Eine Bemerkung zu den entarteten Energieniveaus des starren asymmetrischen Kreisels

F. Mönnig

Physikalisches Institut der Universität Freiburg

(Z. Naturforschg. **22 a**, 579—580 [1967]; eingegangen am 2. März 1967)

Während sich die Rotationsenergie eines symmetrischen Kreisels in geschlossener Form angeben läßt, können die Energieniveaus eines asymmetrischen Rotators nur als Lösungen einer Säkulargleichung numerisch berechnet werden. Zu diesem Zweck stellt man gewöhnlich die Energiematrix im Funktionensystem des symmetrischen Kreisels auf und diagonalisiert sie. Einen Überblick über die bisher vertafelten Werte der reduzierten Energie des asymmetrischen Kreisels findet man in einer kürzlich erschienenen Arbeit [1]. Bei sehr hohen Drehimpulsquantenzahlen J kann es vorteilhaft sein, ein Näherungsverfahren zur Berechnung der Energiestufen des Rotators heranzuziehen [2]. Im folgenden wird auf ein Funktionensystem hingewiesen, das für ein solches Näherungsverfahren geeignet zu sein scheint.

Es ist üblich, die Rotationsenergie des starren asymmetrischen Kreisels in der Form [3]

$$W_{J,\tau} = \frac{A+C}{2} J(J+1) + \frac{A-C}{2} E_{J,\tau}(\varkappa)$$

darzustellen. Die reduzierte Energie $E_{J,\tau}$ hängt nur vom Asymmetrieparameter $\varkappa = (2B-A-C)/(A-C)$ ab (A, B und C Rotationskonstanten). Im System der symmetrischen Kreiselfunktionen lassen sich die Matrixelemente von $E(\varkappa)$ schreiben (Repr. II$^{\mathrm{r}}$):

$$(J,K\,|\,E\,|\,J,K) = \varkappa K^2, \tag{1 a}$$

$$(J,K\,|\,E\,|\,J,K\pm 2) = \tfrac{1}{2}\{[J(J+1) - K(K\pm 1)] \cdot [J(J+1) - (K\pm 1)(K\pm 2)]\}^{1/2}. \tag{1 b}$$

Die Nichtdiagonalelemente $(K, K+2)$ können umgeformt werden zu [4]

$$\frac{1}{2} D \left\{1 + \frac{4K+6}{D} + \frac{(K+2)(3K+4)}{D^2}\right\}^{1/2} \tag{2}$$

mit $D = J(J+1) - (K+2)^2$. Für großes J und kleines $|K|$ lassen sich also die Matrixelemente (1 b) näherungsweise ersetzen durch

$$(J,K\,|\,E\,|\,J,K\pm 2) \to \tfrac{1}{2}[J(J+1) - (K\pm 2)^2]. \tag{3}$$

Die vernachlässigten Terme können später mit Hilfe von „Störoperatoren", die sich aus der Entwicklung der Wurzel in (2) ergeben, berücksichtigt werden [5].

In einem der beiden symmetrischen Grenzfälle ist $\varkappa = -1$, so daß für $\varkappa \approx -1$ die zusätzliche Näherung

$$(J,K\,|\,E\,|\,J,K\pm 2) \to \tfrac{1}{2} J(J+1) + \tfrac{1}{2}\varkappa(K\pm 2)^2 \tag{4}$$

gemacht werden kann. Der damit begangene Fehler kann später durch den „Störterm" $-\tfrac{1}{2}(\varkappa+1)(K\pm 2)^2$ wieder korrigiert werden.

(1a) und (4) sind gerade die Matrixelemente des Operators

$$J(J+1)\cos 2\alpha - \varkappa \cos 2\alpha \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\alpha^2} - \varkappa \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\alpha^2} \tag{5}$$

im System der Funktionen $e^{iK\alpha}/(2\pi)^{1/2}$, $K = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, 0 \leqq \alpha \leqq 2\pi$.

Die von (5) erzeugte Matrix hat im Gegensatz zu der des asymmetrischen Kreisels unendlichen Rang. Für hohes J, kleines $|K|$ und $\varkappa \approx -1$ werden aber die Eigenwerte von (5) denen des asymmetrischen Rotators nahekommen. Die Substitution $\cos 2\alpha = 2\cos^2\alpha - 1$ und $\varkappa' = -\varkappa$ führt auf die Eigenwertgleichung [6]

$$\frac{\mathrm{d}^2 U}{\mathrm{d}\alpha^2} + \left[\frac{J(J+1)}{\varkappa'} - \frac{\{E+J(J+1)\}/2\varkappa'}{\cos^2\alpha}\right] U = 0\,, \tag{6}$$

die exakt lösbar ist [7].

Mit $y = \sin^2\alpha$ und $U = (1-y)^{\lambda/2} f(y)$ geht (6) in die hypergeometrische Differentialgleichung

$$y(1-y)\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}y^2} + \left[\frac{1}{2} - (\lambda+1)\,y\right]\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}y} + \tfrac{1}{4}(k^2-\lambda^2)\,f = 0$$

über, wobei

$$\lambda(\lambda-1) = \frac{E+J(J+1)}{2\varkappa'} \quad \text{und} \quad k = \sqrt{\frac{J(J+1)}{\varkappa'}}\,.$$

Die Randbedingungen $U(\pm\tfrac{1}{2}\pi) = 0$ führen auf die Lösungen

$U_{2n} = \cos^\lambda\alpha \cdot F(\lambda+n, -n, \tfrac{1}{2}, \sin^2\alpha)$

mit $\tfrac{1}{2}(\lambda-k) = -n$, $n = 1, 2, \ldots,$

bzw.

$U_{2n+1} = \cos^\lambda\alpha \cdot \sin\alpha \cdot F(\lambda+1+n, -n, \tfrac{3}{2}, \sin^2\alpha)$

mit $\tfrac{1}{2}(\lambda+1-k) = -n$, $n = 1, 2, \ldots$.

[1] H. Dreizler, R. Peter u. H. D. Rudolph, Z. Naturforschg. **21 a**, 2058 [1966].

[2] C. H. Townes u. A. L. Schawlow, Microwave Spectroscopy, McGraw-Hill, New York 1955, S. 90.

[3] M. W. P. Strandberg, Microwave Spectroscopy, Methuen & Co., London 1954.

[4] Stattdessen könnte man auch von der Entwicklung

$$\frac{1}{2} G \left\{1 + \frac{4K}{G} + \frac{(3K+1)(K-1)}{G^2}\right\}^{1/2}$$

mit $G = D+3$ ausgehen.

[5] Man vgl. etwa die Mathieu-Näherung.

[6] Man kann von Gl. (6) übergehen zu

$$\left\{\cos\alpha \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\alpha^2}\cos\alpha + \frac{J(J+1)}{\varkappa'}\cos^2\alpha\right\} U' = \frac{E+J(J+1)}{2\varkappa'} U'$$

mit $U' = U/\cos\alpha$. Der Operator in der geschweiften Klammer ist hermitesch, und die U' bilden ein orthogonales System.

[7] S. Flügge u. H. Marschall, Rechenmethoden der Quantentheorie, Springer-Verlag, Berlin 1952, S. 64.

Die Funktionen F sind hier Polynome in y. Für die Energie ergibt sich

$$E_m(\varkappa') = -J(J+1) + 2\varkappa'\left[\sqrt{\frac{J(J+1)}{\varkappa'}} - m\right]\left[\sqrt{\frac{J(J+1)}{\varkappa'}} - (m+1)\right]; \qquad m = 0, 1, 2, \ldots .$$

Mit $\varkappa' \rightarrow 1$ sollte E in $2K_-^2 - J(J+1)$ übergehen. Setzt man $m = J - K_-$, so kommt man offenbar nahe an diesen Grenzwert heran, also

$$E_{K_-}(\varkappa) = E_{J-K_-}(\varkappa') = -J(J+1) + 2\varkappa'\left[\sqrt{\frac{J(J+1)}{\varkappa'}} - (J-K_-)\right]\cdot\left[\sqrt{\frac{J(J+1)}{\varkappa'}} - (J-K_-+1)\right]$$
$$K_- = 0, 1, 2, \ldots, J. \qquad (7)$$

Gl. (7) ist natürlich nur als ein erster Näherungsschritt in Richtung auf die exakten Eigenwerte des asymmetrischen Kreisels anzusehen. Wie man sieht, können höchstens die entarteten Niveaus approximiert werden, wie das auch in den Näherungen mit harmonischen Oszillatorfunktionen und nach dem Korrespondenzprinzip der Fall ist [2]. Damit wird aber zugleich eine gewisse Schwäche dieser Näherung deutlich. Ausgangspunkt war die Bedingung $|K| \ll J$. Andererseits sind die Niveaus mit kleinem K_- bei größerer Asymmetrie noch aufgespalten und fallen erst für mittlere K_--Werte zusammen. Es ist also zu erwarten, daß gerade die Eigenwerte mit mittlerem K_- am besten wiedergegeben werden.

Niveau	$E(\varkappa)$ nach Formel (7)	$E(\varkappa)$ nach strenger Diagonalisierung	$E(\varkappa)$ für $\varkappa = -1$: $2K^2 - J(J+1)$
$15_{15,0-1}$	210,61	210,76	210
$15_{14,1-2}$	155,42	154,23	152
$15_{13,2-3}$	103,83	101,60	98
$15_{12,3-4}$	55,84	52,87	48
$15_{11,4-5}$	11,46	8,05	2
$15_{10,5-6}$	− 29,33	− 32,88	− 40
$15_{9,6-7}$	− 66,52	− 69,90	− 78
$15_{8,7-8}$	−100,11	−103,01	−112
$15_{7,8-9}$	−130,10	−132,20	−142
$15_{6,9-10}$	−156,48	−157,48	−168
$15_{5,10-11}$	−179,27	−178,80	−190
$15_{4,11-12}$	−198,46	−196,04 −196,17	−208
$15_{3,12-13}$	−214,05	−208,52 −209,91	−222
$15_{2,13-14}$	−226,04	−216,02 −221,57	−232
$15_{1,14-15}$	−234,44	−222,99 −233,59	−238
$15_{0,15}$	−239,21	−233,68	−240

Tab. 1. Eigenwerte des asymmetrischen Kreisels für $J = 15$ und $\varkappa = -0{,}9$.

Die nach Formel (7) für $J = 15$, $\varkappa = -0{,}9$ berechneten Rotationsniveaus der Tab. 1 bestätigen diese Erwartung. Danach werden die gerade nicht mehr aufgespaltenen Niveaus mit mittlerem K_- verhältnismäßig gut angenähert, wenn man die Abweichung von $E(\varkappa)$ von den Werten des symmetrischen Grenzfalles $\varkappa = -1$ berücksichtigt.

Durch Hinzunahme geeigneter Korrekturoperatoren könnte man nun die Energiematrix des asymmetrischen Kreisels besser approximieren und mit Hilfe einer Störungsrechnung die Eigenwerte schrittweise verbessern. Die Störoperatoren, die in (5) an erster Stelle zu berücksichtigen wären, sind vom Typ

$$\cos 2\alpha \frac{d^2}{d\alpha^2} \quad \text{und} \quad \sin 2\alpha \frac{d}{d\alpha}.$$

Der mathematische Aufwand zur Berechnung der Matrixelemente dieser und der zusätzlichen Korrekturoperatoren dürfte allerdings nicht unerheblich sein.

Herrn Dr. H. Dreizler und Herrn Dr. H. D. Rudolph danke ich herzlich für das Interesse an dieser Arbeit und für die kritische Durchsicht des Manuskripts, der Deutschen Forschungsgemeinschaft für finanzielle Hilfe.