnet.

Da in <sup>16</sup> keine Meßkurven veröffentlicht sind, kann durch diese Rechnungen nur gezeigt werden, daß der dort beobachtete Effekt für die Regenbogenstruktur durch ein SLZ-Modell wiedergegeben wird. Die Form der Potentiale für die fünf Energien mußte in <sup>16</sup> nur geringfügig verändert werden; die wesentliche Energieabhängigkeit zeigen nur die Potentialtiefen. Die mit den Potentialen der Abb. 10 gerechneten Streuquerschnitte werden rein elastisch ausgewertet. Für genügend große Energien ist

$$\Theta_r = C/K + C \epsilon/E = C^*/E$$

wobei  $\Theta_r$  der klassische Regenbogenwinkel und  $C$  eine Konstante ist, die nur von der Potentialform abhängt.  $\Theta_r$  wird dadurch bestimmt, daß dort der Querschnitt 44% des Querschnittes im Regenbogenmaximum beträgt. Mit den  $\Theta_r$ -Werten aus den gerechneten Streuquerschnitten erhält man  $C^* = \Theta_r E$ . Mit  $\epsilon = 6,75$  eV bei  $E = 12$  eV ergibt sich  $C = C^*/\epsilon = 77,33$ . Mit diesem  $C$  und den bekannten Regenbogenwinkeln und Energien können jetzt rückwärts die dazu gehörenden  $\epsilon$  berechnet werden, also jene  $\epsilon$ , die bei gleicher Potentialform für jede der Energien den richtigen Regenbogenwinkel ergeben (Tabelle 2).

Tab. 2. Energieabhängigkeit der  $\Theta_r$  bei rein elastischer Auswertung der SLZ-Regenbogen.

$E$ [eV]	$\Theta_r$ [grad]	$C^*$	[eV]
12	43,5	522,0	6,75
15	33,6	504,0	6,52
18	27,2	489,6	6,33
25,1	19,2	481,9	6,23
60	7,7	462,0	5,97

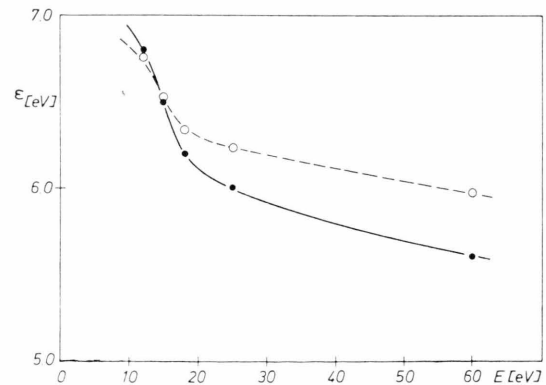


Abb. 12. Regenbogenauswertung für  $H^+$ -Xe (gestrichelte Kurve: Ergebnisse der SLZ-Rechnungen, durchgezogene Kurve: Ergebnisse aus <sup>16</sup>).

Zum Vergleich sind in der Abb. 12 die  $\epsilon$  aus der Auswertung in <sup>16</sup> und die aus dieser Rechnung aufgetragen. Man ersieht daraus, daß es mit dem SLZ-Modell möglich ist, den Effekt zu erklären. Durch diese Rechnungen wird das Verhalten nur qualitativ richtig wiedergegeben. Eine genaue Anpassung erfordert umfangreiche Rechnungen, die nur zu recht-

fertigen wären, wenn über die Potentiale genaue Information vorliegen würde.

Ein weiteres Beispiel für die Anwendbarkeit der SLZ-Theorie sind Rechnungen zur Streuung von  $H_2^+$  an Kr. In der Abb. 13 sind die Messungen aus der

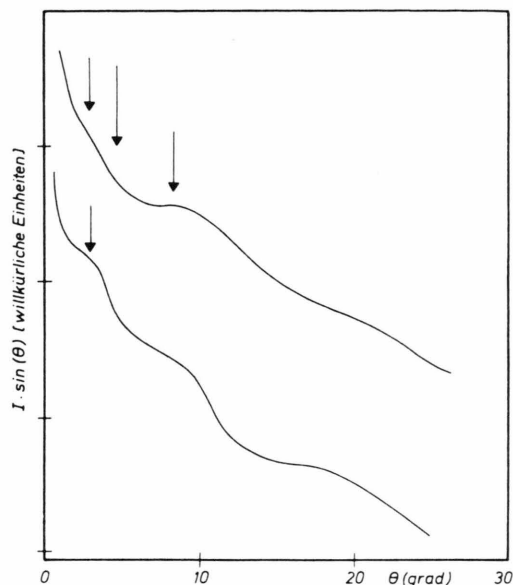


Abb. 13.  $H_2^+$ -Kr: Gemessene Streuquerschnitte aus <sup>17</sup> (obere Kurve:  $E_{CMS} = 9,77$  eV, untere Kurve:  $E_{CMS} = 25,39$  eV).

Arbeit <sup>17</sup> reproduziert. Bei den Energien im Laborsystem  $E_{lab} = 10$  eV und  $E_{lab} = 26$  eV sind im Verlauf der elastischen differentiellen Streuquerschnitte die Regenbogenstruktur und die Stueckelberg-Oszillationen zu erkennen. Bei der Umrechnung vom Laborsystem in das Schwerpunktsystem ist zu berücksichtigen, daß das Verhältnis der Massen  $m_{H_2}/m_{Kr} = 0,024$  sehr klein ist und daß die Geschwindigkeit der Teilchen im Primärstrahl ( $H_2^+$ ) sehr groß gegenüber der der Kryptonatome im thermischen Sekundärstrahl ist. Deshalb ist der Streuwinkel  $\Theta$  im Schwerpunktsystem ungefähr gleich dem Laborwinkel  $\vartheta$  und die Relativenergien sind  $E_{cms} = 9,77$  eV für  $E_{lab} = 10,0$  eV und  $E_{cms} = 25,39$  eV für  $E_{lab} = 26,0$  eV. Für das Potential von  $H_2^+$ -Kr wurde ein modifiziertes Morsepotential benutzt, für das das  $\epsilon$  so angepaßt wurde, daß damit die Regenbogenstruktur richtig wiedergegeben wird. Bei dem ladungsausgetauschten Zustand  $H_2$ -Kr<sup>+</sup> liegt die Anregungsenergie  $U_b(\infty)$  bei  $-0,77$  eV. Das  $\epsilon_b$  wurde entsprechend dem Verhältnis der Polarisierbarkeiten gewählt (in den Proberechnungen zu  $0,40$  eV und  $0,44$  eV). Mit diesen beiden Werten

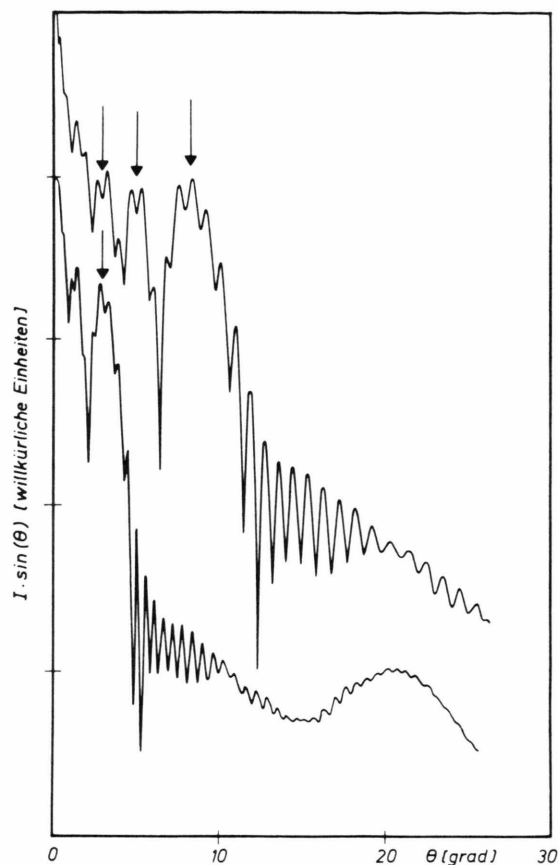


Abb. 14.  $H_2^+$ -Kr: Nach der SLZ-Theorie gerechnete Streuquerschnitte (obere Kurve  $E_{CMS} = 9,77$  eV; untere Kurve:  $E_{CMS} = 25,39$  eV).

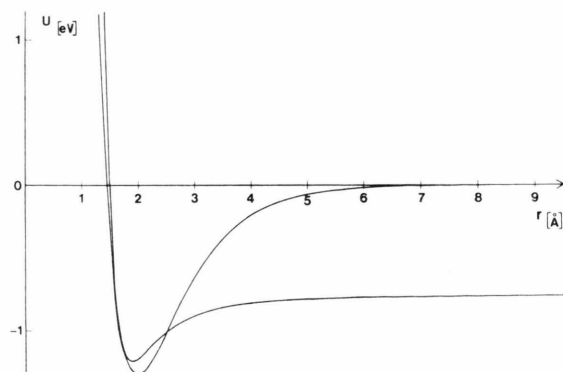


Abb. 15. Potentiale zu den  $H_2^+$ -Kr-Rechnungen. Kanal a: Morsepotential mit  $r_{ma} = 2,0$  Å;  $\epsilon_i = 1300$  meV;;  $G = 2,5$ . Kanal b: L.J.- (8,4) mit  $r_{mb} = 1,9$  Å;  $\epsilon_b = 440$  meV;  $U_b(\infty) = -770$  meV.

für  $\epsilon_b$  und einigen Versuchswerten für den Minimumabstand  $r_{mb}$  wurden mit den SLZ-Programmen die elastischen differentiellen Streuquerschnitte be-

rechnet und mit den Messungen verglichen. Für die Form des zweiten Potentials wurden Lennard-Jones-(12,4)- und (8,4)-Potentiale benutzt. In den Abb. 7 und 8 sind vier der insgesamt 10 Proberechnungen mit den zugehörigen Potentialen dargestellt. Die gerechneten Querschnitte mit der optimalen Anpassung und die entsprechenden Potentiale sind in den Abb. 14 und 15 wiedergegeben. Eine noch bessere Anpassung des Abfalles der Querschnitte bei großen Winkeln könnte durch Variation des ersten Potentials (speziell des Repulsivterms) erreicht werden. Dieser große Aufwand an Rechenzeit ist aber erst dann rentabel, wenn noch mehr gemessene Information zur Verfügung steht (Messungen über einen größeren Winkelbereich und bei mehreren Energien).

Diese beiden Anwendungsbeispiele zeigen die Eignung des SLZ-Modells für die Interpretation von Stoßprozessen mit elektronischen Zustandsänderungen.

Die vorliegende Arbeit wurde von Herrn Prof. Dr. H. Pauly angeregt und unter seiner Leitung durchgeführt. Für zahlreiche Diskussionen und Mitteilungen danke ich den Herren Dr. U. Buck, Prof. Dr. H. Krüger und Dr. P. Barwig.

Alle Rechnungen wurden auf der Rechananlage IBM 7090/1410 der Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung, Birlinghoven/Bonn, durchgeführt.

<sup>1</sup> U. Buck u. H. Pauly, Z. Phys. **208**, 390 [1968].

<sup>2</sup> U. Buck, Dissertation, Bonn 1969.

<sup>3</sup> R. Düren, G.-P. Raabe u. Ch. Schlier, Z. Phys. **214**, 410 [1968] und Sitzungsbericht Heidelberger Akad. Wiss. 3. Abhandl. Springer-Verlag, Heidelberg 1968.

<sup>4</sup> L. D. Landau, Physik. Z. Sowjetunion **2**, 46 [1932].

<sup>5</sup> C. Zener, Proc. Roy. Soc. (London) **A 137**, 696 [1932].

<sup>6</sup> E. C. G. Stueckelberg, Helv. Phys. Acta **5**, 369 [1932].

<sup>7</sup> F. T. Smith, Phys. Rev. **179**, 111 [1969].

<sup>8</sup> G.-P. Raabe, Dissertation, Bonn 1971.

<sup>9</sup> K. W. Ford u. J. A. Wheeler, Ann. Phys. **7**, 259 [1959].

<sup>10</sup> H. Pauly u. J. P. Toennies, in Adv. in Atomic and Molecular Physics **1**, 195 [1965], Academic Press.

<sup>11</sup> R. B. Bernstein, in Molecular Beams. Advances in Chem. Phys. **10**, 75 [1966] Interscience.

<sup>12</sup> M. Matsuzawa, J. Phys. Soc. Japan **25**, 1153 [1968].

<sup>13</sup> N. F. Mott u. H. S. W. Massey, The Theory of Atomic Collisions. Clarendon-Press, Oxford 1965.

<sup>14</sup> M. V. Berry, Proc. Phys. Soc. **89**, 479 [1966].

<sup>15</sup> H.-U. Mittmann, H.-P. Weise, A. Ding u. A. Henglein, Z. Naturforsch. **26 a**, 1112 [1971].

<sup>16</sup> H.-P. Weise, H.-U. Mittmann, A. Ding u. A. Henglein, Z. Naturforsch. **26 a**, 1122 [1971].

<sup>17</sup> H.-U. Mittmann, H.-P. Weise, A. Ding u. A. Henglein, Z. Naturforsch. **26 a**, 1282 [1971].

<sup>18</sup> Landolt-Börnstein, Zahlenwerte und Funktionen, Band I: Atom- und Molekularphysik, Springer-Verlag, Berlin 1956.