

# Trägheitsmomente nach Inglis und das Bohr-van-Leeuwensche Theorem

Von GERHART LÜDERS \*

Aus dem Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München  
(Z. Naturforschg. 15 a, 371–377 [1960]; eingegangen am 24. Februar 1960)

It has been stated by BOHR and MOTTELSON that INGLIS' method for the theoretical determination of moments of inertia of deformed nuclei, in the limit of a great number of non-interacting particles leads to the moment of inertia of rigid rotation. Recently doubts have been raised regarding the general validity of this statement. In the present paper the proof of the assertion is given in detail and its relation to the BOHR-VAN-LEEUEWEN theorem is discussed.

Die Rotationsbanden schwerer Atomkerne<sup>1</sup> stellen eine der faszinierendsten kernphysikalischen Erscheinungen dar, die während der letzten Jahre entdeckt wurden. Wichtigstes phänomenologisches Bestimmungsstück einer Rotationsbande ist das Trägheitsmoment  $\Theta$ , das ein Maß für den energetischen Abstand der einzelnen Terme innerhalb der Bande bildet; daneben interessieren u. a. statische elektromagnetische Eigenschaften und Matrixelemente für elektromagnetische Übergänge.

Die Behandlung des Kernrumpfes als eines inkompressibel wirbelfrei strömenden Tröpfchens<sup>2,3</sup> führt (allerdings unter Vernachlässigung sehr wesentlicher Kopplungsterme) auf das sog. Trägheitsmoment wirbelfreier Strömung<sup>3</sup>. Das Trägheitsmoment wirbelfreier Strömung verschwindet für undeformierten kugelförmigen Kernrumpf: In einem kugelförmigen Tropfen ist eine wirbelfreie Strömung unter Erhaltung der Gestalt überhaupt nicht möglich. Nur für verformten Rumpf erhält man ein nichtverschwindendes Trägheitsmoment. Für den Zusammenhang zwischen Deformation und Trägheitsmoment folgt eine definitive Vorhersage; sie kann experimentell geprüft werden<sup>4</sup>. Sie erweist sich als sehr schlecht erfüllt: Die experimentellen Trägheits-

momente sind um den Faktor 3 bis 5 größer als das Trägheitsmoment wirbelfreier Strömung<sup>3</sup>, sie sind um etwa den Faktor 2 bis 3 kleiner als das Trägheitsmoment starrer Rotation.

Ein ganz anderes Verfahren zur Bestimmung von Trägheitsmomenten von Atomkernen wurde von INGLIS entwickelt<sup>5</sup>. Man betrachtet in Anlehnung an das Schalenmodell Nukleonen, die sich ohne gegenseitige Wechselwirkung in einem klassisch gedrehten deformierten Potential bewegen (*cranking model*). Wählt man ein Oszillatorpotential und besetzt im Grundzustand nur abgeschlossene Oszillatorschalen<sup>6</sup>, so erhält man gerade das Trägheitsmoment wirbelfreier Strömung<sup>7</sup>. Bei nichtabgeschlossenen Schalen<sup>8</sup> erhält man andere Werte. Man kann insbesondere das Trägheitsmoment starrer Rotation herausbekommen. Bei kleinen Teilchenzahlen erhält man es durch Kunstgriffe (Oszillatorpotential, „Gleichgewichtsdeformation“). Es wurde aber schon früh von BOHR und MOTTELSON<sup>5</sup> behauptet, daß sich im Grenzfall großer Teilchenzahlen stets das Trägheitsmoment starrer Rotation ergebe, und zwar im wesentlichen mittels Überlegungen, die denjenigen analog sind, die zum BOHR-VAN-LEEUEWEN Theorem<sup>9</sup> für die Bewegung geladener Teilchen in einem

\* Neue Adresse: Institut für Theoretische Physik der Universität Göttingen.

<sup>1</sup> Für eine Zusammenstellung experimenteller Befunde vgl. K. ALDER, A. BOHR, T. HUUS, B. MOTTELSON u. A. WINTHER, Rev. Mod. Phys. **28**, 432 [1956].

<sup>2</sup> A. BOHR, Dan. Mat. Fys. Medd. **26**, Nr. 14 [1952].

<sup>3</sup> A. BOHR u. B. MOTTELSON, Dan. Mat. Fys. Medd. **27**, Nr. 16 [1953].

<sup>4</sup> Entscheidend ist dabei die unabhängige Bestimmung der Deformation aus statischen Quadrupolmomenten oder aus Matrixelementen für E2-Übergänge. In die Auswertung dieser Daten geht die vom Modell des strömenden Tröpfchens weitgehend unabhängige Kinematik der Rotationszustände ein. Ganz modellunabhängig läßt sich die Auswertung allerdings nicht führen; insbesondere läßt sich der Einfluß der äußeren Nukleonen nicht unabhängig von einem Modell übersehen.

<sup>5</sup> D. R. INGLIS, Phys. Rev. **96**, 1059 [1954]; **103**, 1786 [1956]. — A. BOHR u. B. MOTTELSON, Dan. Mat. Fys. Medd. **30**,

Nr. 1 [1955]. Für verschiedene Einzelheiten vgl. Abschn. 1 der vorliegenden Arbeit.

<sup>6</sup> Nur für nicht zu viele Teilchen ist eine solche Besetzung sinnvoll. Die höheren Oszillatorschalen sind nur formal definiert; energetisch überlappen sie.

<sup>7</sup> Diese Aussage, die im übrigen wohl auf einem rechnerischen Zufall beruht, ist eigentlich irreführend: Man findet nicht das Trägheitsmoment, das zur wirbelfreien Strömung mit der Dichteverteilung im Oszillatorpotential (also einer elementaren Verallgemeinerung der inkompressiblen wirbelfreien Strömung) gehört, sondern dasjenige eines zugeordneten Ellipsoids homogener Dichte.

<sup>8</sup> Man beachte, daß in diesem Modell Rumpfnukleonen und Außennukleonen in gleicher Weise behandelt werden.

<sup>9</sup> Wir kennzeichnen das Theorem durch dieselben Autorennamen wie WEISSKOPF in der unten genannten Vorlesung; vgl. im übrigen J. H. VAN VLECK, The theory of electric and magnetic susceptibilities, Oxford University Press, Oxford 1932.



äußeren Magnetfeld führen. Ein Beweis wurde in der genannten Arbeit nicht gegeben; Verf. lernte eine ausführliche Beweisskizze kennen in Vorlesungen, die WEISSKOPF im Winter 1956/57 am M. I. T. hielt<sup>10</sup>. Eine Durchführung und Diskussion des Beweises scheint bisher nicht veröffentlicht worden zu sein. Obwohl sich daher in explizit nachgerechneten Beispielen<sup>11</sup> im Grenzfall großer Teilchenzahlen das Trägheitsmoment starrer Rotation ergab, wurde noch kürzlich die allgemeine Gültigkeit dieses Resultats und sein Zusammenhang mit dem BOHR-VAN-LEEUEWENSchen Theorem bezweifelt<sup>12</sup>. Im folgenden soll daher nach einer Diskussion des INGLISSchen Verfahrens (Abschn. 1) eine sorgfältige Analyse des Falles großer Teilchenzahlen durchgeführt (Abschn. 2) und der Zusammenhang mit dem BOHR-VAN-LEEUEWENSchen Theorem untersucht werden (Abschn. 3).

Die Frage der Anwendbarkeit der INGLISSchen Formel auf Atomkerne, bei denen ein etwaiges mittleres Potential durch die Nukleonen selbst erzeugt wird und eine klassische Drehung dieses Potentials nicht möglich ist, wird hierdurch nicht berührt. Diese Frage scheint uns noch nicht überzeugend beantwortet worden zu sein.

### 1. Trägheitsmomente nach Inglis

INGLIS' Rechenvorschrift<sup>5</sup> zur Bestimmung des Trägheitsmoments von Atomkernen kann auf folgende physikalische Modellvorstellung<sup>13</sup> zurückgeführt werden: In einem zunächst ruhenden äußeren Potential bewegen sich wechselwirkungsfreie Fermionen<sup>14</sup>. Das Potential ist um eine feste Achse (etwa die  $x$ -Achse) drehbar. Es wird langsam (adiabatisch) in Bewegung gesetzt. Mit der Drehung ist ein in erster Näherung zur Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  proportionaler Erwartungswert der Drehimpulskomponente in  $x$ -Richtung<sup>15, 16</sup>

$$\langle L_x \rangle_\omega = \Theta \omega \quad (1)$$

<sup>10</sup> Die vorliegende Arbeit beruht sehr wesentlich auf diesen Vorlesungen.

<sup>11</sup> Für Oszillatorpotential: A. BOHR u. B. MOTTELSON, Dan. Mat. Fys. Medd. **30**, Nr. 1 [1955]; V. F. WEISSKOPF, Vorlesungen Winter 1956/57; für Kastenpotential: R. D. AMADO u. K. A. BRUECKNER, Phys. Rev. **115**, 778 [1959].

<sup>12</sup> R. D. AMADO u. K. A. BRUECKNER, a. a. O.

<sup>13</sup> Dies ist nicht die übliche Erläuterung der Rechenvorschrift; die hier dargelegte Auffassung empfiehlt sich insbesondere für die Übertragung auf das klassische (unquantisierte) Problem (vgl. Abschn. 2).

<sup>14</sup> Das Modell kann auf Fermionen mit gegenseitiger Wechselwirkung ausgedehnt werden; hier interessiert jedoch gerade der Fall ohne Wechselwirkung.

verbunden. Der Proportionalitätsfaktor  $\Theta$  wird als Trägheitsmoment des entsprechenden Atomkerns gedeutet.

Für die rechnerische Durchführung dieses Programms, d. h. für die Gewinnung der INGLISSchen Formel, sei der Ein-Teilchen-HAMILTON-Operator in dem zunächst ruhenden Potential in der Form

$$h = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (2)$$

aufgestellt. Wird das Potential jetzt mit der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  um die  $x$ -Achse gedreht, so ist der Zusammenhang zwischen einem mit dem Potential mitbewegten (körperfesten) Koordinatenvektor  $r'$  und einem raumfesten Koordinatenvektor  $r$  gegeben durch<sup>17</sup>

$$r = e^{-i\omega l_x t} r' e^{i\omega l_x t}, \quad (3)$$

wobei  $l_x$  die  $x$ -Komponente des Bahndrehimpulses<sup>18</sup> bedeutet. Führt man einen kanonischen Impuls  $p'$  ein durch die zu Gl. (3) analoge Festsetzung

$$p = e^{-i\omega l_x t} p' e^{i\omega l_x t}, \quad (4)$$

so lautet die SCHRÖDINGER-Gleichung für die Bewegung eines Teilchens in dem sich drehenden Potential

$$i \dot{\psi} = e^{-i\omega l_x t} \left( \frac{p'^2}{2m} + V(r') \right) e^{i\omega l_x t} \psi. \quad (5)$$

Dabei wurde benutzt, daß  $l_x = l_x'$  ist. Ersetzt man schließlich die Wellenfunktion  $\psi$  durch

$$\psi' = e^{i\omega l_x t} \psi, \quad (6)$$

so gilt für  $\psi'$  eine SCHRÖDINGER-Gleichung mit zeit-unabhängigem HAMILTON-Operator

$$i \dot{\psi}' = \left( \frac{p'^2}{2m} + V(r') - \omega l_x' \right) \psi'. \quad (7)$$

Mit dieser SCHRÖDINGER-Gleichung in körperfesten Variablen ist daher ein formales Eigenwertproblem

$$h' \psi_j' \equiv \left( \frac{p'^2}{2m} + V(r') - \omega l_x' \right) \psi_j' = \varepsilon_j' \psi_j' \quad (8)$$

<sup>15</sup> Diese Aussage wird im Zusammenhang mit Gl. (9) verschärft werden.

<sup>16</sup> In Abschn. 1 und Anh. 1 bedeuten spitze Klammern quantenmechanische Erwartungswerte im Mehr-Teilchen-Problem. Die Winkelgeschwindigkeit wird als Index angegeben.

<sup>17</sup> Ist  $\omega$  nicht zeitlich konstant (vgl. weiter unten), so ist zu setzen  $r = \exp[-i l_x \int \omega(t') dt'] r' \exp[i l_x \int \omega(t') dt']$  und entsprechend für  $p$ .

<sup>18</sup> Berücksichtigt man den Spin, so erscheint hier der Gesamtdrehimpuls (Bahn+Spin) des einzelnen Teilchens.

verbunden. Die Größe  $\varepsilon_j'$  stellt nur für ruhendes Potential ( $\omega = 0$ ) die Energie<sup>19</sup> dar; sie soll sonst als Pseudoenergie bezeichnet werden.

Die SCHRÖDINGER-Gleichung im mitbewegten System [Gl. (7)] erlaubt unmittelbar die Anwendung des quantenmechanischen Adiabatenprinzips<sup>20</sup>: Ändert man die Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  adiabatisch, so bleibt eine Eigenlösung von Gl. (8) stets Eigenlösung. Dabei ist das Fehlen dauernder Entartung vorausgesetzt; das Potential darf insbesondere nicht drehsymmetrisch um die  $x$ -Achse sein. Beginnt man also bei  $\omega = 0$  mit einem Eigenzustand des HAMILTON-Operators und setzt das Potential adiabatisch in Drehung, so geht der ursprüngliche Eigenzustand in den entsprechenden Eigenzustand von Gl. (8) über. Alle Überlegungen übertragen sich sofort auf ein Mehr-Fermionen-Problem ohne Wechselwirkung; man hat nur die Ein-Teilchen-Zustände des ruhenden Potentials unter Beachtung des PAULI-Prinzips zu besetzen.

Verschwindet<sup>21</sup> der Erwartungswert des Gesamtdrehimpulses  $L_x$  für  $\omega = 0$

$$\langle L_x \rangle_0 = 0, \quad (9)$$

so wird der Erwartungswert von  $L_x = L_x'$  in erster Näherung proportional zur Winkelgeschwindigkeit  $\omega$ . Das durch Gl. (1) definierte Trägheitsmoment kann sofort berechnet werden und ergibt sich zu<sup>5</sup>

$$\Theta = 2 \sum_n \frac{|\langle n | L_x | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0}. \quad (10)$$

Das Trägheitsmoment hängt natürlich ab vom Zustand  $|0\rangle$  des Systems für  $\omega = 0$ .  $|0\rangle$  und  $|n\rangle$  sind Eigenzustände für ruhendes Potential,  $E_0$  und  $E_n$  die entsprechenden Energiewerte; die Energiedifferenzen lassen sich auf solche zwischen Ein-Teilchen-Energien zurückführen.

Aus Gl. (10) folgt u. a., daß das Trägheitsmoment des Grundzustandes für manche Potentiale<sup>11</sup> im Grenzfall sehr vieler Teilchen den Wert für starre Rotation

$$\Theta_{st} = \int (\mathbf{r}_0 \times \mathbf{r})^2 \varrho(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (11)$$

annimmt;  $\varrho(\mathbf{r})$  ist die Massendichte für ruhendes Potential,  $\mathbf{r}_0$  der Einheitsvektor in  $x$ -Richtung (Drehachse). Der Grenzfall vieler Teilchen mit FERMI-Statistik entspricht dem Grenzfall großer Quantenzahlen und sollte eine klassische Behandlung erlauben; sie wird im folgenden Abschn. 2 gegeben. Die große Teilchenzahl gestattet dabei die Verwendung von Begriffsbildungen der statistischen Mechanik, insbesondere der Dichte im Phasenraum. Eine solche Behandlung führt in der Tat unabhängig von der speziellen Gestalt des Potentials auf das Trägheitsmoment starrer Rotation. Wir untersuchen nicht die Frage, wie groß die Teilchenzahl sein muß, damit diese Aussage in guter Näherung richtig ist.

## 2. Klassische Behandlung

Die Bewegung eines klassischen Systems unabhängiger Teilchen in einem ruhenden Potential  $V(\mathbf{r})$  läßt sich formulieren mittels einer HAMILTON-Funktion, die eine Summe von Ein-Teilchen-HAMILTON-Funktionen nach Gl. (2) ist. Im Grenzfall großer Teilchenzahlen läßt sich der Grundzustand trotz des dort wirksamen spezifisch quantenmechanischen PAULI-Prinzips klassisch (oder eigentlich statistisch-mechanisch) beschreiben: Die Dichte  $\sigma_0$  im Phasenraum mit dem Volumenelement<sup>22</sup>  $(2\pi)^{-3} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p}$  hängt nur ab von der Ein-Teilchen-Energie  $\varepsilon$  (dem Zahlenwert von  $h$ ), und zwar in solcher Weise, daß

$$\sigma_0(\varepsilon) = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix} \text{ für } \varepsilon \begin{Bmatrix} < \\ > \end{Bmatrix} \varepsilon_F \quad (12)$$

(wechselwirkungsfreie Fermionen bei der Temperatur null). Die FERMI-Energie  $\varepsilon_F$  ist dadurch bestimmt, daß

$$(2\pi)^{-3} \int \sigma_0(\varepsilon) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p} = A, \quad (13)$$

wobei  $A$  die Zahl der Teilchen ist. Da die Phasenraum-dichte  $\sigma_0$  nach Gl. (12) nur von der Ein-Teilchen-Energie  $\varepsilon$  abhängt, der Betrag der Geschwindigkeit  $v$  an einem festen Raumpunkt  $\mathbf{r}$  durch  $\varepsilon$  völlig bestimmt ist und da ferner

$$d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p} = m^3 d^3\mathbf{r} d^3v \quad (14)$$

<sup>19</sup> Von der Energie und damit zusammenhängenden Fragestellungen handelt Anh. 1.

<sup>20</sup> M. BORN, Z. Phys. **40**, 167 [1926]; M. BORN u. V. FOCK, Z. Phys. **51**, 165 [1928].

<sup>21</sup> Diese Bedingung ist in vielen Fällen aus Symmetriegründen erfüllt. Wichtige Ausnahme mit dem Gesamtdrehimpuls  $J_x$  statt des Bahndrehimpulses  $L_x$ : Das Potential ist drehsymmetrisch um eine zur  $x$ -Achse senkrechte Richtung; ein

Zustand mit Drehimpulskomponente  $\pm \frac{1}{2}$  in dieser Richtung ist einfach besetzt und die Wellenfunktion ist in angemessener Weise symmetriert. Es tritt die übliche Entkopplungskonstante (decoupling constant) auf; A. BOHR u. B. R. MOTTelson, Dan. Mat. Fys. Medd. **27**, Nr. 16 [1953].  
<sup>22</sup> Für eine einzige Sorte von Teilchen mit Spin null; andernfalls treten hier und in einigen späteren Beziehungen elementare Gewichtungsfaktoren auf.

ist, folgt isotrope Geschwindigkeitsverteilung in jedem Raumpunkt. Der Wert<sup>23</sup> des Bahndrehimpulses  $\mathcal{L}$  des Gesamtsystems kann durch ein Integral des Ein-Teilchen-Bahndrehimpulses  $\mathbf{l}$  mit  $\sigma_0(\varepsilon)$  als Gewichtsfunktion ( $A$ -facher Scharmittelwert)<sup>24</sup> dargestellt werden

$$\mathcal{L} = (2\pi)^{-3} \int \mathbf{l} \sigma_0(\varepsilon) d^3r d^3p \equiv A \langle \mathbf{l} \rangle_0 \quad (15)$$

Wegen Isotropie der Geschwindigkeitsverteilung folgt<sup>25</sup>

$$\langle \mathbf{l} \rangle_0 = 0. \quad (16)$$

Dreht sich das Potential mit konstanter Winkelgeschwindigkeit  $\omega$ , hat man also ein in bestimmter Weise zeitabhängiges Potential, so empfiehlt sich die Einführung neuer kanonischer Variablen<sup>26</sup>  $\mathbf{r}'$  und  $\mathbf{p}'$  durch

$$\mathbf{r} = \Phi(t) \cdot \mathbf{r}', \quad \mathbf{p} = \Phi(t) \cdot \mathbf{p}', \quad (17)$$

Der Tensor zweiter Stufe  $\Phi(t)$  ist definiert durch

$$\Phi(0) = I, \quad \dot{\Phi}(t) = \omega \mathbf{r}_0 \times \Phi(t) \quad (18)$$

( $I$  = Einheitsensor). Diese kanonische Transformation ist zeitabhängig; die HAMILTON-Funktion  $h$  ändert sich in

$$h' = \frac{\mathbf{p}'^2}{2m} + V(\mathbf{r}') - \omega \mathbf{l}_x' \quad (19)$$

mit zeitlich konstantem Potential  $V(\mathbf{r}')$ ; vgl. Gl. (8) (s. a. Anm. <sup>27</sup>). Der Zahlenwert  $\varepsilon'$  von  $h'$  ist zeitlich konstant; er ist außer für  $\omega = 0$  nicht die Energie und soll für  $\omega \neq 0$  als Pseudoenergie bezeichnet werden. Der körperfeste Impuls  $\mathbf{p}'$  geht aus dem raumfesten  $\mathbf{p}$  durch eine Drehung hervor.  $\mathbf{p}'$  ist daher nicht bis auf den Massenfaktor  $m$  gleich der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}'$  im körperfesten System; vielmehr gilt

$$\mathbf{p}' = m(\mathbf{v}' + \omega \mathbf{r}_0 \times \mathbf{r}'). \quad (20)$$

Für die  $x$ -Komponente des Drehimpulses folgt damit

$$l_x = l_x' \equiv \mathbf{r}_0 \cdot (\mathbf{r}' \times \mathbf{p}') = m \{ \mathbf{r}_0 \cdot (\mathbf{r}' \times \mathbf{v}') + \omega (\mathbf{r}_0 \times \mathbf{r}')^2 \}. \quad (21)$$

Drückt man schließlich  $\varepsilon'$  durch  $\mathbf{r}'$  und  $\mathbf{v}'$  aus, so folgt vermöge Gln. (19) und (20)

$$\varepsilon' = \frac{m}{2} \mathbf{v}'^2 - \frac{m}{2} \omega^2 (\mathbf{r}_0 \times \mathbf{r}')^2 + V(\mathbf{r}'). \quad (22)$$

Da  $\mathbf{v}'$  nur quadratisch vorkommt, bestimmen  $\mathbf{r}'$  und  $\varepsilon'$  zusammen den Betrag der Geschwindigkeit im körperfesten System auch bei  $\omega \neq 0$  eindeutig.

Wird das zunächst ruhende Potential adiabatisch in Bewegung gesetzt, so geht eine Teilchenbahn der Energie  $\varepsilon$  in eine solche der Pseudoenergie  $\varepsilon'$  über, wobei in niedrigster Näherung  $\varepsilon' = \varepsilon$  ist; die Abweichung ist erst von der Ordnung  $\omega^2$ . Es gilt nämlich<sup>28</sup>

$$\varepsilon' - \varepsilon = -\omega \overline{l}_x + O(\omega^2), \quad (23)$$

wobei der Querstrich einen zeitlichen Mittelwert über die ungestörte Bahn, d. h. bei  $\omega = 0$ , bedeutet. Ersetzt man das zeitliche Mittel über eine Bahn durch das Scharmittel über Bahnen gleicher Energie, so folgt nach Gl. (16)<sup>29</sup>

$$\overline{l}_x = 0. \quad (24)$$

Eine Energieschale zur Energie  $\varepsilon$  im Phasenraum der Variablen  $\mathbf{r}$  und  $\mathbf{p}$  geht also in eine Pseudoenergieschale mit  $\varepsilon' = \varepsilon$  im Phasenraum der Variablen  $\mathbf{r}'$  und  $\mathbf{p}'$  über. Das Volumen der Energieschalen bleibt dabei in linearer Näherung bezüglich  $\omega$  erhalten; das sieht man sofort, wenn man statt  $\mathbf{r}'$  und  $\mathbf{p}'$  die Variablen  $\mathbf{r}'$  und  $\mathbf{v}'$  einführt, beachtet, daß Gl. (14) auch für gestrichene Variablen richtig bleibt und berücksichtigt, daß der Zusammenhang zwischen  $\varepsilon'$ ,  $\mathbf{r}'$  und  $\mathbf{v}'$  nach Gl. (22) erst in der zweiten Ordnung vom Zusammenhang für  $\omega = 0$  abweicht. Für die Verteilungsfunktion  $\sigma_\omega$  bei der Win-

<sup>23</sup> Wegen der zeitlichen Schwankungen dieser Größe ist eigentlich eine glättende zeitliche Mittelung erforderlich; die Schwankungen dürften mit zunehmender Teilchenzahl abnehmen.

<sup>24</sup> Spitze Klammern bedeuten in Abschn. 2 und 3 Scharmittelwerte von Ein-Teilchen-Variablen.

<sup>25</sup> Dies ist offenbar das Analogon zu Gl. (9). Die in Anm. <sup>21</sup> erwähnten Abweichungen sind quantenmechanischer Natur und treten im klassischen Problem nicht auf.

<sup>26</sup> Dies ist genau das Analogon zu den Gln. (3) und (4); die dort gewählte Schreibweise ist im klassischen Fall jedoch nicht möglich.

<sup>27</sup> Beweis für die klassische HAMILTON-Funktion in Anh. 2.

<sup>28</sup> Diese Gleichung dürfte unmittelbar einsichtig sein. Eine mehr an die quantentheoretische Schlußweise anschlie-

ßende Argumentation verläuft folgendermaßen: 1. Bei einer adiabatischen Änderung äußerer Parameter bleiben die Werte der Wirkungsvariablen ungeändert (Adiabatenprinzip der klassischen Mechanik); 2. Störungsrechnung bei festen Werten der Wirkungsvariablen führt gerade auf Gl. (23); vgl. M. BORN, Vorlesungen über Atommechanik, Springer-Verlag, Berlin 1925. — Für die Gültigkeit von Gl. (23) ist vorausgesetzt, daß keine säkularen Störungen auftreten; insbesondere darf das Potential wie im quantenmechanischen Fall nicht rotationssymmetrisch um die  $x$ -Achse sein.

<sup>29</sup> Man beachte, daß Gl. (16) richtig ist für jede nur von  $\varepsilon$  abhängige Verteilung, also auch bei Mittelung auf der Energieschale  $[\sigma(\varepsilon) \propto \delta(\varepsilon - \varepsilon_0)]$ .



kelgeschwindigkeit  $\omega$  gilt daher in linearer Näherung bezüglich  $\omega$ , daß sie allein von der Pseudoenergie  $\varepsilon'$  abhängt, und daß sogar

$$\sigma_{\omega}(\varepsilon') = \sigma_0(\varepsilon) \text{ für } \varepsilon' = \varepsilon \quad (25)$$

ist. In den Variablen  $\mathbf{r}'$  und  $\mathbf{v}'$  ist die Verteilung wegen Gl. (22) und (14) in erster Näherung von  $\omega$  unabhängig.

Für den Wert der  $x$ -Komponente des gesamten Bahndrehimpulses gilt gemäß Gl. (21)

$$L_x = A \langle l_x \rangle_{\omega} = A m \langle \mathbf{r}_0 \cdot (\mathbf{r}' \times \mathbf{v}') \rangle_{\omega} + \omega A m \langle (\mathbf{r}_0 \times \mathbf{r}')^2 \rangle_{\omega}. \quad (26)$$

Der erste Term auf der rechten Seite hängt nur über die Verteilung  $\sigma_{\omega}(\varepsilon')$  von der Winkelgeschwindigkeit ab. Für die Auswertung dieses Terms ist daher entscheidend, daß der Scharmittelwert bei der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  durch einen solchen bei  $\omega = 0$  ersetzt werden darf, wenn die Variablen  $\mathbf{r}'$  und  $\mathbf{v}'$  verwendet werden; statt der gestrichenen sind dann natürlich ungestrichene Variablen zu schreiben. Gemäß Gl. (16) folgt nun sofort, daß der erste Term verschwindet. Der zweite Term führt auf das Trägheitsmoment starrer Rotation nach Gl. (11), wenn die Massendichte  $\varrho_0(\mathbf{r})$  im ruhenden Potential durch

$$\varrho_0(\mathbf{r}) = m (2\pi)^{-3} \int_{\mathbf{r} \text{ fest}} \sigma_0(\varepsilon) d^3\mathbf{p} \quad (27)$$

eingeführt wird. Das sollte bewiesen werden.

### 3. Bohr-van-Leeuwensches Theorem

Bewegt sich ein geladenes Teilchen unter dem Einfluß eines zeitlich konstanten Magnetfeldes, das aus einem Vektorpotential  $\mathfrak{A}(\mathbf{r})$  abgeleitet werden kann, so ist der Zusammenhang zwischen kanonischem Impuls  $\mathbf{p}$  und Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  gegeben durch

$$\mathbf{p} = m \mathbf{v} + \frac{e}{c} \mathfrak{A}(\mathbf{r}). \quad (28)$$

Für ein homogenes Magnetfeld der Stärke  $H$  in  $x$ -Richtung kann man setzen

$$\mathfrak{A}(\mathbf{r}) = \frac{H}{2} \mathbf{r}_0 \times \mathbf{r}. \quad (29)$$

Mit diesem Vektorpotential erhält Gl. (28) große Ähnlichkeit mit Gl. (20); abgesehen davon, daß in

Gl. (20) gestrichene Variablen stehen, ist für einen Vergleich beider Ausdrücke

$$\omega = e H / 2 m c \quad (30)$$

zu setzen. Die HAMILTON-Funktion  $h$  für die Bewegung eines geladenen Teilchens in einem Potential  $V(\mathbf{r})$  unter dem Einfluß des Magnetfeldes wird

$$h = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 - \frac{eH}{2mc} l_x + \frac{(eH)^2}{8mc^2} (\mathbf{r}_0 \times \mathbf{r})^2 + V(\mathbf{r}). \quad (31)$$

Bis auf das in  $H$  quadratische Glied stimmt die HAMILTON-Funktion mit der in Gl. (19) gegebenen überein, wenn man  $\omega$  gemäß Gl. (30) wählt (LARMOR-sches Theorem). Drückt man den Zahlenwert von  $h$ , die Energie<sup>30</sup>  $\varepsilon$ , durch Ortsvektor  $\mathbf{r}$  und Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  aus, so erhält man

$$\varepsilon = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 + V(\mathbf{r}). \quad (32)$$

Das stimmt mit Gl. (22) nicht genau überein; die Abweichungen sind aber erst von zweiter Ordnung in  $\omega$ . Vor allem aber gilt auch jetzt, daß der Betrag von  $\mathbf{v}$  durch  $\mathbf{r}$  und  $\varepsilon$  bestimmt ist.

Hat man nun ein System geladener Teilchen ohne gegenseitige Wechselwirkung mit einer Verteilung  $\sigma$  im Phasenraum, die nur von der Ein-Teilchen-Energie  $\varepsilon$  abhängt, so ist die Geschwindigkeitsverteilung in jedem Raumpunkt nach der in Abschn. 2 durchgeführten Überlegung isotrop<sup>31</sup>. Daraus folgt nach der in Zusammenhang mit Gl. (16) verwendeten Schlußweise insbesondere, daß das magnetische Moment

$$\mathfrak{M}(H) = \frac{e}{2c} A \langle \mathbf{r} \times \mathbf{v} \rangle_H \quad (33)$$

dieses Systems geladener Teilchen verschwindet. Dies ist, üblicherweise für

$$\sigma(\varepsilon) \propto \exp(-\varepsilon/kT) \quad (34)$$

(BOLTZMANN-Statistik) formuliert, das Theorem von BOHR und VAN LEEUWEN<sup>9</sup>. Im Prinzip bleibt das Theorem für andere (etwa der FERMI-Statistik entsprechende) Verteilungen  $\sigma(\varepsilon)$  gültig; von der magnetischen Fragestellung her ist das aber nicht interessant, weil das BOHR-VAN-LEEUEWENSche Theorem schon für BOLTZMANN-Statistik durch Quanteneffekte ungültig gemacht wird<sup>32</sup>.

<sup>30</sup> Genau genommen gibt es hier ähnliche Komplikationen wie bei dem rotierenden Potential: Obiges  $\varepsilon$  ist die Energie des Systems im gegebenen äußeren Feld, d. h. die zur Aufrechterhaltung des Magnetfeldes erforderliche Energie ist fortgelassen (eine bewegte Ladung ruft eine Induktionsspannung in der fernen stromdurchflossenen Spule hervor, die das Magnetfeld erzeugt).

<sup>31</sup> Dabei wird wieder Gl. (14) verwendet.

<sup>32</sup> L. LANDAU, Z. Phys. **64**, 629 [1930]. — Bei dem Problem des Trägheitsmoments liefert bereits die klassische Rechnung (im Gegensatz zum Problem des Diamagnetismus) ein nichtverschwindendes Resultat; die von LANDAU entdeckte quantenmechanische Korrektur spielt daher keine Rolle.

Es bleibt noch der Zusammenhang zwischen diesem Theorem und der in Abschn. 2 gegebenen Ableitung des Trägheitsmoments zu untersuchen. Man hat zunächst folgende Unterschiede: 1. Einer echten Energie<sup>30</sup> im Falle des Magnetismus entspricht eine Pseudoenergie im Falle der Trägheitsmomente. 2. Im Falle der Trägheitsmomente ist nicht primär eine Verteilung in der Pseudoenergie  $\sigma_\omega(\varepsilon')$  gegeben; insbesondere ist keineswegs klar, daß der Grundzustand durch die Grundzustandsverteilung im Sinne der FERMI-Statistik zu beschreiben ist, wobei die Energie durch die Pseudoenergie ersetzt wird<sup>33</sup>. In Abschn. 2 wurden die mit diesen Unterschieden verbundenen Schwierigkeiten dadurch bewältigt, daß (in Analogie zu unserer Deutung des quantenmechanischen Verfahrens) derjenige Zustand aufgesucht wurde, der aus dem Grundzustand im ruhenden Potential durch adiabatisches In-Drehung-Setzen hervorgeht. Mindestens in der niedrigsten Näherung bezüglich der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  geht dann eine (d. h. die der FERMI-Statistik für Temperatur null entsprechende) Verteilung in der Energie  $\varepsilon$  über in dieselbe Verteilung in der Pseudoenergie  $\varepsilon'$ . Die bei der Ableitung des BOHR-VAN-LEEUEWENSchen Theorems benutzten Schlüsse, die auf der Isotropie der Geschwindigkeitsverteilung beruhen, lassen sich, wenn Gl. (20) bzw. die daraus hervorgehende Gl. (26) beachtet wird, übertragen auf den Nachweis, daß man das Trägheitsmoment starrer Rotation erhält.

Das BOHR-VAN-LEEUEWENSche Theorem ist nicht auf die niedrigste Näherung in der magnetischen Feldstärke  $H$  beschränkt. Es scheint, daß das Analogon für Drehbewegungen ebenfalls allgemeiner gilt, obwohl für die Modellberechnung von Trägheitsmomenten der Atomkerne zunächst nur die erste Näherung interessant ist. In Analogie zu Gl. (23) hat man allgemein

$$d\varepsilon'/d\omega = -\bar{l}_x, \quad (35)$$

wobei das Zeitmittel bei der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  zu bilden ist. Nimmt man an, daß die Verteilung  $\sigma_\omega$  bei der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  nur von  $\varepsilon'$  abhängt und ersetzt wie früher Zeitmittel durch Scharmittel, so folgt, daß die rechte Seite von Gl.

(30) außer von der Winkelgeschwindigkeit nur von der Pseudoenergie  $\varepsilon'$  (und nicht von der speziellen Bahn) abhängt. Zwar kann man jetzt nicht mehr zeigen, daß sich das Volumen der Energieschale bei einer infinitesimalen Änderung von  $\omega$  nicht ändert; man wird aber annehmen dürfen, daß die Verdünnung (oder Verdichtung) der Bahnen im Phasenraum in einer so regellosen Weise erfolgt, daß man auch bei infinitesimaler Änderung von  $\omega$  eine nur von  $\varepsilon'$  abhängige Verteilung behält. Die Geschwindigkeitsverteilung bleibt damit isotrop; in Gl. (26) verschwindet immer noch der erste Term und man erhält das Trägheitsmoment der starren Rotation, aber mit der Dichteverteilung  $\varrho_\omega(\mathbf{r}')$  bei der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  und nicht bei  $\omega = 0$ .

Überlegt man das Verhalten des Systems bei Umkehr der Bewegungsrichtung (Zeitumkehr), so folgt übrigens, daß  $\varepsilon'$  eine gerade Funktion der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  ist

$$\varepsilon' = \varepsilon + a_1(\varepsilon) \omega^2 + a_2(\varepsilon) \omega^4 + \dots \quad (36)$$

Das ist der tiefere Grund dafür, daß wir in erster Näherung keine Abweichung der Größe  $\varepsilon'$  von  $\varepsilon$  erhielten<sup>34</sup>.

Herrn V. F. WEISSKOPF danke ich für eine briefliche Diskussion und für die großzügige Genehmigung, unveröffentlichte Überlegungen aus seinen Vorlesungen zu verwenden.

## Anhang I

### Energie, Pseudoenergie und Drehimpuls

Die Energie  $\varepsilon$  eines quantenmechanischen Ein-Teilchen-Zustandes ist im Gegensatz zur Pseudoenergie  $\varepsilon'$  als Erwartungswert von

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}') = h' + \omega l_x' \quad (A. 1)$$

gegeben. Für die Gesamtenergie (Summe der Ein-Teilchen-Energien) gilt daher

$$E(\omega) = E'(\omega) + \omega L_x(\omega) \quad (A. 2)$$

mit  $E'(\omega)$  als Summe der Ein-Teilchen-Pseudoenergien und  $L_x(\omega)$  als Erwartungswert

$$L_x(\omega) \equiv \langle L_x \rangle_\omega. \quad (A. 3)$$

Kennt man  $E'(\omega)$ , so läßt sich auch  $L_x(\omega)$  berechnen;

<sup>33</sup> Dem entspricht, daß auch bei dem quantenmechanischen Problem nicht unmittelbar eingesehen werden kann, warum die Eigenlösungen zu Gl. (8) physikalisch besonders interessant sind.

<sup>34</sup> Vgl. Gln. (23) und (24) und die dabei gegebenen Erläuterungen.

<sup>35</sup> Elementarer Beweis mittels Störungsrechnung erster Näherung.

man hat nämlich <sup>35</sup>

$$L_x(\omega) = -dE'(\omega)/d\omega. \quad (\text{A. 4})$$

Differenziert man Gl. (A. 2) nach der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  und beachtet Gl. (A. 4), so folgt

$$dE(\omega)/d\omega = \omega \cdot dL_x(\omega)/d\omega \quad (\text{A. 5})$$

als Beziehung zwischen der Energie (nicht der Pseudoenergie) und dem Drehimpuls. Diese Beziehung war zu erwarten für ein System, in dem Energie und Drehimpuls allein durch die Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  bestimmt sind; eine solche eindeutige Abhängigkeit von  $\omega$  hat man sicher dann, wenn die Zustände verschiedener Winkelgeschwindigkeit durch adiabatische Änderung der Winkelgeschwindigkeit auseinander hervorgehen <sup>36</sup>.

Gl. (A. 5) gilt auch bei klassischer Behandlung der Teilchenbewegung, allerdings nur, wenn eine glättende zeitliche Mittelung vorgenommen wird. Die Energie  $\varepsilon(\omega)$  der einzelnen Bahn im rotierenden Potential ist nicht zeitliche Mittelung vorgenommen wird. Die Energie  $\varepsilon(\omega)$  dem zeitlichen Mittelwert der in Gl. (A. 1) angegebenen Größe. Für die zeitlich geglättete Gesamtenergie gilt daher wiederum Gl. (A. 2). Andererseits folgt Gl. (A. 4) jetzt sofort aus Gl. (35).

<sup>36</sup> Auch bei wirbelfreier Strömung sind Energie und Drehimpuls durch die Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  eindeutig bestimmt; auch dort gilt daher Gl. (A. 5) (V. F. WEISSKOPF, a. a. O.).

## Anhang 2

### Kanonische Transformation auf das körperfeste System

Die kanonische Transformation Gl. (17) kann aus einer Erzeugenden

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}'; t) = \mathbf{r} \cdot \Phi(t) \cdot \mathbf{p}' \quad (\text{A. 6})$$

$$\text{mittels} \quad \mathbf{p} = \partial f / \partial \mathbf{r}, \quad \mathbf{r}' = \partial f / \partial \mathbf{p}' \quad (\text{A. 7})$$

hergeleitet werden. Zur Bestätigung der zweiten Gl. (A. 7) muß man beachten, daß <sup>37</sup>

$$\mathbf{r} \cdot \Phi(t) = \Phi^{-1}(t) \cdot \mathbf{r} \quad (\text{A. 8})$$

ist. Die kanonische Transformation ist zeitabhängig; die HAMILTON-Funktion ist daher gemäß

$$h' = h + \partial f / \partial t \quad (\text{A. 9})$$

abzuändern. Nun folgt unter Verwendung der zweiten Gl. (18), der zweiten Gl. (17), sowie elementarer Vektoralgebra

$$\partial f / \partial t = \mathbf{r} \cdot \dot{\Phi}(t) \cdot \mathbf{p}' = \omega \cdot \mathbf{r} \cdot (\mathbf{r}_0 \times \mathbf{p}) = -\omega L_x. \quad (\text{A. 10})$$

Damit führt Gl. (A. 9) aber sofort auf Gl. (19), wenn man noch beachtet, daß  $L_x = L_x'$  ist.

<sup>37</sup>  $\Phi(t)$  erzeugt eine Drehung, wird also durch eine orthogonale Matrix dargestellt.

# Zum Polarisationspotential für Elektronen im Feld eines Atoms oder Atomrumpfes

VON HELMUT REEH

Aus dem Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München

(Z. Naturforsch. 15 a, 377—397 [1960]; eingegangen am 11. Februar 1960)

The polarisation potential acting on an electron (or positron) in the field of an atom or ion is calculated. Neglecting the exchange between the core and valence electrons, the wave function  $\Phi$  of the core is written as  $\Phi = \Phi_0 + \chi$ , where  $\Phi_0$  is the unperturbed core wave function, and  $\chi$  corresponds to the perturbation of the core by the valence electron, and is required to be orthogonal to  $\Phi_0$ . Then eq. (7) gives the expression for the polarisation potential. The perturbation  $\chi$  of the core is calculated from a stationary perturbation theory of first order [eq. (11)] for hydrogen-like core orbits of principle quantum number 1 and 2; the corresponding polarisation potentials are calculated and are shown in Fig. 1, 2 and 3 (sec. 5). An approximation for many electron cores is given in sec. 6 and applied to helium- and neon-like core configurations (Fig. 4); simple analytical approximations of the polarisation potential are given for these cases. The results for  $\text{Si}^{4+}$  are discussed and compared with the results of other authors (sec. 7). The last section of the paper contains some critical remarks on the stationary approximation. It is shown that the influence of the "kinetic terms" enlarges the polarisation effects, contrary to the usual supposition. — An appendix contains a derivation of an expression for the polarisation potential acting on two valence electrons for large distances from the core.

Bei der Berechnung der Wellenfunktionen von Elektronen im Feld eines Atoms oder Ions möchte man die Wechselwirkung dieser Elektronen <sup>1</sup> mit der

Elektronenhülle des Atoms oder Ions <sup>2</sup> berücksichtigen. In vielen Fällen kann man voraussetzen, daß diese Wechselwirkung abgesehen vom Abschirmungs-

<sup>1</sup> Im folgenden sagen wir dazu Valenzelektronen, wollen dabei aber den Fall kontinuierlicher Zustände einschließen.

<sup>2</sup> Im folgenden sprechen wir von der Rumpfhülle und den Rumpfelektronen, wollen aber den Fall eines neutralen Atoms mit einschließen.