

# Symmetrieangepaßte Funktionen für ein System aus drei Teilchen verschiedener Masse

Von P. KRAMER

Physikalisches Institut der Universität Marburg (Lahn)  
(Z. Naturforsch. 18 a, 260—261 [1963]; eingegangen am 17. Januar 1963)

Die Beschreibung eines Systems aus drei Teilchen verschiedener Masse führt auf das Problem, das Verhalten der Eigenfunktionen des HAMILTON-Operators

$$H = \frac{1}{2\mu} ((\pi^1)^2 + (\pi^2)^2); \quad \pi_j^\alpha = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \xi_j^\alpha}, \quad j=1, 2, 3; \quad \alpha=1, 2 \quad (1)$$

bei „kinematischen Drehungen“<sup>1</sup> (k. D.)

$$\begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix} = \mathcal{R}_{\beta''} \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

zu untersuchen. Die einfachsten Eigenfunktionen zu  $H = \hbar^2 k^2/2\mu$ ,  $L^2$ ,  $L_z$ , zum Quadrat des verallgemeinerten Drehimpulses<sup>1</sup>  $\Lambda^2$  und zu den Betragsquadraten der Drehimpulse  $\mathbf{l}_1 = \boldsymbol{\xi}^1 \times \boldsymbol{\pi}^1$ ,  $\mathbf{l}_2 = \boldsymbol{\xi}^2 \times \boldsymbol{\pi}^2$  sind<sup>1</sup>

$$\psi_{\lambda LM l_1 l_2} = R_\lambda(k, \varrho) X_{\lambda l_1 l_2}(\chi) \sum_{m_1 m_2} (l_1 l_2 m_1 m_2 | LM) Y_{l_1 m_1}(\boldsymbol{\xi}^1) Y_{l_2 m_2}(\boldsymbol{\xi}^2), \quad (3)$$

wobei  $|\boldsymbol{\xi}^1| = \varrho \cos \chi$ ,  $|\boldsymbol{\xi}^2| = \varrho \sin \chi$  und der Eigenwert des verallgemeinerten Drehimpulses  $\Lambda^2 = \hbar^2 \lambda(\lambda+4)$  ist ( $\lambda - l_1 - l_2 = 2n \geq 0$ ).

Durch Ausführung von k. D. erhält man Aussagen über alle auftretenden Relativdrehimpulse, über die Energiespektren aller Teilchen oder über die Symmetrieeigenschaften der Funktionen bei zwei oder drei gleichen Teilchen. Da die Funktionen (3) kein einfaches Verhalten bei k. D. haben, empfiehlt es sich, an Stelle der Relativdrehimpulse  $\mathbf{l}_1$ ,  $\mathbf{l}_2$  andere Tensoroperatoren einzuführen, die aus den sphärischen Tensorkomponenten<sup>2</sup>  $\xi_{\mu}^\alpha$  und  $\pi_{\mu}^\alpha$  aufgebaut sind. Setzt man für  $K=0, 2$

$$\Sigma_q^{(K)}(1100 | K 0) = \sum_{\mu_1 \mu_2} (11 \mu_1 \mu_2 | K 0) (\xi_{\mu_1}^1 \pi_{\mu_2}^2 - \xi_{\mu_1}^2 \pi_{\mu_2}^1), \quad (4)$$

so ist  $\Sigma^{(0)}$  der Operator der infinitesimalen k. D. und ist mit  $\Lambda^2$ ,  $L^2$ ,  $L_z$  und  $\Sigma^{(2)}$  vertauschbar. Zwischen den Tensorprodukten besteht die Relation

$$\Lambda^2 = \frac{1}{3} \sum_{\mu} (-1)^{\mu} \Sigma_{\mu}^{(2)} \Sigma_{-\mu}^{(2)} - \frac{1}{3} \Sigma^{(0)} \Sigma^{(0)} + L^2. \quad (5)$$

Als einfachster weiterer Operator neben  $\Lambda^2$ ,  $L^2$ ,  $L_z$  und  $\Sigma^{(0)}$  kommt daher

$$\Omega = \sum_{\mu} (-1)^{\mu} \Sigma_{\mu}^{(2)} L_{-\mu}^{(2)} \quad (6)$$

in Frage, wobei  $L_{\mu}^{(2)}(1100 | 20) = \sum_{\mu_1 \mu_2} (11 \mu_1 \mu_2 | 2\mu) L_{\mu_1}^{(1)} L_{\mu_2}^{(1)}$  und  $L_{\pm 1}^{(1)} = \mp (1/\sqrt{2}) (L_x \pm i L_y)$ ,  $L_0^{(1)} = L_z$  gesetzt ist.

Die reduzierten Matrixelemente<sup>2</sup> von  $\Sigma^{(K)}$  in dem Funktionensystem (3) ergeben sich aus den Matrixelementen von  $\xi^\alpha$  und  $\pi^\alpha$  zu

$$(\lambda' L' l_1' l_2' | \Sigma^{(K)} | \lambda L l_1 l_2) \cdot (1100 | K 0) \frac{1}{\sqrt{2K+1}} = \sqrt{(2L+1)(2L'+1)} \begin{Bmatrix} l_1' & l_1 & 1 \\ l_2' & l_2 & 1 \\ L' & L & K \end{Bmatrix} \cdot \{\lambda' l_1' l_2' | \Sigma | \lambda l_1 l_2\}. \quad (7)$$

Durch Anwendung der Faktorisierungsmethode<sup>3</sup> auf die Funktionen  $X_{\lambda l_1 l_2}(\chi)$  ergibt sich

$$\begin{aligned} \{\lambda' l_1' l_2' | \Sigma | \lambda l_1 l_2\} = \\ \begin{aligned} l_1' = l_1 - 1, \quad l_2' = l_2 + 1: & \quad -\frac{\hbar}{i} [l_1(l_2+1)(\lambda+1+l_1-l_2)(\lambda+3-l_1+l_2)]^{1/2} \delta_{\lambda'\lambda} \\ l_1' = l_1 + 1, \quad l_2' = l_2 - 1: & \quad \frac{\hbar}{i} [(l_1+1)l_2(\lambda+3+l_1-l_2)(\lambda+1-l_1+l_2)]^{1/2} \delta_{\lambda'\lambda} \\ l_1' = l_1 - 1, \quad l_2' = l_2 - 1: & \quad \frac{\hbar}{i} [l_1 \cdot l_2 \cdot (\lambda+2+l_1+l_2)(\lambda+2-l_1-l_2)]^{1/2} \delta_{\lambda'\lambda} \\ l_1' = l_1 + 1, \quad l_2' = l_2 + 1: & \quad -\frac{\hbar}{i} [(l_1+1)(l_2+1)(\lambda+4+l_1+l_2)(\lambda-l_1-l_2)]^{1/2} \delta_{\lambda'\lambda} \end{aligned} \end{aligned}$$

<sup>1</sup> F. T. SMITH, Phys. Rev. **120**, 1058 [1960].

<sup>2</sup> A. R. EDMONDS, Angular Momentum in Quantum Mechanics, Princeton University Press, Princeton 1957.

<sup>3</sup> L. INFELD u. T. E. HULL, Rev. Mod. Phys. **23**, 21 [1951].



Die einfachsten Eigenfunktionen  $\psi_{\lambda LM \sigma \Omega}$  von  $\Sigma^{(0)} = \hbar \sigma$  sind

$\lambda$	$L$	$\sigma$	$\psi_{\sigma} = \sum_{l_1 l_2} a_{l_1 l_2}^{\sigma} \cdot \psi_{l_1 l_2}$
0	0	0	$\psi_{00}$
1	1	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{01} \mp i \psi_{10})$
2	0	$\pm 2$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{00} \pm i \psi_{11})$
	1	0	$\psi_{11}$
	2	0	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{02} + \psi_{20})$
		$\pm 2$	$\frac{1}{2} (\psi_{02} - \psi_{20}) \mp i \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{11}$
3	1	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{6}} (\psi_{01} - \sqrt{2} \psi_{21}) \pm i \frac{1}{\sqrt{6}} (\psi_{10} + \sqrt{2} \psi_{12})$
		$\pm 3$	$\frac{1}{\sqrt{6}} (\sqrt{2} \psi_{01} + \psi_{21}) \mp i \frac{1}{\sqrt{6}} (\sqrt{2} \psi_{10} - \psi_{12})$
	2	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{21} \pm i \psi_{12})$
	3	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{8}} (\sqrt{3} \psi_{03} + \psi_{21}) \mp i \frac{1}{\sqrt{8}} (\sqrt{3} \psi_{30} + \psi_{12})$
		$\pm 3$	$\frac{1}{\sqrt{8}} (\psi_{03} - \sqrt{3} \psi_{21}) \pm i \frac{1}{\sqrt{8}} (\psi_{30} - \sqrt{3} \psi_{12})$

Wegen  $\Sigma^{(0)} \psi_{\sigma} = \hbar \sigma \psi_{\sigma}$  transformieren sich die neuen Funktionen bei k. D. gemäß

$$\psi_{\lambda LM \sigma \Omega}'' = \exp \{ \beta'' (i/\hbar) \Sigma^{(0)} \} \psi_{\lambda LM \sigma \Omega} = \exp \{ i \sigma \beta'' \} \psi_{\lambda LM \sigma \Omega}. \quad (8)$$

Haben die drei Teilchen gleiche Masse, so wird für eine zyklische Teilchenvertauschung<sup>1</sup>  $\beta'' = 2\pi/3$ . Alle Funktionen mit  $\sigma = 3\nu$ ,  $\nu = 0, 1, 2, \dots$  bleiben daher ungeändert. Nimmt man die ungeraden Permutationen  $\eta^1 = -\xi^1$ ,  $\eta^2 = \xi^2$  hinzu, so sind die symmetrischen Eigenfunktionen für  $\nu \neq 0$

$$\psi_{\lambda LM|\sigma|\Omega}^S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\lambda LM \sigma \Omega} + \psi_{\lambda LM -\sigma \Omega}) \quad (9a)$$

und die antisymmetrischen Funktionen

$$\psi_{\lambda LM|\sigma|\Omega}^A = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\lambda LM \sigma \Omega} - \psi_{\lambda LM -\sigma \Omega}). \quad (9b)$$

Die neu eingeführten Funktionen haben den Vorteil, daß sie nur die physikalisch sinnvollen Erhaltungsgrößen des Systems ohne die Auszeichnung eines Teilchens enthalten. Die zugehörige Energie-Winkelkorrelation läßt sich in einem verallgemeinerten DALITZ-Diagramm<sup>4</sup> veranschaulichen.

Herrn Doz. Dr. D. KAMKE danke ich für anregende Diskussionen zu dieser Arbeit.

<sup>4</sup> D. DEHNHARD, D. KAMKE u. P. KRAMER, Physics Letters **3**, 52 [1962].

## Mehrfachkontraste an Versetzungen in Glimmer

Von J. DEMNY

Physikalisches Laboratorium Mosbach<sup>1</sup>

(Z. Naturforsch. **18 a**, 261–262 [1963]; eingegangen am 18. Januar 1963)

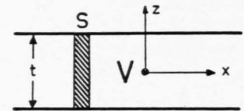
Die Anwendung der kinematischen Theorie der Elektronenbeugung auf die Kontrasterscheinungen an Versetzungen wurde von HIRSCH, HOWIE und WHELAN<sup>2</sup> gegeben. Man zerlegt dabei die Kristallfolie in „Säulen“ S (Abb. 1) von atomarem Durchmesser und der Höhe  $t$  ( $t$ : Foliendicke) und addiert die von den einzelnen Säulenelementen (Elementarzellen) reflektierten Elektronenwellen unter Berücksichtigung ihrer gegenseitigen Phasenverschiebung. Die Welle, die die Säule an der Unterseite der ungestörten Kristallfolie verläßt, hat dort – bis auf einen Faktor – die Amplitude

$$A \sim \sum_j \exp[2\pi i(g + s) \delta_j]. \quad (1)$$

Die Gittervektoren  $\delta_j$  geben die Lage der einzelnen Elementarzellen in der Säule an.  $g$  ist der reziproke Gittervektor des zugehörigen BRAGG-Reflexes und  $s$  ein

kleiner Vektor parallel zur Foliennormale, der die Abweichung des reziproken Gitterpunktes von der EWALD-Kugel angibt.

Abb. 1. Schnitt durch einen dünnen Kristall mit Versetzungslinie V.



Da  $g \delta_j$  ganzzahlig ist, wird aus (1)

$$A \sim \sum_j \exp(2\pi i s z_j). \quad (2)$$

Die Amplitude (2) kann graphisch durch das Amplituden-Phasen-Diagramm ermittelt werden. Es stellt in der kinematischen Theorie für einen ungestörten Kristall einen Kreis vom Radius  $r = s^{-1}$  dar.

Verläuft nun eine Versetzung V parallel zur Oberfläche durch den Kristall (Abb. 1), so werden die Elementarzellen der Säule um einen Vektor  $R(z)$  ein wenig verschoben. Für eine reine Schraubenversetzung gilt dann nach<sup>2</sup>

$$A \sim \sum \exp(in \arctg z/x) \exp(2\pi i s z). \quad (3)$$

<sup>1</sup> Angeschlossen der Arbeitsgemeinschaft Industrieller Forschungsvereinigungen (V. 87/63).

<sup>2</sup> P. B. HIRSCH, A. HOWIE u. M. J. WHELAN, Phil. Trans. Roy. Soc. **252**, 499 [1960].