

Über kooperatives Verhalten äußerer Nukleonen im Oszillator-Modell mit Quadrupolwechselwirkung*

Von SIEGFRIED SEYFFERTH

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität Göttingen
(Z. Naturforsch. **18 a**, 1049—1058 [1963]; eingegangen am 14. August 1963)

The question is discussed whether the ELLIOTT model nucleus can be interpreted as a rotating one. The classical interpretation of the quadrupole interaction explains the prolate deformation of the nucleus and yields a pure rotation of the classical system of orbits. The quantum mechanical treatment shows that the states of the ELLIOTT model which are analogous to the rotating states of the rotational model are rotating states, too. This involves the existence of a (positive) intrinsic quadrupole moment.

1. Einleitung und Übersicht

ELLIOTT hat eine Variante des Kernschalenmodells vorgeschlagen, nach welcher die Nukleonen sich in einem gemeinsamen, harmonischen und isotropen Oszillator-Potential bewegen und die äußeren unter ihnen der sog. Quadrupolwechselwirkung unterliegen¹⁻⁴. Diese besondere Kopplung bewirkt, daß das Niveauschema in Folgen von Termen aufspaltet, die Rotationsbanden ähnlich sind. Außerdem sind die zu einer Bande gehörenden Matrixelemente des Quadrupolmoments in einer ähnlichen Weise miteinander verknüpft wie im Rotationsmodell des Kerns^{2, 5}.

Diese Aussagen über Energiespektrum und Quadrupolmomente sind zunächst die einzigen Gründe, die das Modell rechtfertigen. Es ist das Ziel der vorliegenden Arbeit, es damit nicht bewenden zu lassen, sondern eine Antwort auf die Frage zu versuchen, ob das Modell einen rotierenden Kern beschreibe.

Nach der Formulierung des ELLIOTTschen Modells in Abschnitt 2 folgt in Abschnitt 3 eine Erörterung des klassisch aufgefaßten Modells. Es zeigt sich, daß zigarrenförmige Deformationen des Gebildes aller Teilchenbahnen energetisch begünstigt sind. Ferner rotiert das klassische Bahngebilde nach Anschalten der Wechselwirkung. Der Wechselwirkungsparameter, der in der quantenmechanischen Behandlung die Struktur einer Bande in derselben Weise bestimmt wie $1/\Theta$ beim Rotationsmodell (Θ = Trägheitsmo-

ment), ergibt sich bei dieser klassischen Betrachtung in der Tat als Proportionalitätsfaktor zwischen Rotationsgeschwindigkeit und Drehimpuls.

In Abschnitt 4 folgt ein kurzer Bericht über die quantenmechanische Behandlung des ELLIOTTschen Modells, in der die unitäre Gruppe U_3 eine wesentliche Rolle spielt. (Im Anhang wird dieser Bericht ergänzt.)

In Abschnitt 5 wird die Frage nach dem Zusammenhang mit dem Rotationsmodell an Hand der Matrixelemente des Quadrupolmoments diskutiert. Die Tatsache, daß die vom Rotationsmodell her bekannte Verknüpfung der Matrixelemente des Quadrupolmoments im vorliegenden Modell annähernd erfüllt ist, läßt den Schluß zu, daß die den „rotierenden“ Zuständen des Rotationsmodells analogen Zustände des ELLIOTT-Kerns ebenfalls rotierende Zustände sind, wenn auch in geringerer Ausprägung, ferner, daß ein positives inneres Quadrupolmoment existiert. Wie in der klassischen Betrachtung ergibt sich der Kehrwert des Wechselwirkungsparameters als Proportionalitätsfaktor zwischen Drehimpuls und Rotationsgeschwindigkeit.

2. Das Elliottsche Modell

Das Modell läßt sich auf folgende Weise definieren⁴: Die HAMILTON-Funktion sei

$$H = H^0 + H^1; \quad (2.1)$$

dabei entspricht H^0 der wechselwirkungsfreien Be-

* D 7.

¹ J. P. ELLIOTT, Proc. Roy. Soc., Lond. **245**, 128 [1958].

² J. P. ELLIOTT, Proc. Roy. Soc., Lond. **245**, 562 [1958].

³ J. P. ELLIOTT, Nuclear Structure, Proc. Univ. of Pittsburgh Conf. 1957, S. 298.

⁴ V. BARGMANN u. M. MOSHINSKY, Nucl. Phys. **18**, 697 [1960].

⁵ A. BOHR u. B. R. MOTTETSON, Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-Fys. Medd. **27**, no. 16 [1953].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

wegung der A' äußeren Nukleonen im Potential eines isotropen harmonischen Oszillators

$$H^0 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{A'} (\mathbf{r}_i^2 + \mathbf{p}_i^2) \quad (2.2)$$

(wir setzen $\hbar = m = \omega = 1$); H^1 ist ein Zusatzanteil der Gestalt

$$H^1 = -\alpha \sum_{i,j=1}^{A'} \sum_{\varrho,\sigma}^{x,y,z} t_{i,\varrho\sigma} t_{j,\varrho\sigma}; \quad \alpha > 0, \quad (2.3)$$

wobei die Tensoren zweiter Stufe t_i in folgender Weise definiert sind:

$$t_{\varrho\sigma} = \frac{1}{2} (x_{\varrho} x_{\sigma} - \frac{1}{3} \delta_{\varrho\sigma} \mathbf{r}^2 + p_{\varrho} p_{\sigma} - \frac{1}{3} \delta_{\varrho\sigma} \mathbf{p}^2) \quad (2.4)$$

(der Teilchenindex i ist weggelassen) oder kürzer:

$$t = \frac{1}{2} (\mathbf{r} \circ \mathbf{r} - \frac{1}{3} \mathbf{r}^2 + \mathbf{p} \circ \mathbf{p} - \frac{1}{3} \mathbf{p}^2) \quad (2.5)$$

(das Symbol \circ kennzeichnet das dyadische Produkt). Definieren wir als skalares Produkt zweier Tensoren A, B

$$(A, B) = \text{Sp } A^* B = \sum_{\varrho,\sigma}^{x,y,z} (A_{\varrho\sigma})^* B_{\varrho\sigma}, \quad (2.6)$$

ferner die „Norm“ $|A| = (A, A)^{1/2}$, so können wir auch

$$H^1 = -\alpha \sum_{i,j=1}^{A'} (t_i, t_j) = -\alpha |T|^2 \quad (2.7)$$

schreiben, wobei $T = \sum_i t_i$ ist.

3. Klassische Diskussion

Es ist nützlich, das Modell zunächst einmal klassisch aufzufassen; die eingangs gestellte Frage kann dann nämlich relativ einfach beantwortet werden.

Solange H^1 abgeschaltet ist, sind die Bahnen der A' Teilchen unabhängig voneinander, ihre möglichen Gestalten sind die bekannten Ellipsen. Für die POISSON-Klammer (H^0, t_i) gilt

$$(H^0, t_i) = 0 \quad (i = 1, \dots, A'),$$

d. h. der Tensor t_i ist Bahnkonstante des i -ten Teilchens. Ist q_i der Tensor des Massen-Quadrupolmoments:

$$q_i = \mathbf{r}_i \circ \mathbf{r}_i - \frac{1}{3} \mathbf{r}_i^2, \quad (3.1)$$

so rechnet man leicht nach, daß t_i der Zeitmittelwert von q_i ist, genommen über einen Umlauf des Teilchens i . Wir wollen das auch so ausdrücken: t_i ist das „Quadrupolmoment der Bahn“ des Teilchens i , wobei die Bahn mit einer Massenbelegung versehen

gedacht ist, deren Dichte der Geschwindigkeit des Teilchens umgekehrt proportional ist. In diesem Sinne nennen wir $T = \sum t_i$ das „Quadrupolmoment des Bahngebildes“ aller Teilchen.

Nun sei die Wechselwirkung $H^1 = -\alpha |T|^2$ ($\alpha > 0$) angeschaltet. Wenn α hinreichend klein ist, hat es noch einen guten Sinn, t_i als Quadrupolmoment der Bahn des i -ten Teilchens und T als Quadrupolmoment des Bahngebildes anzusprechen. Bahngebilde mit großem $|T|$ werden energetisch begünstigt. Wir fragen, wie die energetisch begünstigten Bahngebilde aussehen, falls die Energien ε_i der einzelnen Teilchen vor Einschalten der Wechselwirkung fest vorgegeben sind. (Wir wählen diese Nebenbedingung, weil sie in einer gewissen Analogie zur quantenmechanischen Situation steht, wo den äußeren Nukleonen die niedrigstmöglichen Energien durch das PAULI-Prinzip fest vorgeschrieben sind.)

Allgemein gilt die Polygonungleichung

$$|T| \leq \sum_{i=1}^{A'} |t_i|. \quad (3.2)$$

Unter der gestellten Nebenbedingung wird $|T|$ genau dann maximal, wenn erstens

$$|T| = \sum_{i=1}^{A'} |t_i| \quad (3.3)$$

und zweitens $|t_i|$ maximal bei vorgegebenem ε_i ist ($i = 1, \dots, A'$). Man rechnet nach, daß diese beiden Bedingungen genau dann erfüllt sind, wenn sich alle Teilchen längs derselben Geraden durch den Ursprungspunkt bewegen.

Es sei noch etwas verdeutlicht, in welcher Weise die Einzelanteile $-\alpha(t_i, t_j)$ ($i, j = 1, \dots, A'$) von H^1 zu diesem Ergebnis beitragen. Es gilt

$$H^1 = -\alpha \sum_i |t_i|^2 - \alpha \sum_{i \neq j} (t_i, t_j), \quad (3.4)$$

wir diskutieren die beiden Anteile einzeln.

Spaltet man von $|t_i|$ die Energie ε_i ab:

$$|t_i| = \varepsilon_i \gamma_i, \quad (3.5)$$

so hängt γ_i nur noch von der Exzentrizität der Bahnellipse ab. Man errechnet

$$\frac{1}{\sqrt{6}} \leq \gamma_i \leq \frac{2}{\sqrt{6}}; \quad (3.6)$$

die untere Grenze entspricht dem Fall verschwindender Exzentrizität (Kreisbahn), die obere Grenze dem Fall maximaler Exzentrizität (Gerade). Dazwischen hängt γ_i monoton von der Exzentrizität ab.

Demgemäß begünstigt der Anteil $-\alpha \sum_i |t_i|^2$ von H^1 geradlinige Ein-Teilchen-Bahnen.

Die im zweiten Anteil von H^1 vorkommenden Ausdrücke (t_i, t_j) besitzen nach der CAUCHYSchen Ungleichung jeweils die obere Schranke $|t_i| |t_j|$. Da nun die Forderung (3.3) mit

$$(t_i, t_j) = |t_i| |t_j| \quad (3.7)$$

gleichbedeutend ist, werden diese oberen Schranken im Energieminimum auch wirklich angenommen. Dieser Fall (3.7) tritt aber nur ein, wenn die Bahnellipsen i und j durch zentrische Streckung auseinander hervorgehen, d. h. wenn sie sich optimal aneinanderschmiegen. Der zweite Anteil $-\alpha \sum_{i \neq j} (t_i, t_j)$ von H^1 begünstigt also, daß die Ein-Teilchen-Bahnen sich aneinanderschmiegen.

Nachdem wir die Gestalt der energetisch begünstigten Bahngebilde untersucht haben, achten wir jetzt auf das zeitliche Verhalten der Bahngebilde⁶. Nach Anschalten von H^1 ist T nicht mehr exakte Konstante der Bewegung, es gilt vielmehr⁷

$$\dot{T} = (H, T) = (H^1, T) = -\alpha(|T|^2, T). \quad (3.8)$$

Man berechnet die rechte Seite zweckmäßig komponentenweise. Benutzt man die Rechenregeln über Poisson-Klammern und die für den Tensor T charakteristische Relation

$$(T_{\rho\sigma}, T_{\rho'\sigma'}) = \frac{1}{4} \{ \delta_{\rho'\sigma} L_{\rho\sigma'} + \delta_{\sigma'\sigma} L_{\rho\rho'} + \delta_{\rho'\rho} L_{\sigma\sigma'} + \delta_{\sigma'\rho} L_{\sigma\rho'} \} \quad (3.9)$$

$$(L_{\rho\sigma} = \sum l_{i,\rho\sigma}; \quad l_{i,\rho\sigma} = x_{i,\sigma} p_{i,\rho} - x_{i,\rho} p_{i,\sigma}, \quad \text{es gilt}$$

$L \mathbf{v} = \mathbf{L} \times \mathbf{v}$ für beliebige Vektoren \mathbf{v}), so ergibt sich

$$\dot{T} = -\alpha(TL - LT). \quad (3.10)$$

Diese Tensor-Differentialgleichung besitzt eine einfache Lösung: Zunächst sei bemerkt, daß \mathbf{L} und damit auch L nach wie vor Konstante der Bewegung ist:

$$(H, L) = 0. \quad (3.11)$$

Wir definieren⁸

$$\boldsymbol{\omega} = \alpha \mathbf{L} \quad (3.12)$$

und den zeitabhängigen Drehtensor

$$R(t) = R(\hat{\boldsymbol{\omega}}, \varphi = \boldsymbol{\omega} t),$$

der die Drehung um die Achse $\hat{\boldsymbol{\omega}}$ ($\hat{\boldsymbol{\omega}} = \boldsymbol{\omega}/\omega$) mit dem Drehwinkel $\varphi = \omega t$ beschreibt; $R(t)$ kennzeichnet also eine gleichförmige Drehung mit der Winkelgeschwindigkeit $\boldsymbol{\omega}$. Dann ist

$$T(t) = R(t) T(0) R^{-1}(t) \quad (3.13)$$

die Lösung der Differentialgleichung (3.10) zum Anfangswert $T(0)$. Das heißt, das Hauptachsensystem von T rotiert mit der konstanten Winkelgeschwindigkeit $\boldsymbol{\omega} = \alpha \mathbf{L}$; die Matrixdarstellung von T , die auf die Hauptachsen bezogen ist, ist zeitlich konstant.

Zusammengefaßt ergibt also die klassische Diskussion:

1. Nach Einschalten der Wechselwirkung H^1 rotiert das Bahngebilde bei konstant bleibendem „inneren Quadrupolmoment“ mit der konstanten Winkelgeschwindigkeit $\boldsymbol{\omega} = \alpha \mathbf{L}$. Da diese Identität gilt und \mathbf{L} genähert mit dem kinetischen Drehimpuls übereinstimmt, hat der Wert $\Theta = 1/\alpha$ in diesem Modell die Bedeutung eines Trägheitsmoments.
2. Sind die Ein-Teilchen-Energien fest vorgegeben, so ist das extrem zigarrenförmige Bahngebilde energetisch bevorzugt.

Die Erörterungen dieses Abschnitts beantworten zwar nicht die Frage, ob das ELLIOTTsche Modell auch quantenmechanisch einen rotierenden Kreisel beschreibe. Immerhin haben sie ergeben, daß das klassisch verstandene Modell mehr mit dem Rotationsmodell zu tun hat, als es auf den ersten Blick scheint. Insbesondere ergibt sich $\Theta = 1/\alpha$ als Proportionalitätsfaktor zwischen Drehimpuls und Winkelgeschwindigkeit. (In der quantenmechanischen Behandlung wird $\Theta = 1/\alpha$ die Abstände im rotationsartigen Energiespektrum bestimmen:

$$E_L - E_0 = L(L+1)/2 \Theta,$$

also gerade so, wie im Rotationsmodell das Trägheitsmoment eine Rotationsbande bestimmt.)

4. Bericht über die quantenmechanische Diskussion des Modells

Die durch H^1 gegebene Vorschrift zur Bildung der energetisch niedrigen Zustände hängt eng zu-

⁶ Die folgende Erörterung ist eng verwandt mit einem Argument von S. GOSHEN und H. J. LIPKIN für ein vereinfachtes Modell; vgl. Ann. Phys. (N. Y.) 6, 310 [1959].

⁷ Eine Verwechslung der Poisson-Klammer mit dem Symbol des skalaren Produkts zweier Tensoren ist wohl nicht möglich.

⁸ Eine Verwechslung mit der Oszillator-Kreisfrequenz ist ausgeschlossen, da wir diese $=1$ gesetzt haben.

sammen mit der Zerlegung des HILBERT-Raumes nach den irreduziblen Darstellungen der dreidimensionalen unitären Gruppe \mathbb{U}_3 . Ist \mathbf{L} der Operator des gesamten Bahndrehimpulses und N der Operator der Anzahl der Oszillatorquanten, so besitzt der Operator

$$G = \frac{1}{3} N^2 + \frac{1}{2} \mathbf{L}^2 + |T|^2 \quad (4.1)$$

in jedem gegenüber \mathbb{U}_3 irreduziblen Raum einen scharfen Wert. (Näheres über diesen Zusammenhang und den Operator G in Anhang 1.)

Aus (4.1) folgt die für dieses Modell wichtige Beziehung

$$-|T|^2 = -G + \frac{1}{3} N^2 + \frac{1}{2} \mathbf{L}^2. \quad (4.2)$$

Betrachtet man einen Eigenraum von H^0 (er habe die Oszillator-Quantenzahl N) und denkt ihn nach \mathbb{U}_3 und der Drehgruppe sukzessiv ausreduziert, so erhält man Basisvektoren $|N[\mathbb{U}_3] \dots LM\rangle$, wobei $[\mathbb{U}_3]$ die betreffende \mathbb{U}_3 -irreduzible Darstellung kennzeichnen soll. Aus (4.2) folgt

$$\begin{aligned} & -|T|^2 |N[\mathbb{U}_3] \dots LM\rangle \\ &= [-G_{[\mathbb{U}_3]} + \frac{1}{3} N^2 + \frac{1}{2} L(L+1)] |N[\mathbb{U}_3] \dots LM\rangle, \end{aligned} \quad (4.3)$$

dabei hängt die (reelle) Zahl $G_{[\mathbb{U}_3]}$ nur von der Darstellung $[\mathbb{U}_3]$ ab. H^1 ist also bezüglich der genannten Basis diagonal; die Diagonalelemente sind

$$\begin{aligned} & \langle N[\mathbb{U}_3] \dots LM | H^1 | N[\mathbb{U}_3] \dots LM \rangle \\ &= \alpha [-G_{[\mathbb{U}_3]} + \frac{1}{3} N^2] + \frac{\alpha}{2} L(L+1). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Der Ausdruck in der eckigen Klammer ist in einem \mathbb{U}_3 -irreduziblen Raum konstant. Der zweite Term liefert eine Aufspaltung der Zustände des \mathbb{U}_3 -irreduziblen Raumes, die rotationsartig ist. Die „Bande“ enthält genau die Terme L , die in dem betreffenden \mathbb{U}_3 -irreduziblen Raum vorkommen.

Solange der Störungsparameter α nicht so groß ist, daß sich die Energiespektren benachbarter Oszillator-Quantenzahlen N beträchtlich überlappen, gehören die energetisch niedrigen Zustände zur Oszillator-Quantenzahl $N = A' n^0$, wenn n^0 die erste nicht vollbesetzte Oszillator-Schale bezeichnet. Um in diesem Eigenraum von H^0 die energetisch niedrigen Zustände zu finden, sucht man gemäß der Beziehung (4.4) denjenigen \mathbb{U}_3 -irreduziblen Teilraum, dessen G -Wert maximal ist. Man kann nun die \mathbb{U}_3 -irreduziblen Räume kennzeichnen, indem man neben der Oszillator-Quantenzahl N zwei weitere Quantenzahlen λ, μ angibt (Näheres in Anhang 2); der Wert

von G in einem \mathbb{U}_3 -irreduziblen Raum vom Typ $N, (\lambda, \mu)$ ist dann durch

$$G_{N(\lambda\mu)} = \frac{1}{3} N^2 + \frac{2}{3} [\lambda(\lambda+3) + \mu(\mu+3) + \lambda\mu] \quad (4.5)$$

gegeben (Beweis in Anhang 3).

Im Falle $A' \leq 4$ (und $N = A' n^0$) wird $G_{N(\lambda\mu)}$ maximal, wenn $(\lambda, \mu) = (N, 0)$ ist (Begründung in Anhang 3). In diesem \mathbb{U}_3 -irreduziblen Raum kommen die Drehimpulse $L = N, N-2, N-4, \dots, 1$ bzw. 0 vor, jedes Multipllett einmal. — Die folgenden Betrachtungen beziehen sich auf den Fall $A' \leq 4$, sie lassen sich nicht ohne weiteres auf den Fall $A' > 4$ übertragen.

Eine weitere Ähnlichkeit mit dem Rotationsmodell ergibt sich, wenn man die Matrixelemente des Massen-Quadrupolmoments betrachtet. Die Matrixelemente des Quadrupoltensors Q ($Q = \sum_i q_i$, $q_i = \mathbf{r}_i \circ \mathbf{r}_i - \frac{1}{3} \mathbf{r}_i^2$), die zu den Zuständen $|LM\rangle$ des soeben betrachteten \mathbb{U}_3 -irreduziblen Raumes vom Typ $N, (\lambda, \mu) = (N, 0)$ gehören, sind durch die Angabe der speziellen Matrixelemente $\langle LL | Q_0 | LL \rangle$ ($L = N, N-2, \dots$) und $\langle L+2 L+2 | Q_2 | LL \rangle$ ($L = N-2, N-4, \dots$) bereits völlig festgelegt. Unter Benutzung der Ergebnisse ELLIOTTS⁹ erhält man

$$\langle LL | Q_0 | LL \rangle = -\frac{L}{2L+3} \cdot \frac{2N+3}{\sqrt{6}}, \quad (4.6)$$

$$\langle L+2 L+2 | Q_2 | LL \rangle = \quad (4.7)$$

$$\frac{1}{4} \left[\frac{(2L+2)(2L+4)}{(2L+3)(2L+5)} \right]^{1/2} [(2N+3)^2 - (2L+3)^2]^{1/2}.$$

Bei der Herleitung dieser Formeln benutzt man nach ELLIOTT zweckmäßig, daß

$$\langle f | Q | i \rangle = \langle f | T | i \rangle \quad (4.8)$$

ist, wofern $|i\rangle$ und $|f\rangle$ Zustände mit derselben Oszillatorquantenzahl N sind (in Anhang 4 wird eine kurze Herleitung dieser Identität gegeben). In ELLIOTTS Herleitung der Ausdrücke für $\langle LL | T_0 | LL \rangle$ und $\langle L+2 L+2 | T_2 | LL \rangle$ wird eine explizite Gestalt der Zustände $|LM\rangle$ benutzt. Man kann eine Herleitung angeben, in der nur von der gruppentheoretischen Kennzeichnung des betrachteten \mathbb{U}_3 -irreduziblen Raumes Gebrauch gemacht wird (siehe Anhang 5).

Im Rotationsmodell des Kerns ist für die $(K=0)$ -Bande ($L=0, 2, 4, \dots$)⁵

$$\langle LL | Q_0 | LL \rangle_{\text{RM}} = -\frac{L}{2L+3} Q_0' \quad (4.9)$$

⁹ Vgl. ², S. 578, Formel (46). Man beachte, daß die von uns definierten Q_τ aus denen ELLIOTTS durch Multiplikation mit $1/\sqrt{6}$ hervorgehen.

und

$$\langle L+2L+2 | Q_2 | LL \rangle_{\text{RM}} = \frac{1}{4} \sqrt{6} \left[\frac{(2L+2)(2L+4)}{(2L+3)(2L+5)} \right]^{1/2} Q_0', \quad (4.10)$$

dabei ist Q_0' das innere Quadrupolmoment. Wir setzen jetzt im ELLIOTT-Modell voraus, daß $N=A'n^0$ gerade ist. Bilden wir die Quotienten der entsprechenden Matrixelemente in beiden Modellen, so ergibt sich aus (4.6) und (4.9) bzw. (4.7) und (4.10)

$$\frac{\langle LL | Q_0 | LL \rangle}{\langle LL | Q_0 | LL \rangle_{\text{RM}}} = \frac{2N+3}{\sqrt{6}} / Q_0' \quad (L=N, N-2, \dots), \quad (4.11)$$

$$\frac{\langle L+2L+2 | Q_2 | LL \rangle}{\langle L+2L+2 | Q_2 | LL \rangle_{\text{RM}}} = \gamma(N, L) \frac{2N+3}{\sqrt{6}} / Q_0' \quad (L=N-2, N-4, \dots), \quad (4.12)$$

wobei

$$\gamma(N, L) = \frac{[(2N+3)^2 - (2L+3)^2]^{1/2}}{2N+3}. \quad (4.13)$$

Für festes L und $N \rightarrow \infty$ gilt $\gamma(N, L) \rightarrow 1$. In diesem Grenzfall ist der Zusammenhang (4.9) und (4.10) der Matrixelemente $\langle f | Q_\tau | i \rangle$ untereinander auch im ELLIOTT-Modell exakt verwirklicht. Für reale Kerne und insbesondere die, auf die das Oszillator-Schalenmodell überhaupt anwendbar ist, ist dieser Grenzfall nicht verwirklicht. Für $A'=4$, $n^0=2$ (das entspricht Ne^{20}) ist beispielsweise

$$\begin{aligned} \gamma(8,0) &= 0,99; & \gamma(8,2) &= 0,93; \\ \gamma(8,4) &= 0,82; & \gamma(8,6) &= 0,61. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Damit sind die Grenzen angegeben, innerhalb deren der Zusammenhang (4.9) und (4.10) der $\langle f | Q_\tau | i \rangle$ auch im ELLIOTTschen Modell erfüllt ist.

5. Kooperatives Verhalten der äußeren Nukleonen

Kann der ELLIOTTsche Kern näherungsweise als Rotator angesehen werden?

Die reine Rotation einer Massenverteilung im klassischen Sinne drückt sich in einer bestimmten Zeitabhängigkeit der Multipolmomente aus: das Hauptachsensystem des Quadrupoltensors rotiert, die Multipoltensoren sind bezüglich dieses Koordinatensystems zeitlich konstant. Falls Multipolmomente höherer als zweiter Ordnung hinreichend klein sind, ist $Q(t)$ (t =Zeit) entscheidend.

Man kann nun zeigen, daß der Spezialfall der reinen klassischen Rotation des Quadrupoltensors $Q(t)$ eine korrespondenzmäßige Folgerung der Be-

ziehungen (4.9) und (4.10) der $\langle f | Q_\tau | i \rangle$ untereinander ist, wofern die Energie proportional zu $L(L+1)$ ist,

$$E_L - E_0 = \frac{1}{2\Theta} L(L+1). \quad (5.1)$$

Dazu betrachten wir Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung der Form

$$\psi(t) = \sum_L c_L e^{-iE_L t} |LL\rangle_{\text{RM}}, \quad (5.2)$$

ferner seien A und L_0 zwei gerade natürliche Zahlen, die die Bedingung $1 \ll A \ll L_0$ erfüllen und

$$c_L = \begin{cases} 1/\sqrt{A+1}, & L=L_0, L_0 \pm 2, \dots, L_0 \pm A \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.3)$$

Für die Werte L mit $c_L \neq 0$ ist $E_{L+2} - E_L$ praktisch konstant, wir setzen $E_{L+2} - E_L = 2\omega$, es gilt dann $L \approx \Theta \omega$. Bezieht man nun den Tensor

$$\langle \psi(t) | Q | \psi(t) \rangle$$

auf ein bewegtes Koordinatensystem (x', y', z') , dessen $y'-z'$ -Achsenkreuz in der raumfesten $x-y$ -Ebene mit der Kreisfrequenz ω umläuft, so ist seine Matrixdarstellung zeitunabhängig und hat die Gestalt

$$(\langle \psi(t) | Q_{\sigma'\sigma'} | \psi(t) \rangle) = Q'_{z'z'} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

(dabei ist $Q_0' = \frac{1}{2}\sqrt{6} Q'_{z'z'}$). Q_0' (bzw. $Q'_{z'z'}$) erscheint bei dieser korrespondenzmäßigen Betrachtung in der Tat als inneres Quadrupolmoment.

Wir wollen Zustände $\psi(t)$, deren Erwartungswerte $\langle \psi(t) | Q | \psi(t) \rangle$ eine Rotation des inneren Quadrupolmoments darstellen, kurz rotierende Zustände nennen. Für große Quantenzahlen gibt es dann gemäß (5.4) im strengen Sinne rotierende Zustände. Dieses Ergebnis fußt auf den BOHR-MOTTESONschen Beziehungen (4.9) und (4.10).

Es liegt nahe, diese Relationen (4.9) und (4.10) als quantenmechanisches Analogon zur reinen klassischen Rotation des Quadrupoltensors anzusehen und dann gemäß der groben Übereinstimmung [vgl. (4.14)] zu behaupten, der ELLIOTT-Kern rotiere ebenfalls. Nun gilt aber die Verknüpfung (4.9) und (4.10) im ELLIOTTschen Modell nur für einen beschränkten Vorrat von L -Werten und ist gerade für die größeren L in diesem Vorrat am schlechtesten erfüllt. Ein korrespondenzmäßiges Argument ist also an dieser Stelle nicht ohne weiteres brauchbar. Die Aussage, die Beziehungen (4.9) und (4.10)

seien das quantenmechanische Analogon zur reinen klassischen Rotation, ist erst dann erhärtet, wenn gezeigt ist, daß rotationsartiges Verhalten für niedrige L in analoger Weise aus (4.9) und (4.10) hergeleitet werden kann, wie es in der korrespondenzmäßigen Überlegung für große L geschieht.

Wir argumentieren am Beispiel $A' = 4$, $n^0 = 2$ (Ne^{20}). Wir werden nichtstationäre Lösungen $\psi(t)$ des ELLIOTT-Modells betrachten, die zwei benachbarte L enthalten. Zuvor bilden wir den analogen Zustand im Rotationsmodell, um zu sehen, in welcher Schärfe hier überhaupt Rotation erkennbar werden kann. Die ausdrückliche Beschränkung auf zwei Werte L bewirkt eine gewisse Unschärfe in der momentanen Orientierung des Kreisels. Man wird darum das innere Quadrupolmoment nicht so deutlich erkennen wie in der korrespondenzmäßigen Betrachtung. Auf diese Weise zeigen sich die Grenzen, die der Beantwortung der Frage nach den rotierenden Zuständen bereits durch die quantenmechanische Unbestimmtheit gesetzt sind. Das Rotationsmodell gibt an, wie scharf rotierende Zustände bei vorgegebenem innerem Quadrupolmoment höchstens ausfallen können.

Wir bilden also im Rotationsmodell den Zustand¹⁰

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-iE_6 t} |66\rangle + e^{-iE_8 t} |88\rangle). \quad (5.5)$$

Bezieht man den Tensor $\langle \psi(t) | Q | \psi(t) \rangle$ auf ein Koordinatensystem, dessen $y' - z'$ -Achsenkreuz in der raumfesten $x - y$ -Ebene mit der Kreisfrequenz $\frac{1}{2}(E_8 - E_6)$ umläuft, so wird diese Darstellung zeitunabhängig:

$$(\langle Q_{\sigma'\sigma'} \rangle) = Q'_{z'z'} \begin{pmatrix} -0,41 & 0 & 0 \\ 0 & -0,15 & 0 \\ 0 & 0 & 0,56 \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

Der Vergleich mit (5.4) zeigt die Verwischung des inneren Quadrupolmoments.

Im ELLIOTTschen Modell erhält man für den analog gebildeten Zustand

$$(\langle Q_{\sigma'\sigma'} \rangle) = C \begin{pmatrix} -0,41 & 0 & 0 \\ 0 & -0,01 & 0 \\ 0 & 0 & 0,42 \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

mit $C = (2N + 3)/3$. Man erhält eine genäherte Übereinstimmung der rechten Seiten von (5.6) und (5.7), wenn man im Rotationsmodell $Q'_{z'z'} = C$ setzt, das entspricht der Identifizierung $Q'_0 = (2N + 3)/\sqrt{6}$ [vgl. dazu die Formeln (4.11) und (4.12)].

¹⁰ Die Gleichheit der beiden Koeffizienten steht in Analogie zum Postulat (5.3). Im übrigen dürfen nur zwei L -Werte kombiniert werden, wenn man eine definierte Umlauffrequenz erhalten will.

Wenn also für niedrige L rotierende Zustände nach dem Rotationsmodell überhaupt zu erwarten sind, treten sie — obzwar in geringerer Deutlichkeit — auch im ELLIOTTschen Modell auf. Die Abschwächung tritt in dem Maße ein, als $\gamma(N, L)$ für die vorkommenden Quantenzahlen L von eins abweicht.

An Hand der Darstellungen (5.4), (5.6) und (5.7) haben wir die betreffenden Zustände $\psi(t)$ als rotierende Zustände erkannt. Alle drei Beziehungen beruhen auf einer speziellen Verknüpfung der $\langle f | Q_\tau | i \rangle$ untereinander. Für (5.4) und (5.6) ist es die präzise BOHR-MOTTIELSONsche Verknüpfung; die Verwischung des inneren Quadrupolmoments in (5.6) beruht auf der quantenmechanischen Unbestimmtheit. Die weitere Verwischung in (5.7) rührt ausschließlich von dem Auftreten der $\gamma(N, L)$ her, welche die BOHR-MOTTIELSONsche Beziehung der $\langle f | Q_\tau | i \rangle$ etwas modifizieren. Man kann also die BOHR-MOTTIELSONsche Verknüpfung der $\langle f | Q_\tau | i \rangle$ als den quantenmechanischen Ausdruck für die reine Rotation eines inneren Quadrupolmoments ansehen.

Die Tatsache, daß im ELLIOTTschen Modell rotierende Zustände existieren, die eine genäherte Übereinstimmung der Werte (5.6) und (5.7) auf Grund der Identifizierung

$$Q'_0 = (2N + 3)/\sqrt{6} \quad (5.8)$$

liefern, legt es nahe, den Wert $(2N + 3)/\sqrt{6}$ als „inneres Quadrupolmoment“ des ELLIOTTschen Kerns anzusprechen. Diese Deutung wird man allerdings wegen des Auftretens der $\gamma(N, L)$ in (4.12) nicht zu scharf nehmen dürfen.

Es ist noch aufschlußreich, sich eine Vorstellung von der Größe des inneren Quadrupolmoments $Q'_0 = (2N + 3)/\sqrt{6}$ zu machen. Besetzt man den Ein-Teilchen-Zustand $|n_x n_y n_z\rangle = |00n^0\rangle$ A' -fach, so liefert dieser Zustand den Erwartungswert $\langle Q_0 \rangle = 2N/\sqrt{6}$. Es liegt nahe, die Existenz eines inneren Quadrupolmoments etwa dieser Größe in Zusammenhang zu bringen mit dem Ergebnis der klassischen Diskussion, demzufolge H^1 die Tendenz erzeugt, daß alle Teilchen sich längs derselben Geraden bewegen.

Schließlich sei noch die Rolle des Parameters α untersucht. Der im Rotationsmodell trivialerweise gültige Sachverhalt, daß für rotierende Zustände

$$\langle \psi(t) | \mathbf{L} | \psi(t) \rangle_{\text{RM}} \approx \Theta \omega \quad (5.9)$$

gilt, wobei ω [im Beispiel (5.5): $\omega = \frac{1}{2}(E_8 - E_6) \hat{z}$] der Vektor der Umlauffrequenz ist, gilt auch im ELLIOTT-Modell:

$$\langle \psi(t) | \mathbf{L} | \psi(t) \rangle \approx \frac{1}{\alpha} \omega. \quad (5.10)$$

Im ELLIOTT-Modell ist diese Beziehung darum nicht trivial, weil ω eine Rotationsfrequenz ist, also die zeitliche Änderung der (kollektiven) Orientierungsvariablen beschreibt. Im Sinne der Beziehung (5.10) können wir $\Theta = 1/\alpha$ als Trägheitsmoment auffassen. Mit (5.10) haben wir ein dem Resultat $\mathbf{L} = \omega/\alpha$ der klassischen Betrachtung analoges Ergebnis gewonnen.

Allerdings besagt die Deutung von $\Theta = 1/\alpha$ als Trägheitsmoment nicht mehr als die Gültigkeit der Beziehung (5.10). Insbesondere gibt das ELLIOTTsche Modell ohne weitergehende Zusatzannahmen nicht die Möglichkeit, Θ zu berechnen, denn α ist ein frei verfügbarer Parameter. Die Tatsache, daß Θ völlig frei ist, während das innere Quadrupolmoment (welches Aussagen über die Massenverteilung gestattet) unabhängig von Θ festliegt, weist darauf hin, daß es auf dieser Stufe nicht möglich ist, einen Zusammenhang zwischen Θ und etwa dem sog. starren Trägheitsmoment zu sehen (man beachte auch: das Verschwinden des Wechselwirkungsparameters α bedeutet $\Theta \rightarrow \infty$!).

Es muß aber erwähnt werden, daß auch das zum Vergleich herangezogene Rotationsmodell zunächst so formuliert werden kann, daß die Größen Θ und Q_0 voneinander unabhängig sind¹¹.

Herrn Professor G. LÜDERS danke ich herzlich für die Anregung zu dieser Arbeit und für viele wertvolle Diskussionen.

Anhang 1: Die Rolle der Gruppe \mathfrak{U}_3

Mit Hilfe der bekannten Substitution

$$\mathbf{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{r} + i \mathbf{p}) \quad (A.1.1)$$

erhält man die Vertauschungsbeziehungen

$$\begin{aligned} [a_\rho, a_\sigma^*] &= \delta_{\rho\sigma}, \\ [a_\rho, a_\sigma] &= 0 = [a_\rho^*, a_\sigma^*]; \end{aligned} \quad (A.1.2)$$

der Ein-Teilchen-HAMILTON-Operator $H = (\mathbf{r}^2 + \mathbf{p}^2)/2$ geht über in

$$H = \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a} + \frac{3}{2}. \quad (A.1.3)$$

H ändert sich also nicht, wenn \mathbf{a} durch $U \mathbf{a}$ ersetzt wird, wobei U ein beliebiger unitärer Tensor in drei Dimensionen ist. Dasselbe gilt für die Relationen (A.1.2). Die Gesamtheit dieser Tensoren bildet eine Gruppe, die \mathfrak{U}_3 genannt wird und der besonderen, über die Drehinvarianz hinausgehenden Symmetrie des HAMILTON-Operators (A.1.3) entspricht. Gemäß der Invarianz von (A.1.2) suchen wir eine Darstellung $U \rightarrow s_U$ von \mathfrak{U}_3 durch Ein-Teilchen-Operatoren s_U , die die Forderungen

$$\begin{aligned} s_U^{-1} \mathbf{a} s_U &= U \mathbf{a}, \\ s_U^{-1} \mathbf{a}^* s_U &= \mathbf{a}^* U^* \end{aligned} \quad (A.1.4)$$

erfüllt. Man kann zeigen, daß durch diese Forderungen die Darstellung bis auf einen Faktor, der seinerseits eine eindimensionale Darstellung von \mathfrak{U}_3 ist, eindeutig bestimmt ist. Fordert man noch

$$s_U |0\rangle = |0\rangle \quad (U \in \mathfrak{U}_3), \quad (A.1.5)$$

wobei $|0\rangle$ den Grundzustand von H kennzeichnet (d. h. $\mathbf{a} |0\rangle = 0$), so ist die Darstellung $U \rightarrow s_U$ eindeutig bestimmt und läßt sich mit Hilfe von (A.1.4) explizit angeben: sei $P(\mathbf{a}^*)$ ein beliebiges Polynom in den Erzeugungsoperatoren a_ρ^* ($\rho = x, y, z$), dann ist¹²

$$s_U P(\mathbf{a}^*) |0\rangle = P(\mathbf{a}^* U) |0\rangle. \quad (A.1.6)$$

Die so definierte Darstellung $U \rightarrow s_U$ hat zwei wichtige Eigenschaften: es ist $[H, s_U] = 0$, und bei Restriktion auf die Drehgruppe ergibt sich deren bekannte Darstellung.

Ist F ein Element des Infinitesimalrings von \mathfrak{U}_3 , so ist ihm vermöge der Darstellung (A.1.6) der Operator

$$s_F = \mathbf{a}^* F \mathbf{a} \quad (A.1.7)$$

zugeordnet. Der Infinitesimalring von \mathfrak{U}_3 ist neundimensional, eine (nichthermitesche) Basis ist die Gesamtheit der Tensoren $\hat{\rho} \circ \hat{\sigma}$ ($\rho, \sigma = x, y, z$; $\hat{\rho}$ = Einheitsvektor in ρ -Richtung), ihnen sind nach (A.1.7) die Operatoren

$$s_{\rho\sigma} = \mathbf{a}_\rho^* \mathbf{a}_\sigma \quad (A.1.8)$$

zugeordnet. Es ist oft zweckmäßig, zu einer anderen Basis überzugehen, deren Elemente (λ, τ) ($\lambda = 0, 1, 2$; $\tau = -\lambda, \dots, \lambda$) sich wie die Kugelfunktionen $Y_{\lambda\tau}$ transformieren. Ein derartiger Übergang führt zur Beziehung

$$s_{(\lambda\tau)} = \sum_{\mu, \nu} (11 \mu \nu | \lambda \tau) b_\mu a_\nu, \quad (A.1.9)$$

wobei

$$\begin{aligned} a_1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (a_x + i a_y), \\ a_0 &= a_z, \\ a_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a_x - i a_y), \\ b_1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (a_x^* + i a_y^*), \\ b_0 &= a_z^*, \\ b_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a_x^* - i a_y^*) \end{aligned} \quad (A.1.10)$$

¹¹ Vgl. z. B. S. A. MOSZKOWSKI, Models of Nuclear Structure, in Handbuch der Physik, Bd. 39, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1957.

¹² Vgl. B. F. BAYMAN u. A. BOHR, Nucl. Phys. 9, 596 [1958/59].

ist. Man überträgt diese Darstellung auf den A' -Teilchen-Zustandsraum durch

$$S_U = \prod_{i=1}^{A'} S_U(i) \quad (\text{A 1.11})$$

bzw.
$$S_F = \sum_{i=1}^{A'} S_F(i) . \quad (\text{A 1.12})$$

Dann folgt aus (A 1.9) für die $S_{(\lambda\tau)}$

$$\begin{aligned} S_{(00)} &= -\frac{1}{\sqrt{3}} N; \\ S_{(1\mu)} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} L_\mu, \quad \mu = -1, 0, 1; \\ S_{(2\tau)} &= T_\tau = \sqrt{\frac{8\pi}{15}} \frac{1}{2} \sum_i (r_i^2 Y_{2\tau}(\hat{\mathbf{r}}_i) + p_i^2 Y_{2\tau}(\hat{\mathbf{p}}_i)); \end{aligned} \quad (\text{A 1.13})$$

dabei ist $N = \sum n_i$, $n_i = \mathbf{a}_i^* \cdot \mathbf{a}_i$; die Eigenwerte dieses (hermiteschen) Operators sind die Oszillator-Quantenzahlen N . \mathbf{L} ist der Operator des Bahndrehimpulses: $\mathbf{L} = \sum \mathbf{l}_i$, $\mathbf{l}_i = \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i$. Die Operatoren T_τ sind die fünf kennzeichnenden Komponenten des Tensoroperators T , der in Abschnitt 2 definiert wurde, welche analog den bekannten fünf Komponenten Q_τ des Quadrupol-Tensoroperators gebildet sind.

Die Operatoren L_μ und T_τ genügen den Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [T_\tau, T_{\tau'}] &= \sqrt{\frac{5}{2}} (2\tau\tau' | 1\tau + \tau') L_{\tau+\tau'}, \\ [T_\tau, L_\mu] &= -\sqrt{6} (2\tau\mu | 2\tau + \mu) T_{\tau+\mu}, \\ [L_\mu, L_{\mu'}] &= -\sqrt{2} (1\mu\mu' | 1\mu + \mu') L_{\mu+\mu'}. \end{aligned} \quad (\text{A 1.14})$$

In Abschnitt 3 wurde schon das klassische Analogon der ersten dieser Vertauschungsrelationen benutzt [Gl. (3.9)]. N ist mit den T_τ und L_μ vertauschbar.

Aus $[H^0, S_U] = 0$ und der Tatsache, daß $U \rightarrow S_U$ eine Erweiterung der bekannten Darstellung der Drehgruppe auf die Gruppe \mathcal{U}_3 ist, folgt, daß sich die Eigenräume von H^0 sukzessiv nach \mathcal{U}_3 und der Drehgruppe ausreduzieren lassen.

Man definiert nun den Operator

$$G = \sum_{\lambda, \tau} S_{(\lambda\tau)}^* S_{(\lambda\tau)}. \quad (\text{A 1.15})$$

Er ist mit allen S_U ($U \in \mathcal{U}_3$) vertauschbar. Daraus folgt, daß die bezüglich \mathcal{U}_3 irreduziblen Räume zugleich Eigenräume von G sind. Mit (A 1.13) folgt sofort Gl. (4.1).

Anhang 2: Kennzeichnung der \mathcal{U}_3 -irreduziblen Räume

In einem \mathcal{U}_3 -invarianten Raum gibt es eine Basis, die aus simultanen Eigenvektoren von $S_{\varrho\varrho}$ ($\varrho = x, y, z$) besteht. Diese Vektoren haben also N_x, N_y, N_z als gute

Quantenzahlen. Wir denken uns die vorkommenden Tripel $[N_x, N_y, N_z]$ in folgender Weise angeordnet: $[N_x', N_y', N_z']$ stehe „hinter“ $[N_x, N_y, N_z]$, wenn die letzte ¹³ nichtverschwindende Differenz $N_{\varrho} - N_{\varrho}'$ größer als Null ist. Die Vektoren $|N_x^0 N_y^0 N_z^0 \dots\rangle$, die zu dem an der Spitze stehenden Tripel $[N_x^0, N_y^0, N_z^0]$ gehören, können auch so gekennzeichnet werden: es ist

$$S_{\varrho\sigma} |N_x^0 N_y^0 N_z^0 \dots\rangle = 0, \quad (\text{A 2.1})$$

sobald ϱ im Alphabet rechts von σ steht („ $\varrho > \sigma$ “).

Jedem \mathcal{U}_3 -irreduziblen Raum läßt sich auf diese Weise eindeutig ein Tripel $[N_x^0, N_y^0, N_z^0]$ zuordnen. Räume mit demselben Tripel sind äquivalent, Räume mit verschiedenen Tripeln inäquivalent. Die irreduziblen Darstellungen von \mathcal{U}_3 bzw. die zugehörigen Räume sind also durch die drei Quantenzahlen N_x^0, N_y^0, N_z^0 bis auf Äquivalenz vollständig gekennzeichnet.

An Stelle der drei Quantenzahlen N_x^0, N_y^0, N_z^0 verwendet man meist die Quantenzahlen N, λ, μ , wobei der (umkehrbar eindeutige) Zusammenhang durch

$$\begin{aligned} N &= N_x^0 + N_y^0 + N_z^0, \\ \lambda &= N_z^0 - N_y^0, \\ \mu &= N_y^0 - N_x^0 \end{aligned} \quad (\text{A 2.2})$$

gegeben ist ². Wie man zeigen kann, ist stets $\lambda \geq 0$, $\mu \geq 0$.

Anhang 3: Beweis der Gleichung (4.5) ¹⁴

Wir gehen von (A 1.15) aus. Die $S_{(\lambda\tau)}$ stehen gemäß (A 1.9) in unitärer Beziehung zu den neun Basis-elementen $S_{\varrho\sigma}$ ($\varrho, \sigma = x, y, z$), darum gilt

$$\begin{aligned} G &= \sum_{\varrho, \sigma} S_{\varrho\sigma}^* S_{\varrho\sigma} = \sum_{\varrho, \sigma} S_{\sigma\varrho} S_{\varrho\sigma} \\ &= \sum_{\varrho} S_{\varrho\varrho}^2 + 2 \sum_{\sigma < \varrho} S_{\sigma\varrho} S_{\varrho\sigma} + \sum_{\sigma < \varrho} [S_{\varrho\sigma}, S_{\sigma\varrho}]. \end{aligned} \quad (\text{A 3.1})$$

Also

$$G = \sum_{\varrho} S_{\varrho\varrho}^2 + 2 \sum_{\sigma < \varrho} S_{\sigma\varrho} S_{\varrho\sigma} + \sum_{\sigma < \varrho} (S_{\varrho\varrho} - S_{\sigma\sigma}). \quad (\text{A 3.2})$$

Wenden wir diese Gleichheit auf einen zum Tripel $[N_x^0, N_y^0, N_z^0]$ gehörenden Zustand $|N_x^0 N_y^0 N_z^0 \dots\rangle$ an, so ergibt sich wegen (A 2.1)

$$\begin{aligned} G |N_x^0 N_y^0 N_z^0 \dots\rangle &= ((N_x^0)^2 + (N_y^0)^2 + (N_z^0)^2 \\ &\quad + 2 N_z^0 - 2 N_x^0) |N_x^0 N_y^0 N_z^0 \dots\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A 3.3})$$

Daraus folgt mit (A 2.2) die Behauptung.

Man kann nun ein Verfahren angeben, denjenigen \mathcal{U}_3 -irreduziblen Raum zu bestimmen, dessen G -Wert maximal ist. Dieses Maximumproblem ist gleichbedeutend mit der Suche nach einer Vorschrift, die erlaubten Ein-Teilchen-Zustände unter Beachtung des PAULI-Prinzips ¹⁵ und der Bedingung $N = A' n^0$ so mit A' Teil-

¹³ „Letzte“ ist im Sinne der Reihenfolge x, y, z zu verstehen.

¹⁴ Nach einer Methode ⁴, die analog einem Verfahren bei der Drehgruppe ist.

¹⁵ Die Ein-Teilchen-Zustände sollen außer durch die Quantenzahlen n_x, n_y, n_z noch durch Spin- und Isospin-Quantenzahlen unterschieden sein.

chen zu besetzen, daß $N_x^2 + N_y^2 + N_z^2 + 2N_z - 2N_x$ maximal wird. Das erfordert, grob gesprochen, möglichst viele der Oszillatorquanten in z -Richtung und gleichzeitig möglichst wenige in x -Richtung unterzubringen.

Im Falle $A' \leq 4$ wird dieses Maximumproblem gelöst durch das Tripel $[N_x, N_y, N_z] = [0, 0, N]$, im Falle $A' > 4$ durch andere Tripel. (Das ist eine unmittelbare Folge der Tatsache, daß Ein-Teilchen-Zustände mit den Quantenzahlen n_x, n_y, n_z höchstens vierfach auftreten können¹⁵⁾.)

Anhang 4: Beweis der Gleichung (4.8)

Wir betrachten die spezielle unitäre Abbildung $a_j \rightarrow i a_j = I a_j$ ($I = i1$; $j = 1, \dots, A'$); aus (A 1.4) folgt dann

$$S_I^{-1} r_j S_I = -p_j \quad (\text{A 4.1})$$

und daraus

$$S_I^{-1} q_j S_I = p_j \circ p_j - \frac{1}{3} p_j^2, \quad (\text{A 4.2})$$

mithin

$$\begin{aligned} S_I^{-1} Q S_I &= R, \\ R &= \sum (p_j \circ p_j - \frac{1}{3} p_j^2). \end{aligned} \quad (\text{A 4.3})$$

Sei nun $|N\rangle$ irgendein Zustand zur Oszillator-Quantenzahl N ; er läßt sich darstellen als $P_N |0\rangle$, wobei $|0\rangle$ der Oszillator-Zustand zu $N=0$ und P_N ein homogenes Polynom vom Grade N in den Erzeugungsoperatoren a_{j0}^* ($j=1, \dots, A'$; $0=x, y, z$) ist. Dann gilt gemäß (A 1.6) und (A 1.11)

$$S_I |N\rangle = i^N P_N |0\rangle = i^N |N\rangle. \quad (\text{A 4.4})$$

Sind $|N\rangle$ und $|N'\rangle$ zwei beliebige Zustände zur Oszillator-Quantenzahl N , so ist nach (A 4.3) und (A 4.4)

$$\langle N' | R | N \rangle = \langle N' | Q | N \rangle, \quad (\text{A 4.5})$$

also

$$\begin{aligned} \langle N' | T | N \rangle &= \langle N' | \frac{1}{2} (Q + R) | N \rangle \\ &= \langle N' | Q | N \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A 4.6})$$

was zu beweisen war.

Anhang 5: Herleitung der Beziehungen (4.6) und (4.7)

Man kann die Beziehungen (4.6) und (4.7) beweisen, indem man die Vertauschungsbeziehungen (A 1.14) und die Tatsache benutzt, daß ein \mathcal{U}_3 -irreduzibler Raum vom Typ N , (NO) gegeben ist (man verfährt also in einer gewissen Analogie zur bekannten Herleitung der Matrixelemente der Operatoren L_μ).

Wir benennen die gesuchten Matrixelemente vorübergehend durch

$$f_L = \langle L L | T_0 | L L \rangle \quad (L = N, N-2, \dots), \quad (\text{A 5.1})$$

$$g_L = \langle L+2 L+2 | T_2 | L L \rangle \quad (L = N-2, N-4, \dots). \quad (\text{A 5.2})$$

Die f_L sind notwendig reell, da T_0 hermitesch ist. Bedingungen über diese Matrixelemente erhalten wir auf Grund der ersten Gruppe der Vertauschungsrelationen (A 1.14). Wir wählen die Relationen

$$[T_0, T_2] = 0 \quad (\text{A 5.3})$$

$$\text{und} \quad [T_1, T_{-1}] = -\frac{1}{2} L_0 \quad (\text{A 5.4})$$

aus (durch diese Auswahl erreicht man rechnerisch bequeme Bedingungen für die f_L und g_L) und betrachten die beiden aus ihnen folgenden Gleichungen

$$\langle L+2 L+2 | [T_0, T_2] | L L \rangle = 0, \quad (\text{A 5.5})$$

$$\langle L L | [T_1, T_{-1}] | L L \rangle = -\frac{1}{2} L. \quad (\text{A 5.6})$$

Gleichung (A 5.5) ergibt

$$\begin{aligned} &\langle L+2 L+2 | T_0 | L+2 L+2 \rangle \langle L+2 L+2 | T_2 | L L \rangle \\ &- \langle L+2 L+2 | T_2 | L+2 L \rangle \langle L+2 L | T_0 | L L \rangle \\ &- \langle L+2 L+2 | T_2 | L L \rangle \langle L L | T_0 | L L \rangle = 0. \end{aligned} \quad (\text{A 5.7})$$

$\langle L+2 L+2 | T_2 | L+2 L \rangle$ bzw. $\langle L+2 L | T_0 | L L \rangle$ lassen sich in bekannter Weise durch f_{L+2} bzw. g_L ausdrücken; auf diese Weise geht (A 5.7) über in

$$g_L \left\{ f_{L+2} \left(1 - \frac{6}{(L+2)(2L+3)} \right) - f_L \right\} = 0 \quad (\text{A 5.8})$$

$(L = N-2, N-4, \dots)$

Aus Gl. (A 5.6) folgt analog

$$|g_L|^2 \left\{ \frac{2}{L+2} - \frac{6}{(L+1)(L+2)(2L+3)} \right\} - \frac{3}{L} f_L^2 = -\frac{1}{2} L$$

$(L = N-2, N-4, \dots). \quad (\text{A 5.9})$

Um aus (A 5.8) eine Rekursionsformel für f_L zu gewinnen, beweisen wir, daß $g_L \neq 0$ ($L = N-2, N-4, \dots$) gilt. Angenommen, es sei für ein L_1 $g_{L_1} = 0$. Dann ist $\langle L_1+2 M+\tau | T_\tau | L_1 M \rangle = 0$ für beliebige M und τ . Das heißt, die T_τ ergeben, auf Zustände $|L'M\rangle$ mit $L' = L_1, L_1-2, L_1-4, \dots$ angewandt, wieder Linear kombinationen solcher Zustände. Der von den $|L'M\rangle$ mit $L' = L_1, L_1-2, L_1-4, \dots$ aufgespannte Unterraum des betrachteten \mathcal{U}_3 -irreduziblen Raumes ist somit gegenüber den T_τ invariant, damit aber auch gegenüber der Darstellung von \mathcal{U}_3 . Es muß also notwendig $L_1 = N$ sein. Für $L < N$ ist also $g_L \neq 0$, was zu beweisen war.

Aus (A 5.8) folgt also

$$f_{L+2} \left(1 - \frac{6}{(L+2)(2L+3)} \right) - f_L = 0 \quad (\text{A 5.10})$$

$(L = N-2, N-4, \dots)$

Daraus ergibt sich

$$f_L = \frac{L}{2L+3} \cdot \frac{2N+3}{N} f_N \quad (L = N, N-2, \dots). \quad (\text{A 5.11})$$

f_N berechnen wir, indem wir beachten, daß der Zustand $|NN\rangle$ auch dadurch gekennzeichnet werden kann, daß die Operatoren

$$N_\mu = \sum n_{i\mu}, \quad n_{i\mu} = a_{i\mu}^* a_{i,-\mu} \quad (\mu = -1, 0, 1)$$

die Eigenwerte $[N_1, N_0, N_{-1}] = [N, 0, 0]$ annehmen und daß nach (A 1.13), (A 1.12) und (A 1.9)

$$T_0 = \frac{1}{2} \sqrt{6} (N_0 - \frac{1}{3} N) \quad (\text{A 5.12})$$

ist ¹⁶:

$$f_N = \langle N N | T_0 | N N \rangle = - \frac{1}{\sqrt{6}} N. \quad (\text{A 5.13})$$

Aus (A 5.11) folgt damit

$$f_L = - \frac{L}{2L+3} \cdot \frac{2N+3}{\sqrt{6}} \quad (L=N, N-2, \dots), \quad (\text{A 5.14})$$

¹⁶ Aus Gl. (A 5.9) ($g_N=0$ gesetzt) ergibt sich f_N nur bis auf das Vorzeichen.

womit (4.6) gezeigt ist.

$$T_2 | L L \rangle \text{ ist proportional zu } | L+2 L+2 \rangle, \text{ also} \\ g_L | L+2 L+2 \rangle = T_2 | L L \rangle \quad (L=N-2, N-4, \dots). \quad (\text{A 5.15})$$

Wir legen die Phasen der Vektoren $| L L \rangle$ sukzessiv so fest, daß $g_L > 0$ ist. Dann berechnet man aus (A 5.9) und (A 5.14) leicht, daß

$$g_L^2 = \frac{3(L+1)(L+2)}{2(2L+3)(2L+5)} \cdot \frac{(2N+3)^2 - (2L+3)^2}{6} \\ (L=N-2, N-4, \dots) \quad (\text{A 5.16})$$

gilt, womit auch (4.7) bewiesen ist.

Über die Symmetrie-Eigenschaften der reduzierten Dichtematrizen und der natürlichen Spin-Orbitale und Spin-Geminale (der natürlichen Ein- und Zwei-Elektronen-Funktionen)

Von WERNER KUTZELNIGG

Laboratoire de Chimie Quantique, Université de Paris
(Z. Naturforschg. 18 a, 1058—1064 [1963]; eingegangen am 1. Juli 1963)

The density operator (density matrix) of a quantum mechanical system can be decomposed into operators which transform as irreducible representations of the symmetry group in coordinate and spin space. Each of these components has a physical meaning connected with the expectation values of certain operators. The reduced density matrices can be decomposed in a completely analogous way.

The symmetry properties of the total wave function give rise to degeneracies of the eigenvalues of the reduced density matrices. These degeneracies can be removed by requiring that the natural spin orbitals (NSO, defined as the eigenfunctions of the first order density matrix), as well as the natural spin geminals (NSG, the eigenfunctions of the second order density matrix) and their spinless counterparts transform as irreducible representations of the symmetry group and are eigenfunctions of S^2 and S_z .

In many important cases this requirement is compatible with the original definition of the NSO, the NSG etc. e. g., when there is no spatial degeneracy of the total wave function and when the Z-component of the total spin vanishes. When these conditions are not fulfilled an alternative definition of the NSO and the NSG is proposed.

Die von LÖWDIN¹ eingeführten natürlichen Spin-Orbitale (NSO) haben in den letzten Jahren eine besondere Bedeutung erlangt, einerseits, weil sie eine besonders anschauliche Interpretation komplizierter Mehrteilchenwellenfunktionen ermöglichen^{2,3}, zum anderen, weil sie die optimale Konvergenz eines Konfigurationen-Wechselwirkungsansatzes gewährleisten und deshalb die Lösung des quantenmechanischen Mehrteilchenproblems wesentlich vereinfachen können⁴. Es besteht eine enge Beziehung zwischen den *stark besetzten* NSO und den SCF-Orbitalen im Rahmen des Modells der unabhängigen Teil-

chen, derart, daß diese als erste Näherungen für die NSO dienen können⁴. Auf Grund der LÖWDINSCHEN Definition der NSO als Eigenfunktionen der Dichtematrix 1. Ordnung (ρ_1) sind die NSO noch nicht eindeutig definiert, weil diese Dichtematrix entartet sein kann und es im allgemeinen auch ist. Diese Entartung ist wesentlich durch bestimmte Symmetrieforderungen an die Wellenfunktion bestimmt.

Wie COLEMAN⁵ zeigen konnte, folgt aus der Antisymmetrie der Wellenfunktion eines n -Fermionensystems in bezug auf Vertauschung der Elektronen eine zweifache (oder jedenfalls geradzahlige) Ent-

¹ P. O. LÖWDIN, Phys. Rev. **97**, 1509 [1955].

² H. SHULL u. P. O. LÖWDIN, J. Chem. Phys. **30**, 617 [1959].

³ H. SHULL, J. Chem. Phys. **30**, 1405 [1959].

⁴ W. KUTZELNIGG, Theor. Chim. Acta **1**, 327, 343 [1963].

⁵ A. J. COLEMAN, Can. Math. Bull. **4**, 209 [1961].