

Über den Einfluß der Zwei-Teilchen-Spin-Bahn-Wechselwirkung auf die Winkelverteilung und die Polarisation am Deuteron elastisch gestreuter Neutronen*

Von Asok K. BOSE **

Aus dem Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München
(Z. Naturforschg. 16 a, 95—112 [1961]; eingegangen am 25. Februar 1960)

In der vorliegenden Arbeit wird der Einfluß der zusätzlichen Spin—Bahnwechselwirkung auf die elastische Streuung von Neutronen an Deuteronen unter Berücksichtigung des PAULI-Prinzips mittels zweier Näherungsverfahren untersucht.

Zunächst wird die Streuformel der BOEWSCHEN Näherung in einen Spurausdruck umgeformt und dann gezeigt, daß im allgemeinen (1) die Spin—Bahn- und die Zentralkräfte nicht interferieren, (2) die Spin—Bahnkräfte zur Vorwärtsstreuung keinen Beitrag liefern und (3) es keinen Polarisationseffekt gibt. Ferner wird unter Annahme GAUSSSCHER Ortsabhängigkeit der Wechselwirkungen numerisch nachgewiesen, daß die Beiträge der Spin—Bahnkräfte zu den Winkelverteilungen ($E_{\text{Lab}} = 50$ bzw. 100 MeV) überhaupt ohne Bedeutung sind. Sodann wird die gekoppelte Gleichung für die Radialfunktionen in der „No-Polarisation“-Approximation hergeleitet. Es stellt sich heraus, daß die Bahnanteile der direkten Spin—Bahnkräfte durch ein über die Wellenfunktion des Deuterons gemitteltes Potential wirken und daß die Wirkung der Bahnanteile der Austausch-Spin—Bahnkräfte wesentlich verschieden von der der direkten Spin—Bahnkräfte und der der Austausch-Zentralkräfte ist.

Es ist bekannt, daß man zusätzliche Spin—Bahnkräfte annehmen muß, um die Energieniveaus, Quadrupolmomente und magnetischen Momente der Atomkerne und die Ergebnisse von Streuversuchen zu erklären. Man setzt gewöhnlich eine Ein-Teilchen-Spin-Bahnwechselwirkung an, aber diese Kraft stellt keine Nukleon—Nukleonwechselwirkung dar. Wir wollen hier versuchen, den Einfluß der zusätzlichen Zwei-Teilchen-Spin-Bahnkräfte auf die elastische Streuung des Neutrons am Deuteron zu untersuchen. Es ist zweckmäßig, zunächst einige der früheren Arbeiten über n—D-Streuung kurz zu besprechen.

Bei kleineren Energien ist die n—p-Streuung isotrop, d. h. man kann daraus nichts über Austauschkräfte erfahren. Daher beschäftigten sich BUCKINGHAM und MASSEY¹ schon 1941 mit dem n—D-Problem, um eine Aussage über die Austauschkräfte aus Streuversuchen bei kleinen Energien zu gewinnen. Die Verfasser nahmen für die Nukleon—Nukleonwechselwirkung Zentralkräfte an und rechneten unter Verwendung der „Resonating Group Structure“-Methode² die Winkelverteilungen der Neutronen aus, und zwar für verschiedene Zentralkraft-Mi-

schungen und für verschiedene Energien³ in dem Bereich 2 bis 20 MeV ***. Die obere Grenze röhrt von der Beschränkung auf $l=2$ her; die untere entsteht daraus, daß man glaubte, das Näherungsverfahren verliere unter 2 MeV seine Gültigkeit.

Übrigens kann man durch die Anwendung der „No-Polarisation“-Approximation⁴ — d. h. des Näherungsverfahrens, wobei man die Störung des Deuterons durch das herankommende Neutron vernachlässigt — und unter Berücksichtigung des PAULI-Prinzips für die beiden Neutronen die zwei Systeme der Integrodifferentialgleichungen (Dublett und Quartett) für die Streuamplitude von BUCKINGHAM und MASSEY viel leichter gewinnen. Die Rechnung läßt sich noch weiter vereinfachen, wenn man beachtet, daß der Bahndrehimpuls des Neutrons relativ zum Deuteronschwerpunkt, der Grundzustand des Deuterons wird als reiner S-Zustand angenommen, für reine Zentralkräfte eine gute Quantenzahl darstellt.

Obwohl dieses Näherungsverfahren in der Theorie der Kernreaktionen üblich ist, ist es schwer, es für einen leichten Kern wie das Deuteron plausibel zu machen. Vielleicht ist das Verfahren brauchbar,

* Dissertation, Göttingen 1957.

** Jetzt an der Université de Montréal, Montréal, Canada.

¹ R. A. BUCKINGHAM u. M. S. W. MASSEY, Proc. Roy. Soc., Lond. A **179**, 123 [1941].

² JOHN A. WHEELER, Phys. Rev. **52**, 1107 [1937].

³ R. A. BUCKINGHAM, S. J. HUBBARD u. H. S. W. MASSEY, Proc. Roy. Soc., Lond. A **211**, 183 [1952].

*** Wir wollen vereinbaren, die Energie des einlaufenden Neutrons im Laborsystem und den Streuwinkel im Schwerpunktsystem auszudrücken.

⁴ L. MOTZ u. J. SCHWINGER, Phys. Rev. **58**, 26 [1940].



wenn das Neutron am Deuteron schnell genug vorbeifliegt. Vor einiger Zeit konnte durch eine Phasenanalyse⁵ festgestellt werden, daß die Dublett-Streuung zum differentiellen Streuquerschnitt keinen wesentlichen Beitrag liefert. Da die Polarisation bei kleinen Energien für die Quartett-Streuung wegen des PAULI-Prinzips geringe Bedeutung hat, glaubt man damit die Vernachlässigung der Polarisation rechtfertigen zu können (gemeint ist hier mit Polarisation immer die Störung der Wellenfunktion des Deuterons).

Bis vor einiger Zeit war es nicht möglich^{3,6}, einen genaueren Vergleich zwischen den Voraussagen von MASSEY u. a. und den experimentellen Daten durchzuführen, denn die Meßresultate waren nicht sehr zuverlässig und außerdem erstreckten sie sich nur über einen Winkelbereich von 60° bis 180° . Da die Winkelverteilung der Neutronen nicht um 90° symmetrisch ist, ist es aber nötig, die Messungen über den ganzen Winkelbereich durchzuführen. 1951 untersuchten nun HAMOUDA und MONTMOLLIN⁷ die Streuung von Neutronen einer Energie von 3,37 MeV an Deuteronen in einer WILSON-Kammer bis herunter zu einem Winkel von 18° . Das Ergebnis ist mit der Theorie von MASSEY u. a. nicht verträglich, da die gemessene Winkelverteilung durch einen sehr steilen Anstieg bei kleinen Winkeln gekennzeichnet ist, während die Theorie einen flachen Verlauf voraussagt. Die Verfasser wiesen darauf hin, daß vielleicht Spin-Bahn-Kräfte eine Rolle spielen könnten. Auch die Ergebnisse von Streumessungen mit Neutronen einer Energie von 14,1 MeV durch ALLRED u. a.⁸, die sich über 46° bis 176° erstreckten, stimmten mit den Voraussagen von MASSEY u. a. nicht überein.

CHRISTIAN und GAMMEL⁵ konnten die zuletzt genannten Ergebnisse und auch solche, die mit Neutronen einer Energie von 5 MeV erhalten wurden⁹, unter der Annahme allein von Zentralkräften gut erklären. Allerdings stimmte ihre theoretische Kurve mit der gemessenen Winkelverteilung von HAMOUDA u. a. für kleinen Winkel nicht überein; CHRISTIAN und GAMMEL vermuteten, daß vielleicht diese Messungen durch eine Beimischung von leichtem Wasser-

stoff zum Deuterium verfälscht seien. Wir möchten allerdings darauf hinweisen, daß es nicht sicher ist, ob auch bei kleinen Winkeln, bei denen keine Messungen vorliegen, die obige Theorie richtig ist, denn die experimentellen Kurven zeigen eine Tendenz, in diesem Bereich steiler anzusteigen als die entsprechenden theoretischen Kurven (s. Fig. 10 in Anm.⁵).

Eine eingehende Diskussion der Methode von CHRISTIAN und GAMMEL und deren Schlußfolgerung, daß der $n - D$ -Streuquerschnitt überhaupt nicht von der $n - n$ -Wechselwirkung abhänge, findet sich bei DE BORDE und MASSEY¹⁰. In Hinblick auf die Arbeit von CHRISTIAN und GAMMEL erweiterten diese Verfasser die frühere Arbeit von MASSEY und BUCKINGHAM, indem sie den Beitrag aller höheren Drehimpulse der BORNschen Näherung mitberücksichtigten. Dadurch konnten auch diese Verfasser unter Annahme der SERBERSchen Mischung die Experimente von ALLRED u. a. erklären.

Ein größeres Verfahren, um das Streuproblem zu lösen, ist die BORNsche Näherung, wobei man die Wechselwirkung zwischen dem einlaufenden Neutron und den Nukleonen des Deuterons als Störung betrachtet. In dieser Näherung behandelten WU und ASHKIN¹¹ die Streuung von Neutronen an Deuteronen unter Annahme von zusätzlichen Tensorkräften für Energien im Bereich von 100 bis 200 MeV. Der Ausdruck dieser Verfasser für den differentiellen Streuquerschnitt ist jedoch unübersichtlich. Außerdem haben die Verfasser von vornherein nur WIGNER- und BARTLETT-Kräfte angenommen und in den eigentlichen Rechnungen die Tensorkräfte wieder fortgelassen.

Zusammenfassend kann man sagen, daß es keine gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment gibt. Es scheint deshalb wünschenswert, einerseits neue Versuche, also Bestimmung der Winkelverteilung über den ganzen Winkelbereich und der Polarisaton des gestreuten Neutrons, durchzuführen und andererseits theoretisch den Einfluß der zusätzlichen Nichtzentralkräfte zu untersuchen. In der vorliegenden Arbeit soll die Wirkung der zusätzlichen Zwei-Teilchen-Spin-Bahnkräfte auf die elastische Streuung von Neutronen an Deuteronen

⁵ R. S. CHRISTIAN u. J. L. GAMMEL, Phys. Rev. **91**, 100 [1953].

⁶ H. S. W. MASSEY, Prog. Nucl. Phys. **3**, 235 [1953].

⁷ J. HAMOUDA u. G. DE MONTMOLLIN, Phys. Rev. **83**, 1277 [1951], Helv. Phys. Acta **25**, 107 [1952].

⁸ J. C. ALLRED, A. H. ARMSTRONG u. L. ROSEN, Phys. Rev. **91**, 90 [1953].

⁹ E. WANTUCH, Phys. Rev. **84**, 169 [1951].

¹⁰ A. H. DE BORDE u. H. S. W. MASSEY, Proc. Phys. Soc., Lond. A **68**, 769 [1955].

¹¹ T. Y. WU u. J. ASHKIN, Phys. Rev. **73**, 986 [1948].

mittels der genannten beiden Näherungsverfahren (BORNsche Näherung und „No-polarisation“-Approximation) untersucht werden.

Nach Fertigstellung der Arbeit wurden die Messungen von SEAGRAVE und CRANBERG¹² über die n-D-Streuung mit Neutronen einer Energie von 3,27 MeV bekannt. Hiernach sind die Messungen von HAMOUDA u. a. bei kleinen Winkeln nicht richtig. Das neue Ergebnis stimmt nicht mit der Voraussage von CHRISTIAN und GAMMEL, sondern mit den Rechnungen von MASSEY u. a.³ überein.

1. Problemstellung

Das einfallende Neutron werde vor Antimetrierung der Wellenfunktion als Teilchen 1 bezeichnet und das Neutron und das Proton, die zusammen das Deuteron bilden, als Teilchen 2 bzw. 3 (vgl. Abb. 1).

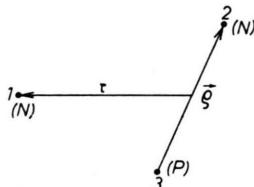


Abb. 1. Teilchennumerierung und Abstandsvektoren.

Die Wellenfunktion des Systems im Orts- und Spinaum genügt der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} (\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3) + V_{12} + V_{13} + V_{23} \right\} \psi(123) = (E_{\text{Lab}} + \epsilon) \psi(123).$$

Dabei bedeutet E_{Lab} die Energie des Neutrons im Laborsystem und ϵ die Bindungsenergie des Deuterons.

Für die Wechselwirkung nehmen wir an¹³

$$V_{ij} = V_{ij}^z + \lambda V_{ij}^{\text{SB}}, \quad (1)$$

wobei

$$V_{ij}^z = (w + m P_{ij}^z + b P_{ij}^\sigma + h P_{ij}^r P_{ij}^\sigma) U^z(r_{ij}), \quad (1 \text{ a})$$

$$\begin{aligned} V_{ij}^{\text{SB}} &= -\frac{1}{2i\beta} [(\boldsymbol{\sigma}_i + \boldsymbol{\sigma}_j) \{ \text{grad}_i U^{\text{SB}}(r_{ij}) \\ &\quad \times (\text{grad}_i - \text{grad}_j) \}] \\ &= \frac{1}{i} J(r_{ij}) [(\boldsymbol{\sigma}_i + \boldsymbol{\sigma}_j) \{ \mathbf{r}_{ij} \times (\text{grad}_i - \text{grad}_j) \}] \quad (1 \text{ b}) \end{aligned}$$

ist. Für die Ortsabhängigkeit $J(r_{ij})$ des Spinbahnpotentials V_{ij}^{SB} werde gesetzt

$$J(r_{ij}) = -\frac{1}{2\beta r_{ij}} \frac{dU^{\text{SB}}(r_{ij})}{dr_{ij}}.$$

Hierbei bedeutet λ einen Normierungsfaktor und $1/\sqrt{\beta}$ die Reichweite der Kernkräfte. Die Größen w, m, b und h kennzeichnen die Stärke der WIGNER-, MAJORANA-, BARTLETT- und HEISENBERG-Wechselwirkung. P_{ij}^z, P_{ij}^σ stellen den Orts- bzw. den Spin-Austauschoperator dar. U^z, U^{SB} beschreiben die Ortsabhängigkeit der Zentral- und der Spin-Bahnwechselwirkung. $\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j$ sind die Spinmatrizen für das i -te bzw. das j -te Teilchen.

Man führt zweckmäßig neue Koordinaten ein vermöge

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3}{2}, \quad \mathfrak{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3}{3}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3. \quad (2 \text{ a})$$

Es gilt dann

$$\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}}{2}, \quad \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3 = \mathbf{r} + \frac{\mathbf{p}}{2}. \quad (2 \text{ b})$$

Mit Hilfe der Beziehung

$$\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 = \frac{3}{2} \Delta_r + 2 \Delta_\theta + \frac{1}{3} \Delta_R \quad (3)$$

erhält man nach Abspaltung der uninteressanten Schwerpunktsbewegung die Ausgangsgleichung

$$\left\{ \frac{3\hbar^2}{4M} \Delta_r + \frac{\hbar^2}{M} \Delta_\theta + E - V_{12} - V_{13} - V_{23} \right\} \cdot \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \sigma) = 0 \quad (4)$$

$$\text{mit } E = E_{\text{Schw}} + \epsilon. \quad (5)$$

Hierbei ist E_{Schw} die Energie des Neutrons im Schwerpunktsystem; das Symbol σ steht für die Spinkoordinaten in der Wellenfunktion.

Da das Deuteron im Grundzustand Spin eins hat, sieht man sofort, daß für das gesamte System im Anfangszustand und, da man hier nur die elastische Streuung betrachtet, auch im Endzustand sechs Spineinstellungen möglich sind. Diese zulässigen Spinfunktionen mögen mit χ_1, \dots, χ_6 bezeichnet werden.

Wir führen den Projektionsoperator

$$\mathcal{Q} = \frac{1}{2} (1 + P_{23}^\sigma) = \frac{1}{4} (3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\sigma}_3) \quad (6)$$

ein, der den Singulett-Zustand des Deuterons annulliert. Offensichtlich gilt

$$\mathcal{Q} \chi_i = \chi_i \quad (i = 1, 2, \dots, 6).$$

Wir führen noch die Wellenvektoren \mathbf{k}, \mathbf{k}' vor bzw. nach der Streuung ein. Es gilt

$$\mathbf{k}^2 = \mathbf{k}'^2 = \frac{4M}{3\hbar^2} E_{\text{Schw}} = \frac{8M}{9\hbar^2} E_{\text{Lab}}. \quad (7)$$

¹² J. D. SEAGRAVE u. L. CRANBERG, Phys. Rev. 105, 1816 [1957]. — R. SCHULTE, Z. Naturforschg. 8a, 759 [1953].

Die „No-Polarisation“-Approximation besteht darin, daß man ansetzt

$$\varphi = (1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma) \psi(\varrho) F(r, \sigma) \quad (8)$$

mit $\Omega F(r, \sigma) = F(r, \sigma)$.

Der Faktor $(1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma)$ sorgt für die durch das

PAULI-Prinzip geforderte Antimetrierung; die Funktion $\psi(\varrho)$ beschreibt den Grundzustand des Deuterons.

Setzt man Gl. (8) in Gl. (4) ein, multipliziert mit $\psi^*(\varrho) \Omega$ von links und integriert über ϱ , so erhält man die folgende Gleichung für $F(r, \sigma)$:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{3 \hbar^2}{4 M} \Delta_r + E \right) F(r, \sigma) \\ &= \int \psi^*(\varrho) \Omega \left[\frac{3 \hbar^2}{4 M} \Delta_r + \frac{\hbar^2}{M} \Delta_\sigma + E \right] P_{12}^r P_{12}^\sigma \psi(\varrho) F(r, \sigma) d\varrho \\ &+ \int \psi^*(\varrho) \Omega \left(-\frac{\hbar^2}{M} \Delta_\sigma \right) \psi(\varrho) F(r, \sigma) d\varrho + \int \psi^*(\varrho) \Omega (V_{12} + V_{13} + V_{23}) (1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma) \psi(\varrho) F(r, \sigma) d\varrho. \end{aligned} \quad (9)$$

In Teil II wird unmittelbar mit dieser Gleichung gearbeitet; es werden dort gekoppelte Gleichungen für die Radialfunktionen hergeleitet.

In Teil I wird die BORNsche Näherung unter Berücksichtigung des PAULI-Prinzips verwendet. Hierzu bringt man Gl. (9) zunächst in die Gestalt

$$\begin{aligned} & \left(\frac{3 \hbar^2}{4 M} \Delta_r + E_{\text{Schw}} \right) \{ F(r, \sigma) - \int \psi^*(\varrho) \Omega P_{12}^r P_{12}^\sigma F(r, \sigma) \psi(\varrho) d\varrho \} \\ &= \int \psi^*(\varrho) \Omega (V_{12} + V_{13}) (1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma) F(r, \sigma) \psi(\varrho) d\varrho; \end{aligned}$$

dabei wurde angenommen, daß $\psi(\varrho)$ die exakte Wellenfunktion des Deuterons darstellt. Auf der rechten Seite wird jetzt $F(r, \sigma)$ durch die nullte

Näherung ersetzt

$$F(r, \sigma) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i k r} \chi_i. \quad (10)$$

Das Integral der linken Seite verschwindet für große r ; in der ersten BORNschen Näherung braucht es daher nicht berücksichtigt zu werden.

TEIL I

2 a. Differentieller Streuquerschnitt

Mit Gl. (10) ist die Amplitude der elastischen Streuung in der BORNschen Näherung gegeben durch

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma}{\sqrt{2}} f | V_{12} + V_{13} | \frac{1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma}{\sqrt{2}} i \right\rangle = \langle f | (V_{12} + V_{13}) (1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma) | i \rangle \\ &= -\frac{M}{3 \pi \hbar^2} \sum_{\text{spin}} \iint e^{-i k' r} \psi^*(\varrho) \chi_i^* (V_{12} + V_{13}) (1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma) e^{i k' r} \psi(\varrho) \chi_i dr d\varrho. \end{aligned} \quad (11)$$

Mittelt man über alle 6 Anfangszustände und summiert über alle Endzustände, so erhält man den differentiellen Streuquerschnitt¹¹ in der Gestalt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{6} \sum_{f, i=1}^6 | \langle f, (V_{12} + V_{13}) (1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma) i \rangle |^2.$$

Mit Hilfe des Projektionsoperators Ω [Gl. (6)] wird die Doppelsumme in einen Spurausdruck umgeformt

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{96} \left(\frac{M}{3 \pi \hbar^2} \right)^2 \text{Spur} [(3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\sigma}_3) \iint e^{-i k' r} \psi^*(\varrho) (V_{12} + V_{13}) (1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma) e^{i k' r} \psi(\varrho) d\varrho dr (3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\sigma}_3) \\ &\quad \cdot \iint e^{-i k' r'} \psi^*(\varrho') (V_{12} + V_{13}) (1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma) e^{i k' r'} \psi(\varrho') dr' d\varrho']. \end{aligned} \quad (12)$$

(Man beachte, daß r' und ϱ' in Teil II andere Größen bedeuten!)

Jetzt sind die Wechselwirkungen explizit einzusetzen. Zunächst bemerkt man, daß

$$P_{12}(\mathbf{r}) = -\frac{\mathbf{r}}{2} + \frac{3}{4}\mathbf{\rho}, \quad P_{12}(\mathbf{\rho}) = \mathbf{r} + \frac{\mathbf{\rho}}{2}, \quad P_{13}(\mathbf{r}) = -\frac{\mathbf{r}}{2} - \frac{3}{4}\mathbf{\rho}, \quad P_{13}(\mathbf{\rho}) = \frac{\mathbf{\rho}}{2} - \mathbf{r} \quad (13)$$

und

$$P_{13}P_{12}(e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho)) = P_{12}(e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho)).$$

Weiter führen wir folgende Abkürzungen ein:

$$\begin{aligned} L_1 &= \iint e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho) U^Z(r_{12}) e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho) d\mathbf{\rho} d\mathbf{r}, \\ L_2 &= \iint e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho) U^Z(r_{12}) P_{12}(e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho)) d\mathbf{\rho} d\mathbf{r}, \\ L_3 &= \iint e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho) U^Z(r_{13}) P_{12}(e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho)) d\mathbf{\rho} d\mathbf{r}, \\ \mathfrak{J}_1 &= \iint e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho) \left[\text{grad}_1 U^{\text{SB}}\left(\left|\mathbf{r} - \frac{\mathbf{\rho}}{2}\right|\right) \times (\text{grad}_1 - \text{grad}_2) \right] e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho) d\mathbf{\rho} d\mathbf{r}, \\ \mathfrak{J}_2 &= \iint e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho) \left[\text{grad}_1 U^{\text{SB}}\left(\left|\mathbf{r} - \frac{\mathbf{\rho}}{2}\right|\right) \times (\text{grad}_1 - \text{grad}_2) \right] P_{12}(e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho)) d\mathbf{\rho} d\mathbf{r}, \\ \mathfrak{Q}_1 &= 2\mathfrak{J}_1 - \mathfrak{J}_2, \quad \mathfrak{Q}_2 = \mathfrak{J}_1 - \mathfrak{J}_2, \quad \mathfrak{Q}_3 = \mathfrak{J}_1. \end{aligned} \quad (14)$$

Bezeichnet man das zweite der in Gl. (12) auftretenden Doppelintegrale mit T , so kann man schreiben

$$T = \sum_{i=1}^3 L_i A_i - \frac{\lambda}{2i\beta} \sum_{i=1}^3 \sigma_i \mathfrak{Q}_i.$$

Hierbei bedeuten

$$\begin{aligned} A_1 &= \xi + \eta \sigma_1 \sigma_2 + \zeta \sigma_1 \sigma_3, \\ A_2 &= \gamma + \delta \sigma_1 \sigma_2 + \varepsilon \sigma_1 \sigma_3, \\ A_3 &= -\{\mu + \mu \sigma_1 \sigma_2 + \nu \sigma_1 \sigma_3 + \nu (\sigma_1 \sigma_3)(\sigma_1 \sigma_2)\} \end{aligned} \quad (15 \text{ a})$$

mit

$$\begin{aligned} \xi &= 2w + b - \frac{m}{2} - h, \quad \gamma = 2m + h - \frac{w}{2} - b, \\ \eta &= \frac{b-m}{2}, \quad \delta = \frac{h-w}{2}, \quad \varepsilon = \frac{h}{2}, \\ \zeta &= \frac{b}{2}, \quad \nu = \frac{b+h}{4}, \quad \mu = \frac{w+m}{2} + \frac{b+h}{4}. \end{aligned} \quad (15 \text{ b})$$

Dabei wurde benutzt, daß gilt

$$\begin{aligned} P_{12}^\sigma &= \frac{1 + \sigma_1 \sigma_2}{2}, \quad (\sigma_1 \sigma_2) P_{12}^\sigma = \frac{3 - \sigma_1 \sigma_2}{2}, \\ (\sigma_1 + \sigma_2) P_{12}^\sigma &= (\sigma_1 + \sigma_2) \end{aligned} \quad (15 \text{ c})$$

und

$$\begin{aligned} \{\text{grad}_1 U^{\text{SB}}(r_{13}) \times (\text{grad}_1 - \text{grad}_3)\} P_{12} \{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\psi(\varrho)\} \\ = \frac{1}{r_{13}} \frac{dU^{\text{SB}}(r_{13})}{dr_{13}} \exp\left\{i\mathbf{k}'\left(\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_3}{2}\right)\right\} \\ \cdot [\mathbf{r}_{13} \times (\text{grad}_1 - \text{grad}_3)] \psi(r_{13}) = 0. \end{aligned}$$

Die letzte Gleichung folgt daraus, daß das Deuteron im Grundzustand Bahndrehimpuls Null hat.

Das erste Doppelintegral in Gl. (12) unterscheidet sich von dem eben betrachteten dadurch, daß \mathbf{k} und \mathbf{k}'

vertauscht sind. Wegen

$$L(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = L(\mathbf{k}', \mathbf{k}), \quad \mathfrak{J}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\mathfrak{J}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$$

erhält man schließlich

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{96} \left(\frac{M}{3\pi\hbar^2} \right)^2 \text{Sp} \left\{ \left[\sum_{i=1}^3 A_i L_i + \frac{\lambda}{2i\beta} \sum_{i=1}^3 \sigma_i \mathfrak{Q}_i \right] \right. \\ &\cdot \left. (3 + \sigma_2 \sigma_3) \left\{ \sum_{j=1}^3 A_j L_j - \frac{\lambda}{2i\beta} \sum_{j=1}^3 \sigma_j \mathfrak{Q}_j \right\} (3 + \sigma_2 \sigma_3) \right\}. \end{aligned} \quad (16)$$

Man erkennt sofort, daß es keine Interferenz zwischen den Beiträgen des Zentralpotentials und der Spin-Bahnwechselwirkung gibt. Dies beruht darauf, daß der Koeffizient von $L_i Q_j^l$, nämlich

$$\frac{\lambda}{2i\beta} [\text{Sp} \{ \sigma_j^l (3 + \sigma_2 \sigma_3) A_i (3 + \sigma_2 \sigma_3) \} - \text{Sp} \{ A_i (3 + \sigma_2 \sigma_3) \sigma_j^l (3 + \sigma_2 \sigma_3) \}]$$

nach Gl. (A 7) * immer verschwindet. Aus den Symmetrieeigenschaften von \mathfrak{J} ist es auch ersichtlich, daß die Spin-Bahn-Kopplung bei Vorwärtsstreuung ($\mathbf{k} = \mathbf{k}'$) keinen Beitrag liefert. Offensichtlich gelten diese beiden Ergebnisse allgemein, d. h. unabhängig von der speziellen Annahme über die Ortsabhängigkeit der Wechselwirkung.

Jetzt sollen die Spurbildungen in Gl. (16) durchgeführt werden. Zunächst bemerken wir, daß der Koeffizient von $Q_1^l Q_j^m$ ($j \neq 1$) nach Gl. (A 6) Null ergibt und der von $Q_i^l Q_j^m$ (s. Anh. 1) einen Faktor δ_{lm} enthält. Mit Hilfe der Tab. 5 (Anh. 1) und unter Beachtung von Gl. (14) erhält man schließlich

* Die mit A bezeichneten Gleichungen befinden sich im Anhang.

das Resultat

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M}{3\pi\hbar^2} \right)^2 \left[\{ \xi^2 + 2(\eta + \zeta)^2 \} L_1^2 + \{ \gamma^2 + 2(\delta + \varepsilon)^2 \} L_2^2 + \frac{3}{4} L_3^2 + 2\{\xi\gamma + 2(\eta + \zeta)(\delta + \varepsilon)\} L_1 L_2 - \{\xi + 2(\eta + \zeta)\} L_1 L_3 - \{\gamma + 2(\delta + \varepsilon)\} L_2 L_3 + \frac{5\lambda^2}{12\beta^2} \mathfrak{D}_1 \mathfrak{D}_1 \right]. \quad (17)$$

Die Spin-Bahnwechselwirkung macht sich in der Streuintensität als quadratisches Korrekturglied $\frac{5\lambda^2}{12\beta^2} \mathfrak{D}_1 \mathfrak{D}_1$ bemerkbar. Obwohl nur in erster Bornscher Näherung gerechnet wird, muß dieses Glied berücksichtigt werden. Da die Konstante λ klein ist, wird man erwarten, daß das Korrekturglied im allgemeinen sehr klein ist.

2 b. Winkelverteilung unter Annahme Gaußscher Ortsabhängigkeit

Nunmehr soll die Größe des Korrekturgliedes in Gl. (17) numerisch untersucht werden. Wir verwenden Potentiale mit Gaußscher Ortsabhängigkeit und setzen¹¹

$$U^Z(r) = U^{SB}(r) = U_0 e^{-\beta r^2}, \quad \psi(\varrho) = A e^{-\alpha \varrho^2} \quad (18)$$

$$\text{mit } U_0 = -45 \text{ MeV}, \quad \beta = 0,266 \cdot 10^{26} \text{ cm}^{-2}, \\ A = 0,312 \cdot 10^{19}, \quad \alpha = 0,0716 \cdot 10^{26} \text{ cm}^{-2}.$$

Wir wählen ferner¹⁴ $\lambda = 0,05$

und verwenden die SERBERSche Mischung mit

$$m = w = 0,4, \quad b = h = 0,1.$$

Die Auswertung der Integrale L, \mathfrak{I} ist in Anh. 2 durchgeführt.

Die entsprechenden Winkelverteilungen für $E_{Lab} = 50$ und 100 MeV findet man in Abb. 2. Es ist ersichtlich, daß die Spin-Bahnkräfte die Winkelverteilung der Neutronen praktisch überhaupt nicht beeinflussen, obwohl beide Beiträge bei manchen Streuwinkeln ($\approx 30^\circ$) vergleichbare Größenordnung besitzen.

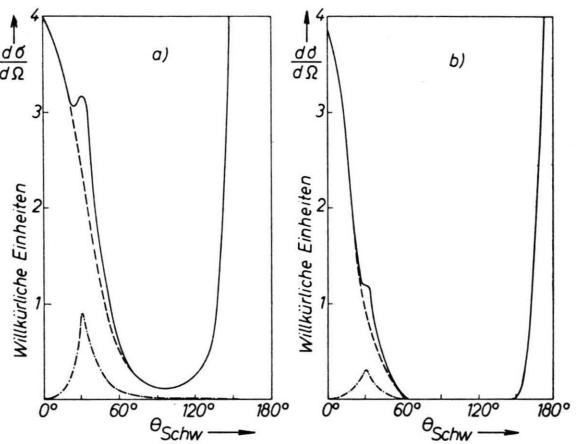


Abb. 2. Winkelverteilung in Bornscher Näherung (—) mit Aufteilung in Beitrag der Zentralkräfte (---) und der Spin-Bahn-Kräfte (- · - · -). $E_{Lab} = 50$ MeV (a) bzw. 100 MeV (b).

3. Polarisation der Neutronen

Die Untersuchung der Polarisation der gestreuten Neutronen bildet den nächsten Schritt, um die Wirkung der Spin-Bahnkräfte auf die Streuung zu finden. Bekanntlich ist die Polarisation gegeben durch¹⁵

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_1 \rangle = \frac{1}{96} \left(\frac{M}{3\pi\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{d\sigma/d\Omega} \text{Sp} \left[\boldsymbol{\sigma}_1 \left\{ \sum_{i=1}^3 A_i L_i + \frac{\lambda}{2i\beta} \sum_{i=1}^3 \boldsymbol{\sigma}_i \mathfrak{D}_i \right\} \cdot (3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\sigma}_3) \left\{ \sum_{j=1}^3 A_j L_j - \frac{\lambda}{2i\beta} \sum_{j=1}^3 \boldsymbol{\sigma}_j \mathfrak{D}_j \right\} (3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\sigma}_3) \right]. \quad (19)$$

Im folgenden wird gezeigt, daß die rechte Seite von Gl. (19) immer verschwindet. Dazu genügt es, eine Komponente des Polarisationsvektors, etwa die x -Komponente, zu betrachten. Man sieht, daß in $\langle \sigma_1^x \rangle$ folgende Ausdrücke auftreten

$$(1) \quad \text{Sp} \{ \sigma_1^x A_i (3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\sigma}_3) A_j (3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\sigma}_3) \} L_i L_j,$$

$$(2) \quad [\text{Sp} \{ \sigma_1^x \sigma_j^L (3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\sigma}_3) A_i (3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\sigma}_3) \} - \text{Sp} \{ \sigma_1^x A_i (3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\sigma}_3) \sigma_j^L (3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\sigma}_3) \}] L_i Q_j^L,$$

¹⁴ S. HOCHBERG, H. S. W. MASSEY, H. ROBERTSON u. L. H. UNDERHILL, Proc. Phys. Soc., Lond. A **68**, 746 [1955].

¹⁵ H. A. BETHE u. P. MORRISON, Elementary Nuclear Theory, John Wiley & Sons, New York 1956. — L. WOLFENSTEIN, Ann. Rev. Nucl. Sci. **1956**.

- $$(3) \quad [\text{Sp} \{ \sigma_1^x \sigma_1^l (3 + \sigma_2 \sigma_3) \sigma_1^m (3 + \sigma_2 \sigma_3) \} + \text{Sp} \{ \sigma_1^x \sigma_1^m (3 + \sigma_2 \sigma_3) \sigma_1^l (3 + \sigma_2 \sigma_3) \}] Q_1^l Q_1^m,$$
- $$(4) \quad \text{Sp} [\sigma_1^x \sigma_i^l (3 + \sigma_2 \sigma_3) \sigma_j^m (3 + \sigma_2 \sigma_3)] Q_i^l Q_j^m \quad (i+1, j+1),$$
- $$(5) \quad \text{Sp} [\sigma_1^x \sigma_1^l \sigma_j^m (12 + 4 \sigma_2 \sigma_3)] Q_1^l Q_j^m \quad (j+1).$$

Wir diskutieren die Beiträge einzeln: (1) Nach (A 7) verschwindet der Koeffizient. — (2) Wenn nun $j \neq 1$ oder $j = 1$ mit $l = x$ ist, dann ergibt der Koeffizient Null nach Gl. (A 1). Im anderen Falle verschwindet jedes Glied des Koeffizienten nach Gl. (A 7) wegen $\sigma^x \sigma^l = i \sigma^r$. — (3) Für $l = m$ ergibt jedes Glied des Koeffizienten Null nach Gl. (A 7) und im anderen Fall verschwindet der Koeffizient wegen der Vertauschungsrelation der Spinmatrizen. — (4), (5) Man sieht leicht, daß der Koeffizient in beiden Fällen verschwindet.

In Bornscher Näherung ergibt sich also keine Polarisierung.

TEIL II

4. Aufstellung der Ausgangsgleichung

In diesem Teil beschäftigen wir uns mit der „No-Polarisation“-Approximation. Wir gehen dabei von Gl. (9) aus. Durch die Abspaltung der Schwerpunktsbewegung und die Annahme, daß das Deuteron im S-Zustand ist, haben wir das Problem von drei Nukleonen formal auf ein Problem mit dem Ortszustand eines einzigen Teilchens und dem Spin des Gesamtsystems reduziert. Der Gesamtdrehimpuls J , der sich aus einem einzelnen Bahndrehimpuls und einem Spindrehimpuls des Gesamtsystems zusammensetzt, und seine z -Komponente M sind gute Quantenzahlen. Wir betrachten daher statt $F(\mathbf{r}, \sigma)$ eine Partialwelle $G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma)$; die entsprechende Gleichung lautet

$$\begin{aligned} & \left(\frac{3 \hbar^2}{4 M} \Delta_r + E_{\text{Schw}} + \varepsilon \right) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) \\ &= \int \psi^*(\varrho) \left(-\frac{\hbar^2}{M} \Delta_\varrho \right) \psi(\varrho) d\varrho G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) \\ &+ \int \psi^*(\varrho) \Omega \left(\frac{3 \hbar^2}{4 M} \Delta_r + \frac{\hbar^2}{M} \Delta_\varrho + E_{\text{Schw}} + \varepsilon \right) \\ & \quad \cdot P_{12}^r P_{12}^\sigma \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) d\varrho \\ &+ \int \psi^*(\varrho) \Omega [(V_{12} + V_{13} + V_{23}) (1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma)] \\ & \quad \cdot \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) d\varrho. \end{aligned} \quad (20)$$

Die Wechselwirkung ist durch Gl. (1) gegeben.

In den Austauschausdrücken dieser Gleichungen verwenden wir \mathbf{r} , $P_{12}(\mathbf{r})$ als die zwei unabhängigen Variablen. Wir führen die folgenden Bezeichnungen ein:

$$\mathbf{r}' = P_{12}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_3}{2}, \quad \varrho' = P_{12}(\varrho) = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3$$

und

$$\begin{aligned} u &= \frac{2}{3} (2 \mathbf{r}' + \mathbf{r}) = \mathbf{r}_{23}, & v &= \frac{2}{3} (\mathbf{r}' + 2 \mathbf{r}) = \mathbf{r}_{13}, \\ t &= \frac{2}{3} (\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \mathbf{r}_{12}. \end{aligned} \quad (21 \text{ b})$$

Wenn ϱ als Integrationsvariable durch \mathbf{r}' ersetzt wird, dann sollen die Variablen u , v , t benutzt werden.

Die Eigenfunktionen $G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma)$ setzen sich aus $l s$ -Wellen $|l s J M\rangle$ folgendermaßen zusammen:

$$G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) = \sum_{ls} \frac{U_{ls}^{JM}(\mathbf{r})}{\mathbf{r}} |l s J M\rangle \quad (22)$$

mit $l = |J-s|, \dots, J+s$.

Für die Radialfunktionen $U_{ls}^{JM}(r)$ ergibt sich Gl. (61), die im folgenden abgeleitet werden soll.

Die Spinwinkelfunktionen sind wie folgt konstruiert

$$|l s J M\rangle = \sum_{m_l m_s} (l s m_l m_s | J M) |l m_l\rangle |s m_s\rangle. \quad (23)$$

Die Transformationsmatrixelemente stellen die CLEBSCH-GORDANSchen Koeffizienten¹⁶ (im folgenden abgekürzt CG-Koeffizienten) dar, $|l m_l\rangle$ die orthonormierten Kugelfunktionen¹⁶ und $|s m_s\rangle$ die sogleich anzugebenden orthonormierten Spinfunktionen. Es sei nämlich

$$\begin{aligned} |s m_s\rangle &= |\frac{1}{2}(2) \frac{1}{2}(3) s_{23} \frac{1}{2}(1) s m_s\rangle \\ &= \sum_{m_1 m_2 m_{23} m_1} (\frac{1}{2} \frac{1}{2} m_2 m_3 | s_{23} m_{23}) \\ & \quad \cdot (s_{23} \frac{1}{2} m_{23} m_1 | s m_s) |\frac{1}{2} m_1 \frac{1}{2} m_2 \frac{1}{2} m_3\rangle \end{aligned}$$

mit $s_{23} = 1$ oder 0. In dem vorliegenden Fall ist aber stets $s_{23} = 1$ (Deuteron im Triplettzustand); wir geben daher s_{23} nicht explizit an

$$|s m_s\rangle = |\frac{1}{2}(2) \frac{1}{2}(3) 1\frac{1}{2}(1) s m_s\rangle; \quad (25)$$

¹⁶ E. U. CONDON u. G. H. SHORTLEY, The Theory of Atomic Spectra, Cambridge University Press 1951.

entsprechend ist $\langle s m_s |$ definiert. Multipliziert man Gl. (20) später von links nur mit diesen Spinfunktionen, so kann formal

$$\Omega = 1 \quad (26)$$

gesetzt werden.

Um die Austauschausdrücke zu behandeln, verwenden wir die Zustandsvektoren $|l_1 l_2 L s J M\rangle$, wobei sich l_1 bzw. l_2 auf \mathbf{r} bzw. \mathbf{r}' beziehen.

Dann hat man

$$|l s J M\rangle = \sqrt{4\pi} |l 0 l s J M\rangle \quad (24 \text{ a})$$

und

$$G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) = \sqrt{4\pi} \sum_{ls} \frac{U_{ls}^{JM}(\mathbf{r}')}{r'} |0 l l s J M\rangle. \quad (24 \text{ b})$$

Wir beschäftigen uns nun mit der Vereinfachung bzw. der Umformung der Ausdrücke in Gl. (20). Offensichtlich gilt zunächst

$$\int \psi^*(\varrho) \left(-\frac{\hbar^2}{M} \Delta_\varrho + U^Z(\varrho) \right) \psi(\varrho) d\varrho = \varepsilon'. \quad (27)$$

Hierbei ist ε' die Variations-Bindungsenergie. Mit

$$\left(\frac{3\hbar^2}{4M} \Delta_r + \frac{\hbar^2}{M} \Delta_\varrho \right) = \left(\frac{3\hbar^2}{4M} \Delta_{r'} + \frac{\hbar^2}{M} \Delta_{\varrho'} \right)$$

[s. Gl. (3)] und $\int \psi^*(\varrho) \psi(\varrho') \Delta_{r'} G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) d\varrho = \left(\frac{4}{3} \right)^3 \int G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) \Delta_{r'} \{ \psi^*(u) \psi(v) \} dr'$

(GREENScher Satz) wird der zweite Ausdruck auf der rechten Seite von Gl. (20)

$$\begin{aligned} \left(\frac{4}{3} \right)^3 \int \left[\frac{4\hbar^2}{3M} \left\{ \psi^*(u) \Delta_v \psi(v) + \psi(v) \Delta_u \psi^*(u) + \frac{u v}{u v} \psi^{**}(u) \psi'(v) \right\} \right. \\ \left. + (E_{\text{Schw}} + \varepsilon) \psi^*(u) \psi(v) \right] P_{12}^\sigma G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) dr'. \end{aligned}$$

Der Strich am ψ bedeutet dabei Differentiation nach dem Argument. Bei der Umformung wurde benutzt

$$\begin{aligned} \Delta_{r'} \{ \psi^*(u) \psi(v) \} &= \left\{ \left(\frac{4}{3} \nabla_u + \frac{2}{3} \nabla_v \right) \cdot \left(\frac{4}{3} \nabla_u + \frac{2}{3} \nabla_v \right) \right\} \{ \psi^*(u) \psi(v) \} \\ &= \frac{4}{9} \left\{ 4 \psi(v) \Delta_u \psi^*(u) + \psi^*(u) \Delta_v \psi(v) + 4 \frac{u v}{u v} \psi^{**}(u) \psi'(v) \right\}. \end{aligned}$$

Ist ψ eine Variationslösung, dann muß man mit diesem Ausdruck arbeiten. Wenn aber ψ eine exakte Lösung darstellt (die man allerdings nur durch numerische Rechnung gewinnen kann), so vereinfacht sich der obige Ausdruck weiter zu

$$\frac{1}{3} \left(\frac{4}{3} \right)^3 \int \left[\psi^*(u) \psi(v) \{ 4(U^Z(u) + U^Z(v)) + 3E_{\text{Schw}} - 5\varepsilon \} + \frac{4\hbar^2}{M} \frac{u v}{u v} \psi^{**}(u) \psi'(v) \right] P_{12}^\sigma G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) dr'. \quad (28)$$

Dieser Ausdruck soll im folgenden verwendet werden.

Jetzt betrachten wir weiter den dritten Teil der rechten Seite von Gl. (20), der die Wechselwirkungen enthält. Zur Vereinfachung der Zentralkraftausdrücke benutzen wir gemäß der Definition [Gl. (25)] der Spinfunktionen

$$P_{23}^\sigma |s m_s\rangle = |s m_s\rangle, \quad P_{13}^\sigma P_{12}^\sigma |s m_s\rangle = P_{12}^\sigma |s m_s\rangle = P_{13}^\sigma |s m_s\rangle = P_{23}^\sigma P_{12}^\sigma |s m_s\rangle;$$

mit der Definition Gl. (2) gilt weiterhin

$$P_{23}^r \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) = \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma), \quad P_{13}^r \psi(\varrho') G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) = \psi(\varrho') G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma).$$

Mittels der Gln. (2), (13) und (21 a) findet man ferner, indem man ϱ durch $-\varrho$ ersetzt, die folgenden Beziehungen

$$\begin{aligned} \int \psi^*(\varrho) U^Z(r_{12}) \psi(\varrho) d\varrho &= \int \psi^*(\varrho) U^Z(r_{13}) \psi(\varrho) d\varrho, \\ \int \psi^*(\varrho) U^Z(r_{12}) P_{12}^r \{ \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) \} d\varrho &= \int \psi^*(\varrho) U^Z(r_{13}) P_{13}^r \{ \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) \} d\varrho, \\ \int \psi^*(\varrho) U^Z(r_{23}) P_{23}^r \{ \psi(\varrho') G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) \} d\varrho &= \int \psi^*(\varrho) U^Z(r_{23}) \{ \psi(\varrho') G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) \} d\varrho. \end{aligned}$$

Damit erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned} &\int \psi^*(\varrho) (V_{12}^Z + V_{13}^Z + V_{23}^Z) (1 - P_{12}^r P_{12}^\sigma) \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) d\varrho \\ &= \int \psi^*(\varrho) [U^Z(r_{23}) + (2 - P_{12}^r P_{12}^\sigma) V_{12}^Z - \{U^Z(r_{13}) + U^Z(r_{23})\} P_{12}^r P_{12}^\sigma] \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) d\varrho \\ &= \int \psi^*(\varrho) [U^Z(r_{23}) + \{(2w-h) + (2b-m) P_{12}^\sigma\} U^Z(r_{12})] \psi(\varrho) d\varrho G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) \\ &\quad + \left(\frac{4}{3} \right)^3 \int \psi^*(u) [\{(2m-b) + (2h-w) P_{12}^\sigma\} U^Z(t) - \{U^Z(u) + U^Z(v)\} P_{12}^\sigma] \psi(v) G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) dr'. \end{aligned} \quad (29)$$

Wir behandeln nun die Spinbahnausdrücke. Offensichtlich gilt

$$V_{23}^{\text{SB}} \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) = V_{13}^{\text{SB}} P_{12}^r \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) = 0. \quad (30)$$

Ferner haben wir

$$\begin{aligned} & \frac{1}{i} \int \psi^*(\varrho) J(r_{12}) (\mathbf{r}_{12} \times \nabla_{12}) \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) d\mathbf{p} \\ &= \frac{1}{i} \int \psi^*(\varrho) J(r_{12}) \left\{ \left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}}{2} \right) \times \left(\frac{3}{2} \nabla_r - \frac{\mathbf{p}}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} \right) \right\} \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) d\mathbf{p} \\ &= \int \psi^*(\varrho) J(r_{12}) \left[\frac{3}{2} \frac{L_r}{\hbar} - \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{p}}{i \varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} - \frac{3}{4i} \mathbf{p} \times \nabla_r \right] \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) d\mathbf{p} \\ &= \frac{1}{i} \int \psi^*(\varrho) J(r_{13}) (\mathbf{r}_{13} \times \nabla_{13}) \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) d\mathbf{p}. \end{aligned} \quad \text{mit } L_r = -i \hbar (\mathbf{r} \times \nabla_r).$$

Wir entwickeln $J(r_{12})$ nach Kugelfunktionen wie folgt

$$J(r_{12}) = \sum_N j_N(r, \varrho) \sum_{m_N} Y_{m_N}^{(N)}(1) Y_{m_N}^{(N)*}(2) = \sum_N j_N(r, \varrho) (Y^{(N)}(1) \cdot Y^{(N)}(2)) = \sum_N \frac{2N+1}{4\pi} j_N(r, \varrho) (C^{(N)}(1) \cdot C^{(N)}(2)) \quad (31)$$

mit

$$j_N(r, \varrho) = 2\pi \int_0^\pi J(r_{12}) P_N(\cos \theta) \sin \theta d\theta.$$

Dabei stellen 1, 2 die Winkelkoordinaten von \mathbf{r} bzw. \mathbf{p} dar.

Mit $\varrho_\mu = \varrho C_\mu^{(1)}(2)$ [vgl. Gl. (43)] und bei Berücksichtigung der Beziehung

$$\int (Y^{(N)}(1) \cdot Y^{(N)}(2)) C_\mu^{(1)}(2) d\Omega_2 = \delta_{N1} C_\mu^{(1)}(1),$$

erhält man leicht

$$\frac{1}{i} \int |\psi(\varrho)|^2 J(r_{12}) \mathbf{p} d\mathbf{p} \times \nabla_r = \frac{L_r}{\hbar r} \int |\psi(\varrho)|^2 j_1(r, \varrho) \varrho^3 d\varrho$$

und

$$\int \psi^*(\varrho) J(r_{12}) \psi(\varrho) \mathbf{p} d\mathbf{p} \times \mathbf{r} = 0.$$

Damit erhalten wir die folgende Beziehung

$$\begin{aligned} & \int \psi^*(\varrho) (V_{12}^{\text{SB}} + V_{13}^{\text{SB}}) \psi(\varrho) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) d\mathbf{p} \\ &= \frac{3}{2} \left[\int |\psi(\varrho)|^2 J(r_{12}) d\mathbf{p} - \frac{1}{2r} \int |\psi(\varrho)|^2 j_1(r, \varrho) \varrho^3 d\varrho \right] \left\{ (2\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \cdot \frac{L_r}{2\hbar} \right\} G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma). \end{aligned} \quad (32)$$

Die Bahnanteile der übrigen Spinbahnausdrücke formen wir folgendermaßen um

$$\frac{\mathbf{r}_{12} \times \nabla_{12}}{i} \{ \psi(\varrho') G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) \} = \left\{ \psi(\varrho') \left(\frac{L_{r'}}{\hbar} - \frac{\mathbf{r} \times \nabla_{r'}}{i} \right) + \frac{4}{3\varrho'} \psi'(\varrho') \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{r}'}{i} \right\} G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma),$$

$$\frac{\mathbf{r}_{23} \times \nabla_{23}}{i} \{ \psi(\varrho') G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) \} = \left\{ \psi(\varrho') \left(\frac{2L_{r'}}{\hbar} + \frac{\mathbf{r} \times \nabla_{r'}}{i} \right) - \frac{4\psi'(\varrho')}{3\varrho'} \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{r}'}{i} \right\} G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma).$$

Vermöge der Gln. (26) bis (30) und Gl. (32) erhält man so aus Gl. (20) die Beziehung

$$\begin{aligned} & (\Delta + K^2) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) = \{ (2w - h) + (2b - m) P_{12}^\sigma \} V_{(1)}(r) G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) \\ &+ \int \left[(2\alpha - b) Z_{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \left\{ Z_{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \left(\frac{E_{\text{Schw}}}{\varepsilon} - \frac{5}{3} \right) Z_{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + (2h - w) Z_{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right\} P_{12}^\sigma \right] \\ & \cdot G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) d\mathbf{r}' + \lambda V_{(2)}(r) \left\{ (2\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \cdot \frac{L_r}{2\hbar} \right\} G^{JM}(\mathbf{r}, \sigma) \\ & - \lambda \int \left[\{ (\sigma_1 + \sigma_2) P_{12}^\sigma \} \cdot \left\{ B_{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left(\frac{L_{r'}}{\hbar} - \frac{\mathbf{r} \times \nabla_{r'}}{i} \right) + B_{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left(\frac{\mathbf{r} \times \mathbf{r}'}{i} \right) \right\} \right. \\ & \left. + \{ (\sigma_2 + \sigma_3) P_{12}^\sigma \} \cdot \left\{ B_{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left(\frac{2L_{r'}}{\hbar} + \frac{\mathbf{r} \times \nabla_{r'}}{i} \right) - B_{(4)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left(\frac{\mathbf{r} \times \mathbf{r}'}{i} \right) \right\} \right] G^{JM}(\mathbf{r}', \sigma) d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (33)$$

aus der die Gleichung für die Radialfunktionen $u_{ls}^{JM}(r)$ [Gl. (61)] hergeleitet werden soll. Die Bedeutung der Abkürzungen in Gl. (33) ist gegeben durch

$$\begin{aligned} V_{(1)}(r) &= \frac{4M}{3\hbar^2} \int |\psi(\varrho)|^2 U^Z(r_{12}) d\varrho, \\ V_{(2)}(r) &= \frac{4M}{\hbar^2} \left[\int |\psi(\varrho)|^2 J(r_{12}) d\varrho - \frac{1}{2r} \int |\psi(\varrho)|^2 j_1(r, \varrho) \varrho^3 d\varrho \right], \\ Z_{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \left(\frac{4}{3}\right)^4 \frac{M}{3\hbar^2} \left[\psi^*(u) \psi(v) (U^Z(u) + U^Z(v)) + \frac{4\hbar^2}{M} \frac{uv}{u+v} \psi''(u) \psi'(v) \right], \\ Z_{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \left(\frac{4}{3}\right)^4 \frac{M\varepsilon}{\hbar^2} \psi^*(u) \psi(v), \quad Z_{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \left(\frac{4}{3}\right)^4 \frac{M}{\hbar^2} \psi^*(u) U^Z(t) \psi(v), \\ B_{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \left(\frac{4}{3}\right)^4 \frac{M}{\hbar^2} \psi^*(u) \psi(v) J(t), \quad B_{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \left(\frac{4}{3}\right)^4 \frac{M}{\hbar^2} \psi^*(u) \psi(v) J(u), \\ B_{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \left(\frac{4}{3}\right)^5 \frac{M}{\hbar^2 v} \psi^*(u) \psi'(v) J(t), \quad B_{(4)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \left(\frac{4}{3}\right)^5 \frac{M}{\hbar^2 v} \psi^*(u) \psi'(v) J(u). \end{aligned} \quad (34)$$

Zur Gewinnung der Gleichung für die Radialfunktionen entwickeln wir die Funktionen $Z_{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, $B_{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ nach Kugelfunktionen [vgl. auch Gl. (32)] und berechnen in den nächsten zwei Abschnitten die vorkommenden Matrixelemente.

5. Matrixelemente für Zentralkräfte

Zuerst befassen wir uns mit dem Spinaustauschoperator. Mit Gl. (25) ergibt sich

$$(s m_s | P_{12}^\sigma | s' m_{s'}) = (\tfrac{1}{2} (2) \tfrac{1}{2} (3) 1 \tfrac{1}{2} (1) s m_s | \tfrac{1}{2} (1) \tfrac{1}{2} (3) 1 \tfrac{1}{2} (2) s' m_{s'}).$$

Wegen der Symmetrieeigenschaften der CG-Koeffizienten^{17, 18} und der Definition¹⁹

$$[(2e+1)(2f+1)]^{1/2} W(a b c d; e f) = ((a b) e d c | a(b d) f c) \quad (35)$$

der Racah-Koeffizienten wird

$$(s m_s | P_{12}^\sigma | s' m_{s'}) = (-)^{s-s'} 3 W(\tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} s \tfrac{1}{2}; 1 1) \delta_{ss'} \delta_{m_s m_{s'}} = (-)^{s-s'} \frac{2s+1}{4} \delta_{ss'} \delta_{m_s m_{s'}}, \quad (36)$$

letzteres nach der Tabelle für die W -Koeffizienten¹⁸. (In diesem Zusammenhang möchten wir erwähnen, daß man ein Resultat von MORZ und SCHWINGER⁴ erhält, wenn man bei der Auswertung dieses Spinmatrixelementes einem Umweg folgt (s. Anh. 3).) Mit Gln. (23) und (36) ergibt sich wegen der Orthogonalität der CG-Koeffizienten das Resultat

$$(l s J M | P_{12}^\sigma | l' s' J M) = (-)^{s-s'} \frac{(2s+1)}{4} \delta_{ss'} \delta_{ll'} \delta_{JJ}. \quad (37a)$$

Analog folgt $4\pi(l 0 l s J M | (Y^{(N)}(1) \cdot Y^{(N)}(2)) | 0 l' l' s' J M) = \delta_{NL} \delta_{ll'} \delta_{ss'}$,
(37b)

$$4\pi(l 0 l s J M | (Y^{(N)}(1) \cdot Y^{(N)}(2)) P_{12}^\sigma | 0 l' l' s' J M) = (-)^{s-s'} \frac{(2s+1)}{4} \delta_{NL} \delta_{ll'} \delta_{ss'}. \quad (37c)$$

6. Matrixelemente für Spin-Bahn-Kräfte

In Unterabschnitt a) wird die Rechenmethode dargestellt und in Unterabschnitt b) die Rechnung durchgeführt. Alles ist viel komplizierter als für Zentralkräfte.

a) Rechenmethode

Operatoren. Bekanntlich^{20, 21} konstruiert man aus zwei irreduziblen Tensoroperatoren $T^{(K_1)}$, $T^{(K_2)}$ einen irreduziblen Tensoroperator vom Grade K [vgl. Gl. (23)] wie folgt *:

$$T_\mu^{(K)} = (T^{(K_1)} \Theta_\mu^{K_2} T^{(K_2)}) = \sum_{\mu_1 \mu_2} (K_1 K_2 \mu_1 \mu_2 | K \mu) T_{\mu_1}^{(K_1)} T_{\mu_2}^{(K_2)}. \quad (38)$$

* Aus technischen Gründen steht hier und im weiteren Θ statt \odot .

¹⁷ G. RACAH, Phys. Rev. **62**, 438 [1942].

¹⁸ L. C. BIEDENHARN, J. M. BLATT u. M. E. ROSE, Rev. Mod. Phys. **24**, 249 [1952].

¹⁹ G. RACAH, Phys. Rev. **63**, 367 [1943].

²⁰ E. WIGNER, Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren, Vieweg u. Sohn, Braunschweig 1931.

²¹ A. R. EDMONDS, Angular Momentum in Quantum Mechanics, Princeton University Press, Princeton 1957.

Auf Grund der Orthogonalität der CG-Koeffizienten gilt umgekehrt

$$T_{\mu_1}^{(K_1)} T_{\mu_2}^{(K_2)} = \sum_{K \mu} (K_1 K_2 \mu_1 \mu_2 | K \mu) T_{\mu}^K. \quad (39)$$

K_1 und K_2 sind ganzzahlig. Wir wollen jetzt die Bahnanteile der in Gl. (33) auftretenden Austausch-Spinbahnoperatoren als Summe von Produkten aus Einteilchen-Tensoroperatoren ausdrücken. Mit Gl. (38) ist das Produkt

$$(C^{(N)}(1) \cdot C^{(N)}(2)) (T^{(K_1)}(1) \Theta_{\mu}^K T^{(K_2)}(2)) = \sum_{\lambda \mu_1 \mu_2} (-)^{\lambda} (K_1 K_2 \mu_1 \mu_2 | K \mu) C_{\lambda}^{(N)}(1) T_{\mu_1}^{(K_1)}(1) C_{-\lambda}^{(N)}(2) T_{\mu_2}^{(K_2)}(2). \quad (40)$$

Gemäß Gl. (39) schreiben wir

$$C_{\lambda}^{(N)}(1) T_{\mu_1}^{(K_1)}(1) = \sum_{t_1 \tau_1} (N K_1 \lambda \mu_1 | t_1 \tau_1) R_{\tau_1}^{(t_1)}(1) = \sum_{t_1 \tau_1} (-)^{N-\lambda} \left(\frac{2 t_1 + 1}{2 K_1 + 1} \right)^{1/2} (t_1 N \tau_1 - \lambda | K_1 \mu_1) R_{\tau_1}^{(t_1)}(1) \quad (41 \text{ a})$$

und $C_{-\lambda}^{(N)}(2) T_{\mu_2}^{(K_2)}(2) = \sum_{t_2 \tau_2} (N K_2 - \lambda \mu_2 | t_2 \tau_2) S_{\tau_2}^{(t_2)}(2) \quad (41 \text{ b})$

mit $R^{(t_1)} = (C^{(N)} \Theta^{t_1} T^{(K_1)})$, $S^{(t_2)} = (C^{(N)} \Theta^{t_2} T^{(K_2)})$. $\quad (41 \text{ c})$

Setzen wir nun Gl. (41) in Gl. (40) ein und summieren in bekannter Weise¹⁸ über die magnetischen Quantenzahlen, so erhalten wir gemäß Gl. (38)

$$\begin{aligned} (C^{(N)}(1) \cdot C^{(N)}(2)) (T^{(K_1)}(1) \Theta_{\mu}^K T^{(K_2)}(2)) \\ = \sum_{t_1 t_2} (-)^N [(2 t_1 + 1) (2 t_2 + 1)]^{1/2} W(t_1 N K K_2; K_1 t_2) (R^{(t_1)}(1) \Theta_{\mu}^K S^{(t_2)}(2)) \end{aligned} \quad (42)$$

Mit der Beziehung

$$A_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{A_x \pm i A_y}{\sqrt{2}}, \quad A_0^{(1)} = A_z \quad (43)$$

zwischen den kartesischen und den sphärischen Komponenten ($A_{\mu}^{(1)}$ mit $\mu = \pm 1, 0$) eines Vektors $A^{(1)}$ gewinnt man durch einfache Rechnung die Aussage

$$(A^{(1)} \times B^{(1)})_{\mu} = -\sqrt{2} i (A^{(1)} \Theta_{\mu}^1 B^{(1)}).$$

Hieraus folgt u. a. einerseits

$$\mathbf{r} \times \mathbf{r}' = -\sqrt{2} i \mathbf{r} \mathbf{r}' (C^{(1)}(1) \Theta^1 C^{(1)}(2))$$

und ferner mit

$$\nabla = (\mathbf{e}_r \cdot \nabla) \mathbf{e}_r - \mathbf{e}_r \times (\mathbf{e}_r \times \nabla) = C^{(1)} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{C^{(1)} \times L^{(1)}}{i \hbar r}$$

(\mathbf{e}_r bezeichnet den radialen Einheitsvektor)

die Beziehung $\mathbf{r} \times \nabla r' = -\sqrt{2} i (C^{(1)}(1) \Theta^1 C^{(1)}(2)) r \frac{\partial}{\partial r'} + \frac{2 i r}{\hbar r'} (C^{(1)}(1) \Theta^1 (C^{(1)}(2) \Theta^1 L^{(1)}(2)))$.

Wir erhalten nunmehr aus Gl. (42)

$$\begin{aligned} (C^{(N)}(1) \cdot C^{(N)}(2)) L^{(1)}(2) &= (C^{(N)}(1) \cdot C^{(N)}(2)) (C^{(0)}(1) \Theta^1 L^{(1)}(2)) \\ &= \sum_{t_2} (-)^{1+t_2} \left(\frac{2 t_2 + 1}{3} \right)^{1/2} (C^{(N)}(1) \Theta^1 Q^{(t_2)}(2)) \end{aligned} \quad (44 \text{ a})$$

mit

$$Q^{(t_2)} = (C^{(N)} \Theta^{t_2} L^{(1)}).$$

Ferner ergibt sich $(C^{(N)}(1) \cdot C^{(N)}(2)) (\mathbf{r} \times \mathbf{r}') = \sqrt{2} i \mathbf{r} \mathbf{r}' \sum_{t_1 t_2} (-)^{1+N} [(2 t_1 + 1) (2 t_2 + 1)]^{1/2} (N 1 0 0 | t_1 0) \cdot (N 1 0 0 | t_2 0) W(t_1 N 1 1; 1 t_2) (C^{(t_1)}(1) \Theta^1 C^{(t_2)}(2))$ $\quad (44 \text{ b})$

und $(C^{(N)}(1) \cdot C^{(N)}(2)) (\mathbf{r} \times \nabla r') = \sqrt{2} i \mathbf{r} \sum_{t_1 t_2} (-)^N [(2 t_1 + 1) (2 t_2 + 1)]^{1/2} (N 1 0 0 | t_1 0) \times W(t_1 N 1 1; 1 t_2) \left[\frac{\sqrt{2}}{\hbar r'} (C^{(t_1)}(1) \Theta^1 P^{(t_2)}(2)) - (N 1 0 0 | t_2 0) (C^{(t_1)}(1) \Theta^1 C^{(t_2)}(2)) \frac{\partial}{\partial r'} \right] \quad (44 \text{ c})$

mit

$$P^{(t_2)} = (C^{(N)} \Theta^{t_2} (C^{(1)} \Theta^1 L^{(1)})).$$

Dabei haben wir benutzt

$$W(a b c d; 0 f) = (-)^{b+c-f} \frac{\delta_{ba} \delta_{cd}}{[(2b+1)(2c+1)]^{1/2}} \quad (45)$$

und

$$(C^{(N)} \Theta^{t_1} C^{(K_1)}) = (N K_1 0 0 | t_1 0) C^{(t_1)}.$$

Matrixelemente. Nach dem ECKART-WIGNERSCHEN Satz^{20, 21} schreiben wir

$$(j m | T_\mu^{(K)} | j' m') = (j' K m' \mu | j m) (j m | T^{(K)} | j' m'). \quad (46)$$

Der von Projektionsquantenzahlen unabhängige Faktor heißt das reduzierte Matrixelement*. Es gilt umgekehrt

$$(j | T^{(K)} | j') = \sum_{m' \mu} (j' K m' \mu | j m) (j m | T_\mu^{(K)} | j' m'). \quad (47)$$

Wir berechnen zunächst das reduzierte Matrixelement eines Tensorprodukts von zwei in demselben Raum wirkenden Operatoren. Aus den Gln. (47) und (38) ergibt sich

$$\begin{aligned} & (j | (T^{(K_1)}(1) \Theta^K T^{(K_2)}(1)) | j') \\ &= \sum_{m' \mu_1 \mu_2 \mu} (j' K m' \mu | j m) (K_1 K_2 \mu_1 \mu_2 | K \mu) (j m | T_{\mu_1}^{(K_1)}(1) \sum_{j'' m''} | j'' m'' \rangle \langle j'' m'' | T_{\mu_2}^{(K_2)}(1) | j' m' \rangle). \end{aligned}$$

Daraus erhalten wir mit Gl. (46) und bei Durchführung der Summation über die magnetischen Quantenzahlen¹⁸ für das reduzierte Matrixelement die Beziehung

$$\begin{aligned} & (j | (T^{(K_1)}(1) \Theta^K T^{(K_2)}(1)) | j') \\ &= (-)^{K_1 + K_2 - K} \sum_{j''} [(2K+1)(2j''+1)]^{1/2} W(K_1 K_2 j j'; K j'') (j | T^{(K_1)}(1) | j'') (j'' | T^{(K_2)}(1) | j'). \end{aligned} \quad (48)$$

Jetzt wollen wir das reduzierte Matrixelement eines Tensorproduktes von zwei in verschiedenen Räumen wirkenden Operatoren berechnen. Unter Verwendung der Gln. (47), (23), (38) und (46) erhält man

$$\begin{aligned} & (j_1 j_2 J | (T^{(K_1)}(1) \Theta^K T^{(K_2)}(2)) | j'_1 j'_2 J') \sum_{m'_1 m'_2 \mu_1 \mu_2} \sum_{m_1 m_2 M' \mu} (j'_1 j'_2 m'_1 m'_2 | J' M') (K_1 K_2 \mu_1 \mu_2 | K \mu) (j_1 j_2 m_1 m_2 | J M) \\ & \times (j'_1 K_1 m'_1 \mu_1 | j_1 m_1) (j'_2 K_2 m'_2 \mu_2 | j_2 m_2) (J' K M' \mu | J M) (j_1 | T^{(K_1)}(1) | j'_1) (j_2 | T^{(K_2)}(2) | j'_2). \end{aligned}$$

Zur Durchführung dieser Summation verwendet man zweckmäßig die X-Koeffizienten von FANO (auch bezeichnet mit 9 j-Koeffizienten)²¹

$$\begin{aligned} & [(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)]^{1/2} X(J_1 J_2 J_{12}; J_3 J_4 J_{34}; J_{13} J_{24} J) \\ &= ((J_1 J_2) J_{12} (J_3 J_4) J_{34} J | (J_1 J_3) J_{13} (J_2 J_4) J_{24} J) \\ &= \sum_{M_1 M_2 M_3 M_4} \sum_{M_{12} M_{34} M_{13} M_{24}} (J_1 J_2 M_1 M_2 | J_{12} M_{12}) (J_3 J_4 M_3 M_4 | J_{34} M_{34}) (J_{13} J_{24} M_{13} M_{24} | J M) \\ & \quad \times (J_1 J_3 M_1 M_3 | J_{13} M_{13}) (J_2 J_4 M_2 M_4 | J_{24} M_{24}) (J_{12} J_{34} M_{12} M_{34} | J M). \end{aligned} \quad (49)$$

Es gelten die Symmetrieeigenschaften

$$\begin{aligned} X(J_1 J_2 J_{12}; J_3 J_4 J_{34}; J_{13} J_{24} J) &= (-)^\sigma X(J_1 J_{12} J_2; J_3 J_{34} J_4; J_{13} J J_{24}) \\ X(J_{12} J_1 J_2; J_{34} J_3 J_4; J J_{13} J_{24}) &= (-)^\sigma X(J_3 J_4 J_{34}; J_1 J_2 J_{12}; J_{13} J_{24} J) \quad \text{usw.} \\ (\sigma = J_1 + J_2 + J_3 + J_4 + J_{12} + J_{34} + J_{13} + J_{24} + J). \end{aligned} \quad (50)$$

Somit erhalten wir das allgemeine Resultat

$$\begin{aligned} (j_1 j_2 J | (T^{(K_1)}(1) \Theta^K T^{(K_2)}(2)) | j'_1 j'_2 J') &= [(2j_1+1)(2j_2+1)(2j'+1)(2K+1)]^{1/2} \\ & \quad \cdot X(j_1 j_2 J; j'_1 j'_2 J'; K_1 K_2 K) (j_1 | T^{(K_1)}(1) | j'_1) (j_2 | T^{(K_2)}(2) | j'_2). \end{aligned} \quad (51)$$

Wir betrachten nun zwei Sonderfälle dieser Gleichung. (a) $K=0$: Mittels Gl. (38) und bei Beachtung von

$$(K_1 K_2 \mu_1 \mu_2 | 0 0) = \delta_{K_1 K_2} \delta_{\mu_1, -\mu_2} (-)^{K_1 - \mu_1} \frac{1}{(2K_1 + 1)^{1/2}}$$

* Man beachte, daß sich diese Definition der reduzierten Matrixelemente von der RACAHschen Definition unterscheidet.

erhält man

$$(T^{(K_1)}(1) \cdot \Theta_0^0 T^{(K_2)}(2)) = \frac{(-)^{K_1}}{(2 K_1 + 1)^{1/2}} \delta_{K_1 K_2} (T^{(K_1)}(1) \cdot T^{(K_2)}(2)).$$

Ferner gilt nach Gl. (49)

$$X(J_1 J_2 J_{12}; J_3 J_4 J_{12}; J_{13} J_{13} 0) = \frac{(-)^{J_{12}+J_{13}-J_1-J_4}}{[(2 J_{12}+1)(2 J_{13}+1)]^{1/2}} W(J_1 J_2 J_3 J_4; J_{12} J_{13}). \quad (52)$$

Somit erhalten wir aus Gl. (51) für das Matrixelement des Skalarprodukts

$$\begin{aligned} (j_1 j_2 J M | (T^{(N)}(1) \cdot T^{(N)}(2)) | j'_1 j'_2 J' M') &= \delta_{JJ'} \delta_{MM'} (j_1 j_2 J | (T^{(N)}(1) \cdot T^{(N)}(2)) | j'_1 j'_2 J') \\ &= \delta_{JJ'} \delta_{MM'} (-)^N [(2 j_1+1)(2 j_2+1)]^{1/2} W(J j_2 j'_1 N; j_1 j'_2) (j_1 | T^{(N)}(1) | j'_1) (j_2 | T^{(N)}(2) | j'_2). \end{aligned} \quad (53)$$

(b) $K_2=0$ bzw. $K_1=0$; Unter Beachtung der Gln. (50) und (52) gewinnen wir aus Gl. (51) für das reduzierte Matrixelement eines nur auf den ersten Teil des Systems wirkenden Operators

$$(j_1 j_2 J | T^{(K_1)}(1) | j'_1 j'_2 J') = \delta_{j_1 j'_1} [(2 j_1+1)(2 J'+1)]^{1/2} W(j_2 J' j_1 K_1; j'_1 J') (j_1 | T^{(K_1)}(1) | j'_1) \quad (54 \text{ a})$$

und damit auch

$$(j_1 j_2 J | T^{(K_2)}(2) | j'_1 j'_2 J') = \delta_{j_2 j'_2} [(2 j_2+1)(2 J'+1)]^{1/2} W(j_1 j'_2 J K_2; J' j_2) (j_2 | T^{(K_2)}(2) | j'_2). \quad (54 \text{ b})$$

b) Eigentliche Rechnungen

Mit Hilfe des im vorigen Unterabschnitt dargestellten Formalismus können wir jetzt die benötigten Spin-Bahn-Matrixelemente auswerten. Wir rechnen zunächst die betreffenden reduzierten Bahn- und Spinmatrixelemente aus; dann können wir mittels Gl. (53) die vorkommenden Spin-Bahn-Matrixelemente berechnen. Wir erhalten z. B. nach Gl. (53) für das direkte Matrixelement

$$\left(l s J M \left| \left\{ (\sigma_1 + \sigma_2) \cdot \frac{L_r}{\hbar} \right\} \right| l' s' J' M \right) = (-) \delta_{ll'} [l(l+1)(2l+1)(2s+1)]^{1/2} W(J s l 1; l s') (s | \sigma_1 + \sigma_2 | s'). \quad (55)$$

$$\text{Dabei haben wir verwendet } (j | J | j') = \frac{(j m | J_0 | j' m')}{(j' 1 m 0 | j m)} = \delta_{jj'} \hbar \sqrt{j(j+1)}. \quad (56)$$

Wir müssen Gl. (51) noch in anderer Weise spezialisieren. Gemäß Gln. (50), (52) und (45) folgt

$$X(l 0 l; 0 l' l'; K_1 K_2 1) = \frac{1}{(2l+1)(2l'+1)} \delta_{K_1 l} \delta_{K_2 l'}.$$

Damit erhält man aus Gl. (51)

$$(l 0 l | (T^{(K_1)}(1) \cdot \Theta^1 T^{(K_2)}(2)) | 0 l' l') = \delta_{K_1 l} \delta_{K_2 l'} \left[\frac{3}{(2l+1)(2l'+1)} \right]^{1/2} (l | T^{(l)}(1) | 0) (0 | T^{(l')} (2) | l').$$

$$\text{Aus } (l_1 m_1 | Y_{m_N}^{(N)}(1) | l'_1 m'_1) = \left[\frac{(2N+1)(2l'_1+1)}{4\pi(2l_1+1)} \right]^{1/2} (l'_1 N m'_1 m_N | l_1 m_1) (l'_1 N 0 0 | l_1 0)$$

$$\text{findet man weiter } (l_1 | C^{(N)}(1) | l'_1) = \left(\frac{2l'_1+1}{2l_1+1} \right)^{1/2} (l'_1 N 0 0 | l_1 0).$$

Insgesamt erhalten wir also unter Benutzung von Gl. (44) und durch Anwendung bzw. wiederholte Anwendung von Gl. (48) die Beziehungen

$$(2N+1) (l 0 l | (C^{(N)}(1) \cdot C^{(N)}(2)) L^{(1)}(2) | 0 l' l') = \delta_{Nl} \delta_{ll'} \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad (57 \text{ a})$$

$$(2N+1) \left(l 0 l \left| (C^{(N)}(1) \cdot C^{(N)}(2)) \left(\frac{\mathbf{r} \times \mathbf{r}'}{i} \right) \right| 0 l' l' \right) = \frac{\sqrt{l(l+1)}}{2l+1} r r' \delta_{ll'} [-\delta_{N,l+1} + \delta_{N,l-1}] \quad (57 \text{ b})$$

und

$$\begin{aligned} (2N+1) \left(l 0 l \left| (C^{(N)}(1) \cdot C^{(N)}(2)) \left(\frac{\mathbf{r} \times \nabla_{r'}}{i} \right) \right| 0 l' l' \right) \\ = \frac{\sqrt{l(l+1)}}{2l+1} \frac{r}{r'} \delta_{ll'} \left[l \delta_{N,l+1} + (l+1) \delta_{N,l-1} - r' (\delta_{N,l+1} - \delta_{N,l-1}) \frac{\partial}{\partial r'} \right]. \end{aligned} \quad (57 \text{ c})$$

Zur Gewinnung der Gln. (57 b) und (57 c) haben wir die folgenden Tatsachen benutzt:

- a) $(a 1 0 0 | b 0) \neq 0$ nur für $|b-a|=1$,
- b) $W(l l' 1 1; 1 N) \neq 0$ nur für $|l'-l|=0$ oder 1,

$$\text{c)} \quad (l+1\ 1\ 0\ 0 | l\ 0) = - \left(\frac{l+1}{2l+3} \right)^{1/2}, \quad (l-1\ 1\ 0\ 0 | l\ 0) = \left(\frac{l}{2l-1} \right)^{1/2},$$

$$W(l\ l\ 1\ 1; 1\ N) = (-)^{l-N} \frac{[(l-N)(l+N+1)+2]}{2[6l(l+1)(2l+1)]^{1/2}}.$$

Reduzierte Spinmatrixelemente

Aus Gl. (56) (mit σ statt J) erhält man für das reduzierte Einteilchen-Spinmatrixelement

$$(\frac{1}{2} || \sigma || \frac{1}{2}) = \frac{2}{\hbar} \frac{\sqrt{3}}{2} = \sqrt{3}$$

und damit durch Anwendung von Gl. (54)

$$(\frac{1}{2} (2) \frac{1}{2} (3) s_{23} || \sigma_2 || \frac{1}{2} (2) \frac{1}{2} (3) s'_{23}) = (-)^{s_{23}-s'_{23}} (\frac{1}{2} (2) \frac{1}{2} (3) s_{23} || \sigma_3 || \frac{1}{2} (2) \frac{1}{2} (3) s'_{23})$$

$$= [6(2s'_{23}+1)]^{1/2} W(\frac{1}{2} s'_{23} \frac{1}{2} 1; \frac{1}{2} s_{23}). \quad (58)$$

Unter Benutzung der Gln. (25), (54) und (58) erhalten wir sofort

$$(s || \sigma_1 || s') = [6(2s'+1)]^{1/2} W(1 \frac{1}{2} s 1; \frac{1}{2} s'), \quad (59 \text{ a})$$

$$(s || \sigma_2 || s') = (s || \sigma_3 || s') = (-)^{s-s'} [6(2s'+1)]^{1/2} W(1 s' 1 s; \frac{1}{2} 1). \quad (59 \text{ b})$$

Zur Berechnung der reduzierten Austausch-Spinmatrixelemente entwickeln wir $P_{12} | s' \rangle$ mit Hilfe von Gl. (35) wie folgt:

$$P_{12} | \frac{1}{2} (2) \frac{1}{2} (3) 1 \frac{1}{2} (1) s' \rangle = (-)^{\frac{3}{2}-s'} \sum_{s'_{23}} [3(2s'_{23}+1)]^{1/2} W(\frac{1}{2} \frac{1}{2} s' \frac{1}{2}; s'_{23} 1) | \frac{1}{2} (2) \frac{1}{2} (3) s'_{23} \frac{1}{2} (1) s' \rangle.$$

Somit ergibt sich wie in Gl. (59)

$$(s || \sigma_1 P_{12} || s') = 3[6(2s'+1)]^{1/2} W(1 s \frac{1}{2} 1; \frac{1}{2} s') W(\frac{1}{2} 1 1 \frac{1}{2}; \frac{1}{2} s'), \quad (60 \text{ a})$$

$$(s || \sigma_2 P_{12} || s') = (-)^{\frac{3}{2}-s'} 3[6(2s'+1)]^{1/2} \sum_{s'_{23}} (2s'_{23}+1) W(\frac{1}{2} \frac{1}{2} s' \frac{1}{2}; s'_{23} 1)$$

$$\times W(\frac{1}{2} s' 1 1; s'_{23} s) W(\frac{1}{2} s'_{23} \frac{1}{2} 1; \frac{1}{2} 1)$$

$$= 3[6(2s'+1)]^{1/2} W(\frac{1}{2} 1 1 \frac{1}{2}; \frac{1}{2} s) W(1 \frac{1}{2} s 1; \frac{1}{2} s'), \quad (60 \text{ b})$$

$$(s || \sigma_3 P_{12} || s') = (-)^{\frac{3}{2}-s'} 3[6(2s'+1)]^{1/2} \sum_{s'_{23}} (2s'_{23}+1) W(\frac{1}{2} \frac{1}{2} s' \frac{1}{2}; s'_{23} 1) W(\frac{1}{2} s' 1 1; s'_{23} s) W(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1 1; s'_{23} \frac{1}{2})$$

$$= (-)^{\frac{3}{2}-s'} 3[6(2s'+1)]^{1/2} X(1 \frac{1}{2} \frac{1}{2}; \frac{1}{2} 1 \frac{1}{2}; s' s 1). \quad (60 \text{ c})$$

In den letzten beiden Gleichungen haben wir die Symmetrieeigenschaften der W -Koeffizienten, und die Formel¹⁸

$$\sum_{\lambda} (2\lambda+1) W(a \lambda \alpha c; a \bar{c}) W(b \lambda \beta \bar{c}; b c) W(a \lambda \gamma b; a \bar{b}) = W(a \alpha b \beta; c \gamma) W(\bar{a} \alpha \bar{b} \beta; \bar{c} \gamma)$$

bzw. die zu Gl. (49) äquivalente Beziehung²²

$$X(J_1 J_2 J_{12}; J_3 J_4 J_{34}; J_{13} J_{24} J) = (-)^{\sigma} \sum_{\lambda} (2\lambda+1) W(J_2 J_3 J_{12} J_{13}; \lambda J_1) W(J_2 J_3 J_{24} J_{34}; \lambda J_4) W(J_{12} J_{13} J_{34} J_{24}; \lambda J)$$

verwendet.

7. Herleitung der gekoppelten Gleichungen

Mit den in den Abschnitten 5 und 6 gewonnenen Ergebnissen sind wir nun in der Lage, die Gleichung für die Radialfunktion abzuleiten. Durch Einsetzung der Gln. (22) und (24 b) in Gl. (33), unter Beachtung von

$$\mathcal{A}\left(\frac{U_{ls}^{JM}(r)}{r} | ls JM \rangle\right) = \frac{1}{r} \left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} U_{ls}^{JM}(r) | ls JM \rangle$$

²² A. SIMON u. T. A. WELTON, Phys. Rev. **90**, 1044 [1953].

und durch skalare Produktbildung mit $\langle l s J M |$ ergibt sich unter Benutzung der Gl. (31), (37), (53), (55) und (57) die gekoppelte Gleichung

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{d^2}{dr^2} + K^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} U_{ls}^{JM}(r) &= [(2w-h) + (2b-m) M_{(1)ss}] V_{(1)}(r) U_{ls}^{JM}(r) \\ &+ \int [(2m-b) K_{(1)}^l(r, r') + M_{(1)ss} K_{(2)}^l(r, r')] U_{ls}^{JM}(r') dr' \\ &- \lambda \left[\frac{l(l+1)(2s+1)}{(2l+1)} \right]^{1/2} \sum_{s'} W(J s l 1, l s') \left[M_{(2)ss'}(2l+1) V_{(2)}(r) U_{ls}^{JM}(r) \right. \\ &\left. - \int \left\{ M_{(2)ss'} K_{(3)}^{l,l\pm 1} \left(r, r', \frac{d}{dr'} \right) + M_{(3)ss'} K_{(4)}^{l,l\pm 1} \left(r, r', \frac{d}{dr'} \right) \right\} U_{ls'}^{JM}(r') dr' \right]. \end{aligned} \quad (61)$$

Dabei sind $M_{(1)ss} = (P_{12})_{ss} = (-)^{s+1/2} \frac{(2s+1)}{4}$,

$$M_{(2)ss'} = (s \| (\sigma_1 + \sigma_2) \| s') = (s \| (\sigma_1 + \sigma_2) P_{12} \| s') \quad [\text{s. Gl. (15 c)}],$$

$$M_{(3)ss'} = (s \| (\sigma_2 + \sigma_3) P_{12} \| s'), \quad K_{(1)}^l(r, r') = rr' z_{(3)l}(r, r'),$$

$$K_{(2)}^l(r, r') = rr' \left\{ z_{(1)l}(r, r') + \left(\frac{E_{\text{Schw}}}{\varepsilon} - \frac{5}{3} \right) z_{(2)l}(r, r') + (2h-w) z_{(3)l}(r, r') \right\}$$

$$\begin{aligned} K_{(3)}^{l,l\pm 1}(r, r', \frac{d}{dr'}) &= r^2 \left[\frac{(2l+1)}{r} r' b_{(1)l}(r, r') - \{(l+1) b_{(1)l+1}(r, r') + l b_{(1)l-1}(r, r')\} \right. \\ &\left. - r'^2 \{b_{(3)l+1}(r, r') - b_{(3)l-1}(r, r')\} + r' \{b_{(1)l+1}(r, r') - b_{(1)l-1}(r, r')\} \frac{d}{dr'} \right], \end{aligned} \quad (62)$$

$$\begin{aligned} K_{(4)}^{l,l\pm 1}(r, r', \frac{d}{dr'}) &= r^2 \left[\frac{2(2l+1)}{r} r' b_{(2)l}(r, r') + (l+1) b_{(2)l+1}(r, r') \right. \\ &\left. + l b_{(2)l-1}(r, r') + r'^2 \{b_{(4)l+1}(r, r') - b_{(4)l-1}(r, r')\} - r' \{b_{(2)l+1}(r, r') - b_{(2)l-1}(r, r')\} \frac{d}{dr'} \right], \end{aligned}$$

$$\text{mit } z_{(i)l}(r, r') = 2\pi \int_0^\pi Z_{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') P_l(\cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta, \quad b_{(i)N}(r, r') = 2\pi \int_0^\pi B_{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') P_N(\cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta.$$

Die numerischen Werte der reduzierten Spinmatrizen sind in Anh. 4 angegeben.

Man sieht aus Gl. (61), daß die Bahnanteile der direkten Spin-Bahnkräfte durch das über die Wellenfunktion des Deuterons gemittelte Potential $V/l(l+1) V_2(r)$ wirken und daß die Wirkung der Bahnanteile der Austausch-Spin-Bahnkräfte wesentlich verschieden von der der übrigen Kräfte ist. Naturgemäß bleibt die S-Welle ungekoppelt.

Die Spin – Bahnkopplung stellt nun eine kleine Korrektur dar; man kann also unter Festlegung von Randbedingungen das gekoppelte Gleichungssystem störungstheoretisch lösen und die Nichtdiagonalelemente der S-Matrix gewinnen. Die Bestimmung des differentiellen Wirkungsquerschnittes²³ und der Polarisation²⁴ aus der S-Matrix ist im Prinzip wohl bekannt.

Damit ist das Problem bis auf die Bestimmung der Zentralkraft-Wellenfunktionen behandelt. Letzteres würde jedoch umfangreiche numerische Rechnungen erfordern, von denen wir hier absehen wollen.

Herrn Professor HEISENBERG danke ich vielmals für die freundliche Aufnahme in seinem Institut, seine Anregungen zu dieser Arbeit sowie für zahlreiche fördernde Unterhaltungen. Weiter danke ich Herrn Dr. LÜDERS recht herzlich für viele klärende Diskussionen und wertvolle Hinweise und Herrn Dr. BRENIG für seine hilfreichen Vorschläge. Mein bester Dank gebührt außerdem der ALEXANDER-VON-HUMBOLDT-Stiftung für die Gewährung eines zweijährigen Stipendiums und der Universität Göttingen bzw. dem Max-Planck-Institut für Physik für finanzielle Unterstützung.

²³ J. M. BLATT u. L. C. BIEDENHARN, Phys. Rev. **86**, 399 [1952].
— K. A. BRUECKNER, Phys. Rev. **96**, 508 [1954].

²⁴ R. DALITZ, Proc. Phys. Soc., Lond. A **65**, 175 [1952]. — R. OEHME, Phys. Rev. **98**, 147, 216 [1955].

Anhang 1. Spurberechnungen

In σ_i^l kennzeichnet der untere Index die Teilchennummer und der obere die Komponente des Spins. Man fängt an mit den bekannten Gleichungen

$$\text{Sp}(AB) = \text{Sp}(BA), \quad (\text{A } 1)$$

$$\text{Sp}(\sigma_i^l) = 0, \quad (\text{A } 2)$$

$$\sigma_i^l \sigma_i^m = \delta_{lm} + i \varepsilon_{lmp} \sigma_i^p. \quad (\text{A } 3)$$

Dabei ist ε_{lmp} der antimetrische Tensor dritter Stufe mit $\varepsilon_{xyz} = +1$. Es gelten die Beziehungen

$$\begin{aligned} \varepsilon_{lmp} \varepsilon_{lnc} &= \delta_{mn} \delta_{pc} - \delta_{mc} \delta_{pn}, \\ \varepsilon_{lmp} \varepsilon_{lmc} &= 2 \delta_{pc}, \\ \varepsilon_{lmb} \varepsilon_{lmb} &= 6, \\ \varepsilon_{mnc} \varepsilon_{lcp} \varepsilon_{lnr} &= -\varepsilon_{mpr}. \end{aligned} \quad (\text{A } 4)$$

Die folgenden Tabellen enthalten eine Reihe von Ergebnissen:

$(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\sigma_2 \cdot \sigma_3) = (\sigma_1 \cdot \sigma_3) + i \sigma_2 \cdot (\sigma_1 \times \sigma_3)$
$(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\sigma_1 \cdot \sigma_2) = 3 - 2(\sigma_1 \cdot \sigma_2)$
$(\sigma_2 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\sigma_2 \cdot \sigma_3) = -(\sigma_1 \cdot \sigma_2) + 2(\sigma_1 \cdot \sigma_3)$
$(\sigma_1 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\sigma_2 \cdot \sigma_3) = 3 - 2(\sigma_1 \cdot \sigma_3) - 2(\sigma_2 \cdot \sigma_3)$
$+ 2(\sigma_1 \cdot \sigma_2) + i \varepsilon_{pqr} \sigma_1^p \sigma_2^q \sigma_3^r$

Tab. 1.

$\text{Sp}(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\sigma_1 \cdot \sigma_2) = 24,$
$\text{Sp}(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\sigma_1 \cdot \sigma_3)(\sigma_2 \cdot \sigma_3) = 24$
$\text{Sp}(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\sigma_1 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\sigma_1 \cdot \sigma_3) = -24$
$\text{Sp}(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\sigma_2 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_3)(\sigma_2 \cdot \sigma_3) = 48$
$\text{Sp}(\sigma_2 \cdot \sigma_3)(\sigma_2 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_2) = -48$
$\text{Sp}(\sigma_2 \cdot \sigma_3)(\sigma_2 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_3) = 72$
$\text{Sp}(\sigma_2 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\sigma_2 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_2) = 0$
$\text{Sp}(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\sigma_2 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\sigma_2 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_3) = 8 \times 39.$

Tab. 2.

$\text{Sp}(\sigma_2^l \sigma_2 \cdot \sigma_3 \sigma_2^m \sigma_2 \cdot \sigma_3) = 16 \delta_{lm}$
$\text{Sp}(\sigma_2^l \sigma_2 \cdot \sigma_3 \sigma_2^m \sigma_2 \cdot \sigma_3) = -8 \delta_{lm}.$

Tab. 3.

Um die Spurberechnungen im Produktraum durchzuführen, benutzt man die Gleichung

$$\text{Sp}(O_{123}) = \text{Sp}(O_1) \text{Sp}(O_2) \text{Sp}(O_3), \quad (\text{A } 5)$$

wobei O_{123} ein Produktoperator im 1-2-3-Raum ist. In

dem Produktraum gilt

$$\begin{aligned} \text{Sp}(1) &= 8, \\ \text{Sp}(PO_{123}) &= \text{Sp}(O_{123}). \end{aligned}$$

Wenn irgendein σ_i in O_{123} lediglich einmal vorkommt, dann ist offensichtlich

$$\text{Sp}(O_{123}) = 0. \quad (\text{A } 6)$$

Es lässt sich auch leicht zeigen, daß

$$\text{Sp}(\sigma_i \Pi) = 0, \quad (\text{A } 7)$$

wobei Π ein Produkt von Skalarprodukten darstellt.

Mit Hilfe der Gl. (A 2) bis (A 4) leitet man zunächst die benötigten Spurformeln im Spinraum eines einzelnen Teilchens als (Tab. 4) und die Reduktionsformeln (Tab. 1) ab. Unter Verwendung von Tab. 4 gemeinsam mit Gl. (A 5) bzw. von Tab. 1 mit Gl. (A 6) erhält man weiter die Spurformeln im Produktraum (Tab. 2, 3).

$\text{Sp}(\sigma_i^l \sigma_i^m) = 2 \delta_{lm}$
$\text{Sp}(\sigma_i^l \sigma_i^m \sigma_i^n) = 2 i \varepsilon_{lmn}$
$\text{Sp}(\sigma_i^l \sigma_i^m \sigma_i^n \sigma_i^o) = 2(\delta_{lm} \delta_{no} - \delta_{ln} \delta_{mo} + \delta_{lo} \delta_{mn})$

Tab. 4.

Mit Hilfe der Tab. 1 bis 3 kann man jetzt alle benötigten Spurausdrücke berechnen. Es ist jedoch günstig, zuerst einige typische Ausdrücke zu betrachten. Schreibt man S für $(3 + \sigma_2 \cdot \sigma_3)$, R für $A + B \sigma_1 \cdot \sigma_2 + C \sigma_1 \cdot \sigma_3 + D \sigma_1 \cdot \sigma_3 \sigma_1 \cdot \sigma_2$, so erhält man mit Hilfe der Tab. 2

$$\begin{aligned} \text{Sp}[SR] &= 96(A+D), \\ \text{Sp}[(\sigma_1 \cdot \sigma_2) SR] &= 96 \times 2(B+C), \\ \text{Sp}[(\sigma_1 \cdot \sigma_3) SR] &= 96 \times 2(B+C), \\ \text{Sp}[(\sigma_1 \cdot \sigma_3)(\sigma_1 \cdot \sigma_2) SR] &= 96(A+D). \end{aligned}$$

Somit erhält man schließlich die ersten zwei Ergebnisse in Tab. 5. Mit Hilfe der Tab. 3 gewinnt man die übrigen Ergebnisse in Tab. 5.

Alle Spurausdrücke in der Streuintensitätsformel (16) lassen sich mit Hilfe der Tab. 5 berechnen.

$\begin{aligned} \text{Sp}[(a+b \sigma_1 \cdot \sigma_2 + c \sigma_1 \cdot \sigma_3)(3+\sigma_2 \cdot \sigma_3)(d+e \sigma_1 \cdot \sigma_2 \\ + f \sigma_1 \cdot \sigma_3 + g \sigma_1 \cdot \sigma_3 \sigma_1 \cdot \sigma_2)(3+\sigma_2 \cdot \sigma_3)] \\ = 96[a(d+g) + 2(e+f)(b+c)] \end{aligned}$
$\begin{aligned} \text{Sp}[(\mu + \mu \sigma_1 \cdot \sigma_2 + \nu \sigma_1 \cdot \sigma_3 + \nu \sigma_1 \cdot \sigma_3 \sigma_1 \cdot \sigma_2)(3+\sigma_2 \cdot \sigma_3) \\ \times (\mu + \mu \sigma_1 \cdot \sigma_2 + \nu \sigma_1 \cdot \sigma_3 + \nu \sigma_1 \cdot \sigma_3 \sigma_1 \cdot \sigma_2)(3+\sigma_2 \cdot \sigma_3)] \\ = 96[\mu(\mu+\nu) + 2(\mu+\nu)^2 + \nu(\mu+\nu)] \\ = 72 \text{ nach (15 b)} \end{aligned}$
$\begin{aligned} \text{Sp}[\sigma_1^l \sigma_1^m (3+\sigma_2 \cdot \sigma_3)^2] &= 96 \delta_{lm} \\ \text{Sp}[\sigma_2^l (3+\sigma_2 \cdot \sigma_3) \sigma_2^m (3+\sigma_2 \cdot \sigma_3)] \\ &= \text{Sp}[\sigma_2^l (3+\sigma_2 \cdot \sigma_3) \sigma_3^m (3+\sigma_2 \cdot \sigma_3)] = 64 \delta_{lm}. \end{aligned}$

Tab. 5.

Anhang 2. Berechnung der Doppelintegrale

Führt man die FOURIER-Transformation gemäß $A(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} A_f(\mathbf{k}) d\mathbf{k}$

ein und benutzt

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k},$$

so erhält man [s. Gl. (14)]

$$\begin{aligned} L_1 &= \frac{1}{(2\pi)^3} U_f^Z(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|) \int \psi_f\left(\left|\frac{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}{2} - \mathbf{q}_3\right|\right) \psi_f(q_3) dq_3, \\ L_2 &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \psi_f\left(\left|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{k}'}{2} + \mathbf{q}_2\right|\right) \psi_f\left(\left|\mathbf{k}' + \frac{\mathbf{k}}{2} + \mathbf{q}_2\right|\right) U_f^Z(q_2) dq_2, \\ L_3 &= \frac{1}{(2\pi)^3} \psi_f\left(\left|\mathbf{k}' + \frac{\mathbf{k}}{2}\right|\right) \int \psi_f\left(\left|\mathbf{k} + \mathbf{q}_2 + \frac{\mathbf{k}'}{2}\right|\right) U_f^Z(q_2) dq_2. \end{aligned}$$

Beachtet man weiter, daß

$$\begin{aligned} \text{grad}_1 U_{f\text{SB}}\left(\left|\mathbf{r} - \frac{\boldsymbol{\rho}}{2}\right|\right) &= \frac{-i}{(2\pi)^3} \int \mathbf{q}_3 U_{f\text{SB}}(q_3) \exp\{-i\mathbf{q}_3 \cdot (\mathbf{r} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\rho})\} dq_3, \\ \text{grad}_1 [\exp\{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}\} \psi(\varrho)] &= \frac{i\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \int \exp\{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}\} \psi_f(q_2) \exp\{-i\mathbf{q}_2 \cdot \boldsymbol{\rho}\} dq_2, \\ \text{grad}_2 [\exp\{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}\} \psi(\varrho)] &= \frac{-i}{(2\pi)^3} \int \left(\mathbf{q}_2 + \frac{\mathbf{k}'}{2}\right) \exp\{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}\} \psi_f(q_2) \exp\{-i\mathbf{q}_2 \cdot \boldsymbol{\rho}\} dq_2 \end{aligned}$$

und

$$\left[(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \times \left\{ \int \mathbf{q}_2 \psi_f(q_2) \psi_f\left(\left|\mathbf{q}_2 - \frac{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}{2}\right|\right) dq_2 \right\} \right] = 0,$$

dann ergibt sich $I_1 = \frac{3}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} U_f^{\text{SB}}(|\mathbf{k}'-\mathbf{k}|) [\mathbf{k}' \times \mathbf{k}] \int \psi_f(q_2) \psi_f\left(\left|\mathbf{q}_2 - \frac{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}{2}\right|\right) dq_2.$

Analog erhält man $I_2 = \frac{(\mathbf{k}'-\mathbf{k})}{(2\pi)^3} \times \left\{ \int \psi_f\left(\left|\mathbf{k}' + \frac{\mathbf{k}}{2} + \mathbf{q}_3\right|\right) \psi_f\left(\left|\mathbf{k}' + \frac{\mathbf{k}}{2} + \mathbf{q}_3\right|\right) U_f^{\text{SB}}(q_3) q_3 dq_3 \right\}.$

Bei GAUSScher Ortsabhängigkeit der Wechselwirkung (18) hat man

$$U_f(q_3) = U_0 \left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{3/2} \exp\{-q_3^2/4\beta\}, \quad \psi_f(q_1) = A \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2} \exp\{-q_1^2/4\alpha\}.$$

Damit folgt nach einfacher Rechnung

$$\begin{aligned} L_1 &= \frac{\pi^3 A^2 U_0}{(2\alpha\beta)^{3/2}} \exp\left[-\frac{k^2(1-\cos\vartheta)}{2} \left(\frac{1}{\beta} + \frac{1}{8\alpha}\right)\right], \\ L_2 &= \frac{\pi^3 A^2 U_0}{[\alpha(\alpha+2\beta)]^{3/2}} \exp\left[-\frac{k^2}{16} \left\{\frac{(1-\cos\vartheta)}{\alpha} + \frac{9(1+\cos\vartheta)}{(\alpha+2\beta)}\right\}\right], \\ L_3 &= \frac{\pi^3 A^2 U_0}{[\alpha(\alpha+\beta)]^{3/2}} \exp\left[-\frac{k^2(5+4\cos\vartheta)}{16} \left\{\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha+\beta}\right\}\right], \\ I_1 &= \frac{3}{2} L_1 [\mathbf{k}' \times \mathbf{k}], \quad I_2 = \frac{3\beta}{(\alpha+2\beta)} L_2 [\mathbf{k}' \times \mathbf{k}']. \end{aligned}$$

Anhang 3.

Matrixelement des Permutationsoperators

Man entwickelt $|s' m_{s'}\rangle$ nach den in P_{12} diagonalen Eigenfunktionen wie folgt:

$$|\frac{1}{2}(2)\frac{1}{2}(3)1\frac{1}{2}(1)s'm_{s'}\rangle = (-)^{s_{12}-s'} \sum_{s'_{12}} [3(2s'_{12}+1)]^{1/2} W(\frac{1}{2}\frac{1}{2}s'\frac{1}{2}; s'_{12}1) |\frac{1}{2}(1)\frac{1}{2}(2)s'_{12}\frac{1}{2}(3)s'm_{s'}\rangle.$$

Mit der entsprechenden Entwicklung für $\langle s m_s |$ und bei Berücksichtigung von

$$P_{12} \left| \frac{1}{2} (1) \frac{1}{2} (2) s' \frac{1}{2} (3) s' m_{s'} \right\rangle = (-)^{1-s'_1} \left| \frac{1}{2} (1) \frac{1}{2} (2) s' \frac{1}{2} (3) s' m_{s'} \right\rangle,$$

$$W\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} s \frac{1}{2}; 0 1\right) = (-)^{s-1/2} W\left(\frac{1}{2} 0 1 \frac{1}{2}; \frac{1}{2} s\right) = \frac{1}{4} \left[\frac{(5+2s)(3-2s)}{3} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad W\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} s \frac{1}{2}, 1 1\right) = \frac{2s+1}{12},$$

erhält man sofort das Resultat von MORZ und SCHWINGER²⁵ $\langle s m_s | P_{12}^\sigma | s' m_{s'} \rangle = \frac{1}{2} [s(s+1) - \frac{5}{4}] \delta_{ss'} \delta_{m_s m_{s'}}.$

Anhang 4. Die reduzierten Spinmatrizen

Mit Hilfe der Tabellen für die W - und X -Koeffizienten²⁵ erhalten wir aus den Gln. (59) und (60) die Tab. 6.

$(s (\sigma_1 + \sigma_2) s')$			$(s (\sigma_2 + \sigma_3) P_{12} s')$		
$s \backslash s'$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$s \backslash s'$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$
$\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\frac{1}{2}$	$-2\sqrt{\frac{1}{3}}$	$-2\sqrt{\frac{2}{3}}$
$\frac{3}{2}$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$	$2\sqrt{\frac{5}{3}}$	$\frac{3}{2}$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$	$2\sqrt{\frac{5}{3}}$

Tab. 6.

²⁵ MATSUNOBU, HIROYUKI u. TAKEBE HISAO, Prog. Theor. Phys. 14, 589 [1955].

Messung des differentiellen Streuquerschnittes und der mittleren Energieänderung bei der Streuung langsamer Neutronen an Wasser und Eis

Von CHRISTIAN REINSCH und TASSO SPRINGER

Aus dem Laboratorium für Technische Physik der Technischen Hochschule München
(Z. Naturforsch. 16 a, 112—116 [1961]; eingegangen am 6. Oktober 1960)

Es wurden Neutronen mit Energien von 0,039 und 0,078 eV an dünnen Schichten von Wasser und Eis verschiedener Temperaturen gestreut. Die Winkelverteilung der Streunewtronen wurde durch einen Li⁶J-Szintillationszähler mit einer Nachweisempfindlichkeit von nahezu 100% bestimmt und hieraus der differentielle Streuquerschnitt $\sigma(\vartheta)$ berechnet. Es ergab sich nur ein geringer Unterschied zwischen Wasser und Eis; er röhrt hauptsächlich vom Beitrag der kohärenten Streuung im Eis her, welcher im Wasser verschwindet. Ferner wurde aus Transmissionversuchen mit Silberfolien die Änderung der mittleren Neutronenenergie bestimmt. Ein Vergleich mit der Theorie von NELKIN kann später durchgeführt werden.

Die hinsichtlich der Energie E' nach der Streuung und des Streuwinkels ϑ differentiellen Wirkungsquerschnitte $\sigma(E, E', \vartheta, T)$ von Wasser werden als Funktion der Energie E vor der Streuung und der Probentemperatur T in vielfältiger Weise zur Lösung von Moderations- und Transportproblemen in der Reaktortheorie benötigt. Die Daten für Eis besitzen neuerdings Bedeutung für die Dimensionierung von Anordnungen, mit denen man Neutronen

auf sehr tiefe Temperaturen „herunterkühlen“ kann¹; man hofft damit hohe subthermische Intensitäten für die Neutronenspektroskopie zu erzielen.

Der erfolgreichste Versuch einer Berechnung der zweifach differentiellen Wirkungsquerschnitte stammt

¹ C. N. KELBER, ORNL-2739 [1958]; L. B. BORST, Sympos. on Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids, Vienna, October 1960, Rpt. IS/A/30.