

vergrößerung) sowie Ableseunsicherheit durch kleines Signal-Rausch-Verhältnis (z. B. bei  $H_0 = 7,05$  kOe oberhalb  $-20^\circ\text{C}$  schlechter als 1 : 1). Unterhalb etwa  $-100^\circ\text{C}$  zeigt DPPH eine langsamere Signalvergrößerung als es nach Gl. (5) zu erwarten ist. Neben der wachsenden Bedeutung von Gliedern höherer Ordnung in Gl. (5 b) könnte auch eine Änderung der  $I - S$ -Wechselwirkung auftreten, denn auch

das Verhalten der Spin-Gitter-Relaxationszeit in Abhängigkeit von  $H_0$  ändert sich beim Übergang zu Temperaturen unterhalb  $-100^\circ\text{C}$ <sup>17</sup>.

Herrn Prof. Dr. H. O. KNESER danke ich für die stete Förderung der Arbeit, Herrn Dr. F. NOACK für nützliche Diskussionen. Die Deutsche Forschungsgemeinschaft half mit Sachmitteln.

## Eine Lösungstheorie für Mehrteilchensysteme mit Spin

H. NÄPFEL

Institut für Theoretische Physik der Universität Erlangen-Nürnberg

(Z. Naturforsch. 23 a, 562—578 [1968]; eingegangen am 11. Januar 1968)

A system of interacting particles is treated by the methods of quantum mechanics. Among the variables the three Euler angles are introduced which give the orientation of the system as a whole in an inertial frame of reference. This allows an expansion of the Schrödinger eigenfunctions in terms of elements of irreducible representations of the rotation group. This method, originally suggested by Wigner, is extended to include particles with spin. Two and three particle systems, one particle having spin 1/2, the rest being spinless, are treated explicitly. If the two spinless particles are regarded as the core of a nucleus, the spin 1/2 particle as an extra nucleon, one can compare this "three particle nuclear model" with other nuclear models. It permits calculations of Nilsson diagrams and, compared with other models, a more straightforward adjustment of parameters to empirical data.

### I. Eine Lösungstheorie für drehinvariante Systeme in der Quantenmechanik

#### 1. Invarianzen des Hamilton-Operators

Für die Lösung eines Problems sehr wichtige Eigenschaften sind die darin vorliegenden Symmetrien. In der Quantenmechanik versteht man unter der Symmetrie eines Systems die Invarianz seines Hamilton-Operators gegenüber Transformationen, die bestimmte Parameter oder Koordinaten des Systems ändern. Sind die Symmetrien bekannt, so erhält man aus der Darstellungstheorie der entsprechenden Transformationsgruppen ein Ordnungsschema für die Eigenzustände sowie Aussagen über ihre Transformationseigenschaften. Dies ist bereits möglich, bevor die Schrödinger-Gleichung gelöst ist.

Im folgenden betrachten wir ein System von Massenpunkten, in dem innere Kräfte wirken. Dieses System denken wir uns isoliert in den homogenen und isotropen Raum gesetzt. Dann bleibt die Form des Hamilton-Operators erhalten, wenn wir das System verschieben oder drehen. Ferner besteht Invarianz des Hamilton-Operators gegenüber Spiegelung des Systems an einem beliebigen Punkt des

Raumes. Diese Invarianzen des Hamilton-Operators nennen wir die „äußeren Symmetrien“ des Systems.

Zu diesen kommen gegebenenfalls „innere Symmetrien“, die dadurch entstehen, daß in einem System mehrere gleiche Teilchen enthalten sind. So ist zum Beispiel der Hamilton-Operator eines Atoms invariant gegenüber Austausch von Elektronen.

Die äußeren Symmetrien bieten dann die wirksamsten Klassifizierungsmöglichkeiten für die Eigenzustände, wenn ein System aus wenigen Massenpunkten aufgebaut wird. Mit solchen Systemen hat die Atom- und Kernphysik zu tun. Die Translationsinvarianz führt zu einer Zustandsmannigfaltigkeit, welche die kräftefreie Bewegung des Schwerpunktes beschreibt. Aus der Drehinvarianz ergibt sich für die Eigenzustände ein physikalisch interessantes Ordnungsschema, in dem der Begriff „Drehimpuls“ eine zentrale Rolle spielt, und in welchem anschließend noch weitere Symmetrien des Systems berücksichtigt werden können.

Wie sich die Drehinvarianz bei der Lösung der Schrödinger-Gleichung verwenden läßt, ist, verglichen mit der Translationsinvarianz, nicht so leicht zu übersehen. Eine Lösungstheorie, welche bei beliebi-



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 digitized 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.

gen inneren Kräften anwendbar ist, findet sich bei WIGNER<sup>1</sup>. Physikalisch betrachtet führt sie zu einer Separation einer Rotationsbewegung des Gesamtsystems, mathematisch zu einer Reduktion der Anzahl der Variablen um drei.

Wir erweitern diese Lösungstheorie durch Einführung von Spinkoordinaten und wenden sie an auf ein System von drei Teilchen, in welchem ein Teilchen den Spin 1/2 trägt.

## 2. Beschreibung eines Systems durch Koordinaten

### a) Reduziertes System

In den Schwerpunkt unseres Systems von Massenpunkten legen wir ein raumfestes Achsenkreuz  $XYZ$ . Die Lagen der Massenpunkte  $m_1, \dots, m_N$  beschreiben wir durch die Vektoren  $\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_N$ , die wegen  $\sum_{i=1}^N m_i \mathbf{s}_i = 0$  nicht unabhängig sind. Die einfachste Möglichkeit, unabhängige Koordinaten einzuführen, ist die, daß man  $N-1$  Vektoren aus den Vektoren  $\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_N$  auswählt und den verbleibenden Vektor mit Hilfe der Schwerpunktsrelation ausdrückt. Wenn man mit diesem Satz von Koordinaten die kinetische und potentielle Energie des Systems,  $T$  und  $U$ , berechnet, so erhält man für  $T$  eine homogene quadratische Form der entsprechenden Impulse  $\mathbf{p}_i$ , in der auch gemischte Terme  $\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_k$  auftreten, und für  $U$  einen mehr oder weniger komplizierten Ausdruck.

Ob und auf welche Weise sich die Zusatzterme  $\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_k$  bewältigen lassen, hängt ganz von der Art des Systems und den darin vorkommenden Massenverhältnissen ab. Gelegentlich ist es möglich, die Zusatzterme wegen ihrer kleinen Koeffizienten durch Näherungsmethoden zu berücksichtigen. Bei etwa gleich großen Massen, wie sie in Kernmodellen auftreten, empfiehlt es sich jedoch, Koordinaten einzuführen, bei denen die gemischten Terme wegfallen. Das mathematische Problem wird dann in die potentielle Energie  $U$  verlagert. Da es verhältnismäßig einfach ist, physikalisch überschaubare Näherungsmethoden für einen komplizierten Ausdruck der potentiellen Energie zu entwickeln, besteht Hoffnung, im Rahmen einer Störungsrechnung zu einer brauchbaren Lösung zu gelangen. Dies wird gerade in der Kernphysik zutreffen, da die ungenügende Kenntnis der Kernkräfte zu mathematisch wirksameren Näherungen berechtigt.

Für ein System aus zwei Massenpunkten sind die Koordinaten, welche die von uns gestellten Bedingungen erfüllen, allgemein bekannt. Der Abstandsvektor  $\mathbf{t}_1$  zwischen den Massenpunkten  $m_1$  und  $m_2$  gibt der kinetischen Energie die Form:

$$T = \frac{1}{2 \mu_1} \mathbf{p}_1^2;$$

$\mathbf{p}_1$  ist der zu  $\mathbf{t}_1$  kanonisch konjugierte Impuls und  $\mu_1 = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  die sogen. reduzierte Masse.

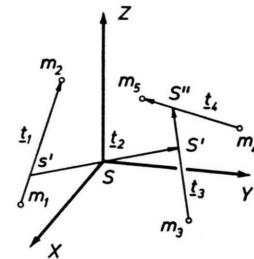


Abb. 1. Wahres System.

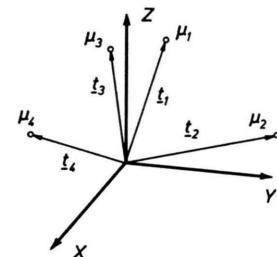


Abb. 2. Reduziertes System (Ersatzbild).

Für ein größeres System findet man Koordinaten mit entsprechenden Eigenschaften nach folgender Methode: Wir gehen aus von den Massenpunkten  $m_1$  und  $m_2$ , deren Abstandsvektor  $\mathbf{t}_1$  von  $m_1$  nach  $m_2$  gerichtet sei. Ein weiterer Vektor  $\mathbf{t}_2$  soll vom Teilschwerpunkt  $s'$  der Massenpunkte  $m_1$  und  $m_2$  zum Teilschwerpunkt  $S'$  der übrigen Massenpunkte zeigen. Es kann dann so fortgefahrene werden, daß wir den Massenpunkt  $m_3$  mit dem Teilschwerpunkt  $S''$  des aus  $N-3$  Massenpunkten bestehenden Restsystems durch den Vektor  $\mathbf{t}_3$  verbinden, usw. Wir gelangen auf diese Weise zu einem Ausdruck für  $T$ , der formal mit demjenigen unabhängiger Einzelteilchen mit den Massen  $\mu_1, \dots, \mu_{N-1}$  übereinstimmt, welche durch die Ortsvektoren  $\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_{N-1}$  in unserem bisherigen raumfesten Koordinatensystem beschrieben werden:

$$T = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2 \mu_i} \mathbf{p}_i^2.$$

<sup>1</sup> E. P. WIGNER, Group Theory, Academic Press, New York 1959.

Das hinsichtlich der kinetischen Energie zum wahren System (Abb. 1) äquivalente System (Abb. 2), welches in unserem Beispiel durch die Massenpunkte

$$\begin{aligned}\mu_1 &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, & \mu_2 &= \frac{(m_1 + m_2) m'}{m_1 + m_2 + m'}, \\ \mu_3 &= \frac{m_3 m''}{m_3 + m''}, & \mu_4 &= \frac{m_4 m_5}{m_4 + m_5}\end{aligned}$$

mit  $m' = m_3 + m_4 + m_5$  und  $m'' = m_4 + m_5$  aufgebaut wird, heiße „reduziertes System“; die Größen  $\mu_i$  nennen wir „reduzierte Massen“.

Wir werden im folgenden nur noch dieses reduzierte System benützen, müssen aber beachten, daß bei der Aufstellung des Ausdrückes für die potentielle Energie die Abstände zwischen den Massenpunkten dem wahren System zu entnehmen sind.

### b) Systemgebundenes Koordinatensystem

Wenn ein starres Gebilde vorliegen würde, dann ließe sich seine Lage in einem raumfesten Koordinatensystem  $XYZ$  allein durch die Vektoren  $\mathbf{t}_1$  und  $\mathbf{t}_2$  angeben. Mit diesen zwei Vektoren können wir ein Koordinatensystem, welches mit dem System verbunden bleibt, auch dann definieren, wenn seine innere Struktur veränderlich ist. Wir nennen dieses Koordinatensystem, das beim starren Körper als körperfestes Koordinatensystem bezeichnet wird, im allgemeinen Falle variabler Konfiguration „systemgebundenes Koordinatensystem“.

Seine genaue Definition ist die folgende: Ursprung des raumfesten Koordinatensystems  $XYZ$  und Ursprung des systemgebundenen Koordinatensystems

$X'Y'Z'$  sollen zusammenfallen. Die  $Z'$ -Achse habe die Richtung von  $\mathbf{t}_1$ ; die  $X'$ -Achse soll in der Ebene der Vektoren  $\mathbf{t}_1$  und  $\mathbf{t}_2$  liegen, und zwar so, daß  $\mathbf{t}_2$  eine positive  $X'$ -Komponente aufweist.

Die Lage des systemgebundenen Koordinatensystems  $X'Y'Z'$  ist bestimmt durch die Richtung der Vektoren  $\mathbf{t}_1$  und  $\mathbf{t}_2$ , die man zunächst durch ihre Azimut- und Polarwinkel, nämlich  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$  und  $\vartheta_1$ ,  $\vartheta_2$ , darstellen kann. Statt dieser Größen werden im folgenden die drei Eulerschen Winkel  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  zur Orientierung des Koordinatensystems und als vierte Größe der Winkel  $u$  zwischen  $\mathbf{t}_1$  und  $\mathbf{t}_2$  eingeführt. Der Übergang zu dem neuen Satz von Koordinaten ist abgeschlossen, wenn nach obiger Substitution alle weiteren Koordinaten, die zur Fixierung des Systems nötig sind, auf das  $X'Y'Z'$ -System bezogen werden. Wir verwenden für diese Koordinaten sphärische Polarkoordinaten  $t'_i$ ,  $\vartheta'_i$ ,  $\varphi'_i$ ; die Striche deuten an, daß die Lagen der Massenpunkte relativ zum  $X'Y'Z'$ -System gemessen werden (siehe Beispiel Abb. 3).

Das Ergebnis dieser Koordinatenwahl ist eine Teilung in systemeigene oder „innere“ Koordinaten, welche die Gestalt des Systems angeben, und in „äußere“ Koordinaten, welche das Gesamtsystem orientieren und mit dem Inertialsystem verbinden.

Bei der Definition des Koordinatensystems  $X'Y'Z'$  werden die beiden Massenpunkte  $m_1$  und  $m_2$  ausgezeichnet; ein solches Vorgehen wird physikalisch dann nahegelegt, wenn sich zwei Bausteine hierzu vorteilhaft anbieten. Beispiele dafür finden sich im Bereich der Kern-, Atom- und Molekülephysik.

Die von uns dargestellte Einführung der Koordinaten  $\mathbf{t}_1$  und  $\mathbf{t}_2$  ist vollständig bei einem System mit drei Teilchen. Da sich von hier aus durch Erweiterung der Hamilton-Operator von größeren Systemen in einfacher Weise gewinnen läßt, steht die Untersuchung des Drei-Teilchensystems stellvertretend für Systeme mit mehreren Teilchen, was seine ausführliche Behandlung rechtfertigt.

### 3. Aufstellung der Schrödinger-Gleichung

Wie sich der Hamilton-Operator für ein System von mehreren Teilchen gewinnen läßt, wird im Grundprinzip in <sup>2</sup> gesagt: als erstes hat man die klassische Hamilton-Funktion in den gewählten Koordinaten und den dazu gehörenden Impulsen auf-

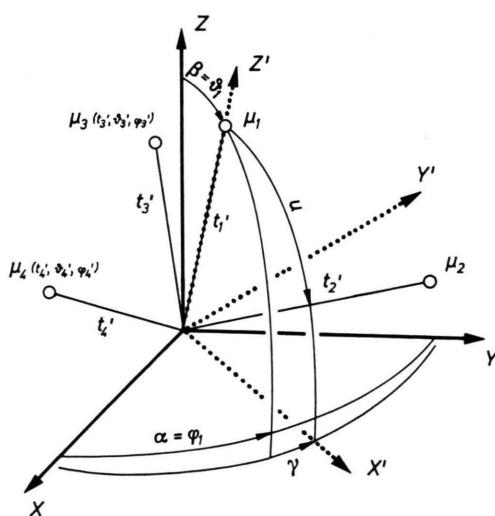


Abb. 3. Definition von inneren und äußeren Koordinaten.

<sup>2</sup> H. NÄPFEL, H. RUDER u. H. VOLZ, Z. Naturforsch. **23a**, 199 [1968].

zustellen; in einem zweiten Schritt muß die Hamilton-Funktion in den Hamilton-Operator übersetzt werden.

Im vorliegenden Fall sieht der erste Schritt unseres angegebenen Verfahrens folgendermaßen aus:

In den in Kap. I, Abs. 2 a, gegebenen Ausdrücken für die kinetische und potentielle Energie

$$T = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2\mu_i} \mathbf{p}_i^2 \quad \text{und} \quad U = U(\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_{N-1}) \quad (1)$$

führen wir zunächst die sphärischen Polarkoordinaten  $t_i, \vartheta_i, \varphi_i$  mit den entsprechenden kanonisch konjugierten Impulsen  $p_{t_i}, p_{\vartheta_i}, p_{\varphi_i}$  ein:

$$T = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2\mu_i} \left[ p_{t_i}^2 + \frac{1}{t_i^2} \left( p_{\vartheta_i}^2 + \frac{1}{\sin^2 \vartheta_i} p_{\varphi_i}^2 \right) \right], \quad (2)$$

$$U = U(t_1, \dots, t_{N-1}, \vartheta_1, \dots, \vartheta_{N-1}, \varphi_1, \dots, \varphi_{N-1}).$$

Diese Schreibweise erleichtert die Einführung der Variablen von Kap. I, Abs. 2 b, wesentlich, da  $T$  die Winkelkoordinaten und die entsprechenden Impulse nur in der Form der Drehimpulsquadrat  $\mathbf{l}_i^2$  der Massenpunkte  $\mu_i$  enthält:

$$T = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2\mu_i} \left( p_{t_i}^2 + \frac{1}{t_i^2} \mathbf{l}_i^2 \right)$$

$$\text{mit} \quad \mathbf{l}_i^2 = p_{\vartheta_i}^2 + \frac{1}{\sin^2 \vartheta_i} p_{\varphi_i}^2.$$

Die potentielle Energie, die bei der Umrechnung keine Schwierigkeiten bereitet, wird im folgenden nicht näher betrachtet.

Die Substitution der Radialkoordinaten  $t_i$  und der Impulse  $p_{t_i}$  ist gegeben durch:

$$t_i \rightarrow t'_i = t_i \quad \text{und} \quad p_{t_i} \rightarrow p_{t'_i} = p_{t_i}.$$

Zur Substitution der Winkel stellen wir die Drehimpulse  $\mathbf{l}_i$  durch die Komponenten  $l_{iX'}, l_{iY'}, l_{iZ'}$  bezüglich des systemgebundenen Koordinatensystems  $X'Y'Z'$  dar, welche Funktionen der Winkel  $\alpha, \beta, \gamma, u, \vartheta_3', \dots, \vartheta_{N-1}', \varphi_3', \dots, \varphi_{N-1}'$  und der entsprechenden Impulse sind, und nach unserem in 2 angegebenen Verfahren bestimmt werden können. Wegen

$$\mathbf{l}_i^2 = l_{iX'}^2 + l_{iY'}^2 + l_{iZ'}^2 = \mathbf{l}'_i^2$$

lautet dann der Ausdruck für die kinetische Energie

$$T = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2\mu_i} \left( p_{t'_i}^2 + \frac{1}{t'_i^2} \mathbf{l}'_i^2 \right). \quad (3)$$

Bei den von uns gewählten Koordinaten sind die Drehimpulse  $\mathbf{l}'_i$  mit  $2 < i \leq N-1$  und der Gesamt-drehimpuls  $\mathbf{l}' = \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{l}'_i$  einfache Ausdrücke,  $\mathbf{l}'_2$  und

vor allem  $\mathbf{l}'_1$  kompliziertere Größen. Es empfiehlt sich daher, mit Hilfe der Beziehung  $\mathbf{l}'_i = \mathbf{l}' - \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{l}'_i$  den Drehimpuls  $\mathbf{l}'_1$  zu eliminieren und hierdurch den Gesamtdrehimpuls in (3) einzuführen.

Auf diese Weise erhalten wir für die kinetische Energie eine in den Impulsen homogene quadratische Form, wie sie für die Schrödingersche Übersetzungsvorschrift benötigt wird.

#### 4. Lösungstheorie

##### a) Transformationsverhalten der Eigenfunktionen

Wir betrachten ganz allgemein zwei gegeneinander verdrehte Koordinatensysteme  $XYZ$  und  $X'Y'Z'$ , deren gegenseitige Lage eindeutig durch die Euler-schen Winkel  $\alpha, \beta, \gamma$  bestimmt ist. Die Koordinaten  $q$  im  $XYZ$ -System sind mit Hilfe einer Matrix  $R$ , welche von den Eulerschen Winkeln abhängt, den Koordinaten  $q'$  im  $X'Y'Z'$ -System zugeordnet. Eine Eigenfunktion  $\Psi(q)$ , deren Variable im  $XYZ$ -System definiert sind, erscheint im  $X'Y'Z'$ -System als neue Funktion  $\Psi'(q')$ , so daß die Gleichheit der Funktionswerte gilt:  $\Psi'(q') = \Psi(q)$ . Das gibt Anlaß, einen Drehoperator  $D_R$  zu definieren, der im  $X'Y'Z'$ -System aus  $\Psi'(q')$  die Funktion  $\Psi(q')$  erzeugt:  $D_R \Psi'(q') = \Psi(q')$ . Es folgt dann:

$$\Psi(q') = D_R \Psi(q).$$

Bei Drehinvarianz des Hamilton-Operators ist dieser mit dem Drehoperator  $D_R$  vertauschbar.

Ein Kennzeichen drehinvarianter Systeme ist die  $(2j+1)$ -fache Entartung der Energieniveaus. Die  $2j+1$  Eigenfunktionen sind durch die Quantenzahlen  $j$  und  $\mu$  des Gesamtdrehimpulses und seiner Z-Komponente klassifiziert. Da der Satz der Eigenfunktionen des Hamilton-Operators vollständig ist, kann jede Funktion  $D_R \Psi_{j\mu}(q)$  nach den  $2j+1$  Eigenfunktionen entwickelt werden:

$$D_R \Psi_{j\mu}(q) = \sum_{\nu=-j}^j D_{\nu\mu}^j(R) \Psi_{j\nu}(q), \quad \mu = -j, \dots, j. \quad (4)$$

Die Koeffizienten  $D_{\mu\nu}^j(R)$  sind die Matrixelemente der irreduziblen Darstellung der dreidimensionalen Drehgruppe. Sie lassen sich aus gruppentheoretischen Überlegungen bestimmen (WIGNER<sup>1</sup>, ROSE<sup>3</sup>) und dürfen als bekannte Größen betrachtet werden.

<sup>1</sup> M. E. ROSE, Elementary Theory of Angular Momentum, John Wiley & Sons, New York 1963.

## b) Interpretation der Transformation

Aus den Gln. (4) erhalten wir durch Auflösen nach den Funktionen  $\Psi_{j\mu}(q)$

$$\Psi_{j\mu}(q) = \sum_{\nu=-j}^j D_{\mu\nu}^j(R) * \Psi_{j\nu}(q'), \mu = -j, \dots, j. \quad (5)$$

Wenn wir darin die Variablengruppen  $q$  bzw.  $q'$  als Koordinaten in ein und demselben Koordinatensystem (XYZ) auffassen, so besagt Gl. (5), daß wir aus der Kenntnis der Funktionswerte  $\Psi_{j\nu}(q')$  der Stelle  $q'$  die Größe  $\Psi_{j\mu}(q)$  an all den Stellen angeben können, die durch die Transformation  $R$  von  $q'$  aus erreicht werden. Diejenige Variablengesamtheit aus der Variablengruppe  $q'$ , die es erlaubt,  $\Psi_{j\mu}(q)$  im gesamten Definitionsbereich gemäß (5) zu berechnen, heißt nach WIGNER „Grundgebiet“ und sei mit  $\{q_0'\}$  bezeichnet.

Werden dagegen die Koordinaten  $q$  bzw.  $q'$  auf das XYZ-System bzw.  $X'Y'Z'$ -System bezogen, so können wir die Funktionen  $\Psi_{j\nu}(q')$  in (5) als Eigenfunktionen auffassen, welche das physikalische System vom  $X'Y'Z'$ -System aus beschreiben; dann sind sie auch Eigenfunktionen zu den Drehimpulsoperatoren bezüglich der Koordinatenachsen des  $X'Y'Z'$ -Systems. Um das zu verdeutlichen, ersetzen wir in (5) das Symbol  $\Psi_{j\nu}(q')$  durch  $\varphi_{j\nu}(q')$ :

$$\Psi_{j\mu}(q) = \sum_{\nu=-j}^j D_{\mu\nu}^j(R) * \varphi_{j\nu}(q'), \mu = -j, \dots, j. \quad (6)$$

Unser Ziel ist die Angabe aller Funktionswerte  $\Psi_{j\mu}(q)$  im XYZ-System. Dazu genügt es, die  $2j+1$  Funktionswerte  $\varphi_{j\nu}(q_0')$  eines Teils der Variablengruppe  $q'$ , der gerade die Größe des Grundgebietes ausmacht, zu kennen.

Die Variablen der Grundgebiete lassen sich leicht angeben. Die in Kap. I, Abs. 2 b, eingeführten inneren Koordinaten stellen gerade die Variablengesamtheit  $\{q_0'\}$  dar, welche zusammen mit allen möglichen Drehungen des Koordinatensystems  $X'Y'Z'$  alle Konfigurationen des Systems beschreibt. Wir nennen deshalb die Funktionen  $\varphi_{j\nu}(q_0')$  „innere Funktionen“.

Die Eigenfunktion  $\Psi_{j\mu}(q)$  enthält dann als Argumente genau die Koordinaten, welche wir in Kap. I, Abs. 2, zur Beschreibung drehinvarianter Systeme gewählt haben. Wir kommen somit für die zu betrachtenden Systeme zu einem Lösungsansatz der Form

$$\Psi_{j\mu}(q) = \sum_{\nu=-j}^j \varphi_{j\nu}(q_0') D_{\mu\nu}^j(\alpha \beta \gamma) *. \quad (7)$$

Der Ansatz ist gekennzeichnet durch die Quantenzahlen  $j$  bzw.  $\mu$  des Gesamtdrehimpulses bzw. seiner Z-Komponente; die Indizes  $\nu = -j, \dots, j$  sind die Quantenzahlen der Z'-Komponente des Gesamtdrehimpulses. Da die noch zu bestimmenden inneren Funktionen davon unabhängig sind, wie das System im Raum orientiert ist, entspricht dieser Ansatz einer Separation in innere Bewegung und Rotationsbewegung des Gesamtsystems.

## c) Erweiterung des Lösungsansatzes auf nicht-geometrische Koordinaten

Vorerst enthält unser Lösungsansatz nur die Lagekoordinaten der Massenpunkte als Argumente. Da sich die Bausteine von Systemen im atomaren Bereich wegen des Spins nicht wie einfache Massenpunkte verhalten, sind unsere bisherigen Betrachtungen noch unvollständig. Wie die zugehörigen „nichtgeometrischen“ Koordinaten in Ansatz (7) zu berücksichtigen sind, zeigen die folgenden Überlegungen.

Wir gehen von dem unter b) gewonnenen Ergebnis aus, daß nämlich im Lösungsansatz (7) die Entwicklungskoeffizienten oder inneren Funktionen  $\varphi_{j\nu}$  Eigenfunktionen im  $X'Y'Z'$ -System darstellen; nur der Variabilitätsbereich der Argumente ist auf  $\{q_0'\}$  eingeschränkt. Wegen unserer Interpretation erscheinen die nichtgeometrischen Koordinaten als zusätzliche Argumente der inneren Funktionen; vor allem finden sich spezielle Eigenschaften der Eigenfunktion  $\Psi_{j\mu}$  bei den inneren Funktionen  $\varphi_{j\nu}$  wieder [Gl. (6)]. Falls zum Beispiel die Eigenfunktion ein Produkt aus Orts- und Spinfunktion (letztere in Spinorform) ist, so gilt dies auch für die inneren Funktionen. Bei der Übertragung auf die Funktionen  $\varphi_{j\nu}$  müssen wir nur beachten, wie sich solche Eigenschaften beim Übergang zum systemgebundenen Koordinatensystem transformieren.

Wenn im systemgebundenen Koordinatensystem Spinoren  $\chi'(s, \sigma')$  auftreten, dann gehen diese aus den Spinoren  $\chi(s, \sigma)$  des raumfesten Systems gemäß den Transformationsgleichungen für Drehimpuls-eigenfunktionen (4)

$$\chi'(s, \sigma') = \sum_{\sigma=-s}^s D_{\sigma\sigma'}^s(\alpha \beta \gamma) \chi(s, \sigma), \sigma' = -s, \dots, s$$

hervor; hier sind die Größen  $s$  und  $\sigma$  bzw.  $\sigma'$  die Quantenzahlen des Gesamtspins und seiner Z- bzw. Z'-Komponente. In den inneren Funktionen erscheinen daher die Eulerschen Winkel als Argumente der Matrixelemente  $D_{\sigma\sigma'}^s$ .

Da unser Lösungsansatz eine Separation der Orientierung des Systems, also der Eulerschen Winkel zum Ziel hat, müssen die Größen  $D_{\sigma\sigma'}^s$  den Matrixelementen  $D_{\mu\nu}^{j*}$  zugeschlagen werden, so daß die Wellenfunktion  $\Psi_{j\mu}$  nach allen möglichen Produkten  $D_{\sigma\sigma'}^s \cdot D_{\mu\nu}^{j*}$  entwickelt wird. Einzelheiten hierzu werden zwei Anwendungen dieser Lösungstheorie auf Systeme mit einem Spin-1/2-Teilchen bringen.

#### d) Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung

Gehen wir mit dem oben gewonnenen Lösungsansatz in die Schrödinger-Gleichung ein, so zerfällt diese wegen der linearen Unabhängigkeit der  $D_{\sigma\sigma'}^s$ ,  $D_{\mu\nu}^{j*}$  in ein System von Differentialgleichungen in den inneren Koordinaten, welches die Funktionen  $\varphi_{j\mu}$  miteinander verkoppelt. Wir werden dieses Differentialgleichungssystem nicht allgemein diskutieren, sondern beschränken uns darauf, die Grundzüge der Behandlung größerer Systeme am Drei-Teilchen-System zu erläutern.

## II. Anwendung der Lösungstheorie auf Systeme mit zwei und drei Teilchen

Im Zwei-Teilchensystem sei der Massenpunkt  $m_2$ , im Drei-Teilchensystem der Massenpunkt  $m_3$  mit einem Spin  $s = 1/2$  versehen.

Das Zwei-Teilchensystem soll die Anwendung der von uns entwickelten Lösungstheorie erläutern und kann als Modell des Wasserstoffatoms betrachtet werden, wenn die Massenpunkte  $m_1$  und  $m_2$  Proton und Elektron darstellen; dabei wird die Spin-Bahn-Wechselwirkung des Elektrons mitgenommen. Wir führen die Behandlung dieses Systems etwas ausführlicher durch, damit wir uns im Fall des Drei-Teilchensystems kürzer fassen können. Eine entsprechende Lösungstheorie ohne Berücksichtigung des Spins ist bei WIGNER<sup>1</sup> zu finden.

Das Drei-Teilchensystem wird zunächst ohne spezielle Annahmen über die Wechselwirkung der Massenpunkte behandelt. In Kap. III dient es dann als Modell für gewisse Atomkerne, die man sich aus Rumpf und Außenukleon aufgebaut denkt.

### 1. Zwei-Teilchensystem

Für  $N = 2$  lautet der Hamilton-Operator in den von uns eingeführten Koordinaten:  $H = H_0 + H_{\text{SB}}$ ; darin ist

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \left[ \frac{\partial^2}{\partial t_1'^2} + \frac{2}{t_1'} \frac{\partial}{\partial t_1'} + \frac{1}{t_1'^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + \cot \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\sin^2 \beta} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right) \right] - \frac{e^2}{t_1'}$$

und der Term  $H_{\text{SB}}$  beschreibt die Spin-Bahn-Wechselwirkung.

Nach unserer Lösungstheorie sind die Eigenzustände des Systems primär gekennzeichnet durch die halbzahligen Quantenzahlen  $j$  und  $\mu$  des Gesamtdrehimpulsoperators und seiner  $Z$ -Komponente. Der Lösungsansatz hat die Gestalt:

$$\Psi_{j\mu} = \sum_{\sigma=-j}^j \varphi_{j\sigma}(t_1'; s = \frac{1}{2}, \sigma' = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) D_{\mu\nu}^j(\alpha \beta \gamma)^*.$$

Die Argumente der inneren Funktionen  $\varphi_{j\sigma}$  sind die Radialkoordinate  $t_1'$ , sowie die Spinkoordinaten  $s$  und  $\sigma'$ . Letztere sind die Quantenzahlen des Spinoperators  $S'$  und seiner  $Z'$ -Komponente  $S_z'$  im systemgebundenen Koordinatensystem  $X'Y'Z'$ .

Im folgenden wird  $H_0$  als ungestörter Hamilton-Operator,  $H_{\text{SB}}$  als Störoperator betrachtet. Da in  $H_0$  der Spinoperator nicht vorkommt, sind die Funktionen  $\varphi_{j\sigma}$  in die Radialfunktionen  $R_{j\sigma}(t_1')$  und die Spinfunktionen  $c_{1j\sigma} \chi'(s = \frac{1}{2}, \sigma' = \frac{1}{2}) + c_{2j\sigma} \chi'(s = \frac{1}{2}, \sigma' = -\frac{1}{2})$  zerlegbar. Die Spinoren  $\chi'(\frac{1}{2}\frac{1}{2})$  und  $\chi'(\frac{1}{2}-\frac{1}{2})$  sind Eigenzustände der Spinoperatoren  $S_z'$  und  $S'^2$ ; für die Konstanten  $c_{1j\sigma}$  und  $c_{2j\sigma}$  folgt aus der Normierung von  $\Psi_{j\mu}$ :  $\sum_{\sigma} |c_{1j\sigma}|^2 + |c_{2j\sigma}|^2 = 1$ . Dann erhalten wir für die zweikomponentigen inneren Funktionen als Ansatz:

$$\varphi_{j\sigma} = c_{1j\sigma} R_{j\sigma}(t_1') \chi'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) + c_{2j\sigma} R_{j\sigma}(t_1') \chi'(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}).$$

Wählen wir für die Spinoren des raumfesten Systems  $XYZ$  die übliche Darstellung  $\chi(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  und  $\chi(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , und schreiben wir  $R_{1j\sigma}$  bzw.  $R_{2j\sigma}$  für  $c_{1j\sigma} R_{j\sigma}$  bzw.  $c_{2j\sigma} R_{j\sigma}$ , so nehmen die inneren Funk-

tionen die Gestalt an:

$$\varphi_{j\nu} = R_{1j\nu}(t_1') \begin{pmatrix} D_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) \\ D_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) \end{pmatrix} + R_{2j\nu}(t_1') \begin{pmatrix} D_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) \\ D_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) \end{pmatrix}.$$

Die Anzahl der  $2(2j+1)$  unbekannten Funktionen  $R_{1j\nu}$ ,  $R_{2j\nu}$  lässt sich reduzieren, indem wir zwei Eigenschaften des Hamilton-Operators ausnützen.

a) Der Hamilton-Operator  $H_0$  enthält nur die beiden Eulerschen Winkel  $\alpha$  und  $\beta$ ; daher darf die Wellenfunktion vom Winkel  $\gamma$  nicht abhängen. Betrachten wir die Produkte

$$D_{\alpha\sigma}^{\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) D_{\mu\nu}^j(\alpha\beta\gamma)^* = e^{-i\sigma\alpha} d_{\alpha\sigma}^{\frac{1}{2}}(\beta) e^{-i\sigma\gamma} e^{i\mu\alpha} d_{\mu\nu}^j(\beta) e^{i\gamma\gamma}$$

mit  $\sigma, \sigma' = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$  und  $\mu, \nu = -j, \dots, j$ , so ist dies nur erfüllbar, wenn für die Radialfunktionen  $R_{1j\nu}$ ,  $R_{2j\nu}$  gefordert wird:

$$R_{1j\nu} = 0 \text{ für alle } \nu \neq \frac{1}{2}, \quad R_{2j\nu} = 0 \text{ für alle } \nu \neq -\frac{1}{2}.$$

Für die Eigenfunktion  $\Psi_{j\mu}$  folgt dann:

$$\Psi_{j\mu} = R_{1j\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} D_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \\ D_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix} D_{\mu\frac{1}{2}}^j + R_{2j-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} D_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \\ D_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix} D_{\mu-\frac{1}{2}}^j. \quad (8)$$

b) Der Hamilton-Operator  $H_0$  ist invariant gegenüber Spiegelung des Systems am Koordinatenursprung. Daher können die Eigenzustände  $\Psi_{j\mu}$  entsprechend den Eigenwerten  $\pi = \pm 1$  des Spiegelungsoperators I klassifiziert werden. Wir bezeichnen mit  $\Psi_{j\mu}^+$  den Eigenzustand mit gerader Parität, mit  $\Psi_{j\mu}^-$  denjenigen mit ungerader Parität. Die Zustände ungleicher Parität unterscheiden sich möglicherweise in den Radialfunktionen: bei gerader Parität liegen die Funktionen  $R_{1j\frac{1}{2}}^+$  und  $R_{2j-\frac{1}{2}}^+$  vor, bei ungerader Parität die Funktionen  $R_{1j\frac{1}{2}}^-$  und  $R_{2j-\frac{1}{2}}^-$ .

Die Spiegelung des Systems ist definiert durch die Koordinatentransformation:

$$t_1' \rightarrow \bar{t}_1' = t_1'; \quad \alpha \rightarrow \bar{\alpha} = \pi + \alpha; \quad \beta \rightarrow \bar{\beta} = \pi - \beta.$$

Die Spinoren  $\chi(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  und  $\chi(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  gehen bei dieser Operation in sich selbst über. Mit der Beziehung  $d_{\mu\nu}^j(\pi - \beta) = (-1)^{j+\mu} d_{\mu-\nu}^j(\beta)$  ergibt sich für die bei dieser Transformation wesentlichen Bestandteile von (8):

$$\begin{aligned} D_{\sigma\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\pi + \alpha, \pi - \beta, \gamma) D_{\mu\frac{1}{2}}^j(\pi + \alpha, \pi - \beta, \gamma)^* &= (-1)^{j-\frac{1}{2}} D_{\sigma-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) D_{\mu-\frac{1}{2}}^j(\alpha\beta\gamma)^*, \\ D_{\sigma-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\pi + \alpha, \pi - \beta, \gamma) D_{\mu-\frac{1}{2}}^j(\pi + \alpha, \pi - \beta, \gamma)^* &= (-1)^{j-\frac{1}{2}} D_{\sigma\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) D_{\mu\frac{1}{2}}^j(\alpha\beta\gamma)^*. \end{aligned}$$

Mit diesen Ergebnissen liefert die Anwendung des Spiegelungsoperators I auf  $\Psi_{j\mu}^\pm$ :

$$I \Psi_{j\mu}^\pm = (-1)^{j-\frac{1}{2}} (R_{2j-\frac{1}{2}}^\pm \chi'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) D_{\mu\frac{1}{2}}^{j*} + R_{1j\frac{1}{2}}^\pm \chi'(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}) D_{\mu-\frac{1}{2}}^{j*}).$$

Diese Gleichung zeigt, welcher Bedingung die Radialfunktionen genügen müssen, damit der Lösungsansatz Eigenzustände definierter Parität darstellt; es muß sein:

$$R_{1j\frac{1}{2}}^\pm(t_1') = \pm (-1)^{j-\frac{1}{2}} R_{2j-\frac{1}{2}}^\pm(t_1').$$

Der Lösungsansatz mit gerader bzw. ungerader Parität lautet somit:

$$\Psi_{j\mu}^\pm = R_{1j\frac{1}{2}}^\pm [\chi'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) D_{\mu\frac{1}{2}}^{j*} \pm (-1)^{j-\frac{1}{2}} \chi'(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}) D_{\mu-\frac{1}{2}}^{j*}]. \quad (9)$$

Als nächstes berücksichtigen wir im Lösungsansatz eine weitere Eigenschaft des Hamilton-Operators  $H_0$ . Der Ausdruck in den runden Klammern von  $H_0$  ist bis auf den Faktor  $-\hbar^2$  gleich dem Bahndrehimpuls-

operator  $\mathbf{L}^2$  des Massenpunktes  $\mu_1$ , den man gewöhnlich aus den Komponenten  $L_X$ ,  $L_Y$ ,  $L_Z$  bezüglich der Achsen des raumfesten Koordinatensystems XYZ gewinnt. Das systemgebundene Koordinatensystem  $X'Y'Z'$  bietet die Möglichkeit, den Bahndrehimpulsoperator des Systems durch die Komponenten  $L_{X'}$ ,  $L_{Y'}$ ,  $L_{Z'}$  bezüglich der Achsen  $X'$ ,  $Y'$ ,  $Z'$  darzustellen:  $\mathbf{L}'^2 = L_{X'}^2 + L_{Y'}^2 + L_{Z'}^2$ . Explizite Ausdrücke für diese Komponenten in den von uns gewählten Koordinaten findet man beispielsweise in [2]. Beachten wir, daß  $\Psi_{j\mu}^\pm$  die Variable  $\gamma$  nicht enthält, so ergibt sich für  $H_0$  der Ausdruck:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \left( \frac{\partial^2}{\partial t_1'^2} + \frac{2}{t_1'} \frac{\partial}{\partial t_1'} \right) + \frac{1}{2\mu_1 t_1'^2} \mathbf{L}'^2 - \frac{e^2}{t_1'}. \quad (10)$$

Der Hamilton-Operator  $H_0$  ist mit dem Operator  $\mathbf{L}'^2$  vertauschbar. Daher kann der Lösungsansatz (9) noch so gewählt werden, daß er Eigenzustand von  $\mathbf{L}'^2$  ist und zum Eigenwert  $\hbar^2 l(l+1)$  gehört.

Bei der Anwendung von  $\mathbf{L}'^2$  auf  $\Psi_{j\mu}^{\pm}$  kommen Ausdrücke der Art  $\mathbf{L}'^2(D_{\sigma\sigma'}^{\frac{1}{2}} D_{\mu\nu}^{j*})$  vor; zu ihrer Berechnung zerlegen wir den Operator  $\mathbf{L}'^2$  in

$$\mathbf{L}'^2 = \frac{1}{2} (L_+ L_- + L_- L_+) + L_z^2.$$

Mit den Beziehungen<sup>1, 4</sup>

$$\begin{aligned} L_{\pm}' D_{\mu\nu}^{j*} &= \hbar \sqrt{(j \mp \nu)(j \mp \nu + 1)} D_{\mu\nu \mp 1}^{j*} \\ \text{mit } L_{\pm}' &= L_{X'} \pm i L_{Y'}, \\ L_z' D_{\mu\nu}^{j*} &= \hbar \nu D_{\mu\nu}^{j*} \end{aligned} \quad (11)$$

ergibt sich dann:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}'^2 \Psi_{j\mu}^{\pm} &= \hbar^2 \{ (j - \frac{1}{2})(j + \frac{1}{2}) \\ &\quad + (j + \frac{1}{2})[1 \mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}] \} \Psi_{j\mu}^{\pm}; \end{aligned} \quad (12)$$

d. h.  $\Psi_{j\mu}^{\pm}$  ist Eigenzustand zu  $\mathbf{L}'^2$ .

Da  $j$  halbzahlig ist, können vier Fälle unterschieden werden:

gerade Parität ( $\pi = +1$ ) u.  $j = l + \frac{1}{2}$  ( $l = 0, 2, 4, \dots$ ),  
gerade Parität ( $\pi = +1$ ) u.  $j = l - \frac{1}{2}$  ( $l = 2, 4, 6, \dots$ ),  
ungerade Parität ( $\pi = -1$ ) u.  $j = l + \frac{1}{2}$  ( $l = 1, 3, 5, \dots$ ),  
ungerade Parität ( $\pi = -1$ ) u.  $j = l - \frac{1}{2}$  ( $l = 1, 3, 5, \dots$ ).

Als Eigenwerte erhält man immer  $\hbar^2 l(l+1)$ ; die Parität  $\pi$  des Lösungsansatzes wird also durch die Quantenzahl des Bahndrehimpulsoperators bestimmt:  $\pi = (-1)^l$ . Umgekehrt ist bei vorgegebenen  $j$  und  $\pi$  die Quantenzahl  $l$  eindeutig festgelegt. Es erscheinen also bekannte Ergebnisse unter einem ganz neuen Aspekt.

Wird der Lösungsansatz  $\Psi_{j\mu}^{\pm}$  mit gerader bzw. ungerader Parität in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt, so folgt unmittelbar für die Radialfunktionen:  $R_{1j\frac{1}{2}}^+ = R_{1j\frac{1}{2}}^-$ ; zu ihrer Bestimmung bleibt eine Eigenwertgleichung übrig, deren Lösungen die Laguerreschen Polynome sind.

Schließlich soll noch die Spin-Bahn-Wechselwirkung des Teilchens  $m_2$  als Störung berücksichtigt werden. Wir setzen sie wie üblich in der Form eines Skalarproduktes an, also  $H_{SB} = C \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ , wobei im Falle des Wasserstoffatoms

$$C = \frac{e^2}{2 \mu_1^2 c^2} \frac{1}{t_1^3}$$

ist. Für die Anwendung unserer Lösungstheorie ist die Einführung der Drehimpulsoperatoren  $\mathbf{L}'$  und  $\mathbf{S}'$

bezüglich der Achsen des systemgebundenen Koordinatensystems notwendig.  $\mathbf{L}'$  ist in<sup>2</sup> gegeben,  $\mathbf{S}'$  erhält man durch Transformation der Paulischen Spinmatrizen<sup>3</sup>:

$$\begin{aligned} S_{\pm}' &= \frac{\hbar}{2} e^{\mp i\gamma} \begin{pmatrix} -\sin \beta & \pm e^{-i\alpha} (1 \pm \cos \beta) \\ \mp e^{i\alpha} (1 \mp \cos \beta) & \sin \beta \end{pmatrix}, \\ S_z' &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \beta & e^{-i\alpha} \sin \beta \\ e^{i\alpha} \sin \beta & -\cos \beta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (13)$$

mit  $S_{\pm}' = S_{X'} \pm i S_{Y'}$ .

Man sieht aber, daß die Operatoren  $\mathbf{L}'$  und  $\mathbf{S}'$  im Gegensatz zu  $\mathbf{L}$  und  $\mathbf{S}$  nicht miteinander vertauschbar sind. Durch Verifizieren bestätigt man, daß  $\mathbf{S}' \cdot \mathbf{L}' = \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}'$  ist, wobei auf der linken Seite die Reihenfolge der Faktoren zu beachten ist.

Die Ergänzung von  $H_0$  durch den Term  $H_{SB}$  ändert die Symmetrieeigenschaften des Systems nicht; die Klassifizierung der Eigenfunktion  $\Psi_{j\mu}^{\pm}$  nach den Quantenzahlen  $j, \mu, \pi$  bleibt also erhalten. Nach der gleichen Methode wie in (12) wird nun  $H_{SB} \Psi_{j\mu}^{\pm}$  berechnet. Das Ergebnis lautet:

$$H_{SB} \Psi_{j\mu}^{\pm} = C \frac{\hbar^2}{2} \{ -1 \pm (-1)^{j-\frac{1}{2}} (j + \frac{1}{2}) \} \Psi_{j\mu}^{\pm}. \quad (14)$$

Ersetzt man in (14) die Zeichen  $\pm$  durch  $(-1)^l$ , so folgt für den Erwartungswert des Operators  $H_{SB}$ :

$$\langle H_{SB} \rangle = \langle C \rangle \frac{\hbar^2}{2} \begin{cases} l & \text{für } j = l + \frac{1}{2}, \\ -(l+1) & \text{für } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases}$$

Unsere Lösungstheorie liefert also die gleichen Ergebnisse wie die allgemein übliche Behandlung des Zwei-Teilchensystems.

Nach dieser Vorbereitung wenden wir uns der Lösung der Schrödinger-Gleichung des Drei-Teilchen-Systems zu.

## 2. Drei-Teilchensystem

### a) Hamilton-Operator

Für  $N = 3$  sind in Abb. 3 alle zur Beschreibung notwendigen Koordinaten definiert. Zur deutlicheren Unterscheidung der Radialkoordinaten ersetzen wir  $t_1'$  durch  $q$  und  $t_2'$  durch  $r$ . Über die Kräfte zwischen den Massenpunkten werden vorerst keine speziellen Annahmen gemacht, die potentielle Energie des Systems  $U$  ist also irgendeine Funktion der inneren Koordinaten  $q, r, u$ .

Der Hamilton-Operator wird gewonnen, indem man die Hamilton-Funktion nach Kap. I, Abs. 3, auf-

<sup>4</sup> F. REICHE u. H. RADEMACHER, Z. Phys. 39, 444 [1926].

stellt und mit Hilfe des Schrödingerschen Verfahrens in die Quantenmechanik übersetzt. Werden in diesem noch die Operatoren des Gesamtbahndrehimpul-

ses im systemgebundenen Koordinatensystem eingeführt, so hat der Hamilton-Operator  $H_0$  des Dreiteilchensystems folgende Gestalt:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1\varrho^2}[\varrho] - \frac{\hbar^2}{2\mu_2r^2}[r] - \left(\frac{1}{2\mu_1\varrho^2} + \frac{1}{2\mu_2r^2}\right)\left(\hbar^2[u] - \frac{1}{\sin^2 u}L_{Z'}^2\right) + \frac{1}{2\mu_1\varrho^2}(L_+^2 - 2L_{Z'}^2) + \frac{1}{2\mu_1\varrho^2}\left\{L_+^2\left[\hbar\frac{\partial}{\partial u} + \cot u L_{Z'}\right] + L_-^2\left[-\hbar\frac{\partial}{\partial u} + \cot u L_{Z'}\right]\right\} + U(\varrho, r, u). \quad (15)$$

Dabei bedeuten:

$$[\varrho] = \frac{\partial}{\partial \varrho}\left(\varrho^2 \frac{\partial}{\partial \varrho}\right), \quad [r] = \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right), \quad [u] = \frac{1}{\sin u} \frac{\partial}{\partial u}\left(\sin u \frac{\partial}{\partial u}\right).$$

An dieser Stelle seien noch drei weitere Abkürzungen vermerkt, die erst in (25) und (26) verwendet werden:

$$A = \frac{\hbar^2}{2\mu_1\varrho^2}, \quad B = \frac{\hbar^2}{2\mu_2r^2}, \quad \bar{D} = A + B. \quad (16)$$

Der Hamilton-Operator  $H_0$  soll auch hier durch einen Störterm  $H_{SB} = C \mathbf{L}_2 \cdot \mathbf{S}$  erweitert werden, der die Spin-Bahn-Wechselwirkung des Teilchens  $m_3$  beschreibt soll; darin ist  $C$  eine Konstante,  $\mathbf{L}_2$  der Bahndrehimpulsoperator,  $\mathbf{S}$  der Spinoperator des Massenpunktes  $\mu_2$  im raumfesten Koordinatensystem. Analog zu den Überlegungen in Kap. II, Abs. 1, müssen die Drehimpulsoperatoren  $\mathbf{L}_2'$  und  $\mathbf{S}'$  im systemgebundenen Koordinatensystem eingeführt werden. Die Komponenten von  $\mathbf{L}_2'$  ergeben sich nach <sup>2</sup> aus infinitesimalen Drehungen um die Achsen des systemgebundenen Koordinatensystems zu

$$L_{2X'} = -\frac{\hbar}{i} \cot u \frac{\partial}{\partial \gamma}, \quad L_{2Y'} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial u}, \quad L_{2Z'} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \gamma}; \quad (17)$$

die Komponenten von  $\mathbf{S}'$  ergeben sich wie in (13). Man verifiziert, daß auch hier der Störterm die Form  $H_{SB} = C \mathbf{S}' \cdot \mathbf{L}_2'$  annimmt, wobei wiederum die Reihenfolge der Faktoren zu beachten ist.

Der gesamte Hamilton-Operator ist also:

$$H = H_0 + H_{SB}. \quad (18)$$

### b) Lösungsansatz

Der Lösungsansatz für das durch (18) gegebene System lautet:

$$\varphi_{j\mu} = \sum_{\nu=-j}^j \varphi_{j\nu}(\varrho, r, u; s = \frac{1}{2}, \sigma' = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \cdot D_{\mu\nu}^j(\alpha \beta \gamma)^*. \quad (19)$$

Im ungestörten Fall, d. h.  $H_{SB} = 0$ , lassen sich die inneren Funktionen in der Form schreiben:

$$\varphi_{j\nu} = \frac{1}{V^2} (G_{1\nu}^j(\varrho r u) \chi'(\frac{1}{2} \frac{1}{2}) + G_{2\nu}^j(\varrho r u) \chi'(\frac{1}{2} - \frac{1}{2})). \quad (20)$$

$G_{1\nu}^j$  und  $G_{2\nu}^j$  sind Funktionen der inneren Koordinaten  $\varrho, r, u$ , die zweikomponentigen Größen  $\chi'(\frac{1}{2} \frac{1}{2})$  und  $\chi'(\frac{1}{2} - \frac{1}{2})$  Funktionen der Eulerschen Winkel  $\alpha, \beta, \gamma$ .

### c) Klassifizierung des Lösungsansatzes durch weitere Symmetrien

Der Hamilton-Operator ist invariant gegenüber *Spiegelung* des Systems am Koordinatenursprung. Folglich gibt es Lösungsansätze mit gerader bzw. ungerader Parität, die mit  $\Psi_{j\mu}^+$  bzw.  $\Psi_{j\mu}^-$  bezeichnet seien. Bei Spiegelung bleiben die inneren Koordinaten unverändert, die äußeren Koordinaten  $\alpha, \beta, \gamma$  gehen über in  $\pi + \alpha, \pi - \beta, \pi - \gamma$ ; die Spinkoordinaten verhalten sich wie in Kap. II, Abs. 1. Damit der Lösungsansatz Eigenzustand des Spiegelungsoperators I ist, müssen die inneren Funktionen  $G_{1\nu}^j$  und  $G_{2\nu}^j$  die folgenden  $2j+1$  Gleichungen erfüllen:

$$G_{2-\nu}^{j\pm} = \pm (-1)^{j-\nu} G_{1\nu}^{j\pm}, \quad \nu = -j, \dots, j. \quad (21)$$

Damit läßt sich die Anzahl der  $2(2j+1)$  inneren Funktionen auf  $2j+1$  reduzieren. Beim Einsetzen von (20) in (19) unter Berücksichtigung von (21) erweist es sich als vorteilhaft, folgende zweikomponentigen Funktionen einzuführen, die nur von den äußeren Koordinaten abhängen:

$$\begin{aligned} J_{1\mu\nu}^{j\pm} &= \frac{1}{V^2} \{ \chi'(\frac{1}{2} \frac{1}{2}) D_{\mu\nu}^{j*} \pm (-1)^{j-\nu} \chi'(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}) D_{\mu-\nu}^{j*} \}, \\ J_{2\mu\nu}^{j\pm} &= \frac{1}{V^2} \{ \chi'(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}) D_{\mu\nu}^{j*} \mp (-1)^{j-\nu} \chi'(\frac{1}{2} \frac{1}{2}) D_{\mu-\nu}^{j*} \}, \\ \nu &= \frac{1}{2}, \dots, j. \end{aligned} \quad (22)$$

Man erhält dann als Lösungsansatz mit gerader bzw. ungerader Parität:

$$\Psi_{j\mu}^{\pm} = \sum_{\nu=\frac{1}{2}}^j (G_{1\nu}^{j\pm} J_{1\mu\nu}^{j\pm} + G_{2\nu}^{j\pm} J_{2\mu\nu}^{j\pm}). \quad (23)$$

Wir untersuchen bereits hier den für Kap. III wichtigen Fall, daß Teilchen 1 und 2 gleich sind. Dann ist eine weitere Symmetrie des Systems die Invarianz seines Hamilton-Operators gegenüber *Austausch der Teilchen* 1 und 2. Dementsprechend läßt sich die Lösungsmannigfaltigkeit (23) in symmetrische (s) und antisymmetrische (a) Lösungen einteilen.

$$G_{1\nu}^{j\pm s}(\pi-u) = \pm (-1)^{\nu-\frac{1}{2}} G_{1\nu}^{j\pm s}(u), \\ G_{2\nu}^{j\pm s}(\pi-u) = \mp (-1)^{\nu-\frac{1}{2}} G_{2\nu}^{j\pm s}(u),$$

#### d) Differentialgleichungssystem

Der Lösungsansatz ist nach all den Symmetrien klassifiziert, welche das in (18) definierte Drei-Teilchensystem zeigt. Der in (23) erhaltene Ansatz wird in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt:

$$H \Psi_{j\mu}^{\pm} = E \Psi_{j\mu}^{\pm}.$$

---


$$\begin{aligned} & -A \sqrt{(j-\nu+1)(j+\nu)} \left[ \frac{\partial}{\partial u} - (\nu - \frac{3}{2}) \cot u \right] G_{1\nu-1}^{j\pm} - A \sqrt{(j-\nu+1)(j+\nu)} G_{2\nu-1}^{j\pm} \\ & + \left\{ -A[\varrho] - B[r] - \bar{D} \left( [u] - \frac{(\nu - \frac{1}{2})^2}{\sin^2 u} \right) + A[j(j+1) + \frac{3}{4} - \nu - 2(\nu - \frac{1}{2})^2] + C \frac{\hbar^2}{2} (\nu - \frac{1}{2}) + U - E \right\} G_{1\nu}^{j\pm} \\ & + \left( C \frac{\hbar^2}{2} + A \right) \left[ -\frac{\partial}{\partial u} - (\nu + \frac{1}{2}) \cot u \right] G_{2\nu}^{j\pm} - A \sqrt{(j-\nu)(j+\nu+1)} \left[ -\frac{\partial}{\partial u} - (\nu + \frac{1}{2}) \cot u \right] G_{1\nu+1}^{j\pm} = 0, \\ & -A \sqrt{(j-\nu+1)(j+\nu)} \left[ \frac{\partial}{\partial u} - (\nu - \frac{1}{2}) \cot u \right] G_{2\nu-1}^{j\pm} + \left( C \frac{\hbar^2}{2} + A \right) \left[ \frac{\partial}{\partial u} - (\nu - \frac{1}{2}) \cot u \right] G_{1\nu}^{j\pm} \\ & + \left\{ -A[\varrho] - B[r] - \bar{D} \left( [u] - \frac{(\nu + \frac{1}{2})^2}{\sin^2 u} \right) + A[j(j+1) + \frac{3}{4} + \nu - 2(\nu + \frac{1}{2})^2] - C \frac{\hbar^2}{2} (\nu + \frac{1}{2}) + U - E \right\} G_{2\nu}^{j\pm} \\ & - A \sqrt{(j-\nu)(j+\nu+1)} G_{1\nu+1}^{j\pm} - A \sqrt{(j-\nu)(j+\nu+1)} \left[ -\frac{\partial}{\partial u} - (\nu + \frac{3}{2}) \cot u \right] G_{2\nu+1}^{j\pm} = 0, \\ & \nu = \frac{3}{2}, \dots, j. \end{aligned} \tag{25}$$

Die Größen  $A$ ,  $B$ ,  $\bar{D}$  sind bereits in (16) definiert worden.

Die ersten beiden Zeilen des Differentialgleichungssystems ( $\nu = \frac{1}{2}$ ) sind in (25) nicht enthalten; sie lauten:

$$\begin{aligned} & \left\{ -A[\varrho] - B[r] - \bar{D}[u] + A(j + \frac{1}{2}) [j + \frac{1}{2} \mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}] + U - E \right\} G_{1\frac{1}{2}}^{j\pm} \\ & + \left\{ C \frac{\hbar^2}{2} + A[j + \frac{1}{2} \mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}] [\mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}] \right\} \left[ -\frac{\partial}{\partial u} - \cot u \right] G_{2\frac{1}{2}}^{j\pm} \\ & - A \sqrt{(j - \frac{1}{2})(j + \frac{3}{2})} \left[ -\frac{\partial}{\partial u} - \cot u \right] G_{1\frac{3}{2}}^{j\pm} = 0, \\ & \left\{ C \frac{\hbar^2}{2} + A[j + \frac{1}{2} \mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}] [\mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}] \right\} \frac{\partial}{\partial u} G_{1\frac{1}{2}}^{j\pm} \\ & + \left\{ -A[\varrho] - B[r] - \bar{D} \left( [u] - \frac{1}{\sin^2 u} \right) + A[j(j+1) - \frac{3}{4}] - C \frac{\hbar^2}{2} + U - E \right\} G_{2\frac{1}{2}}^{j\pm} \\ & - A \sqrt{(j - \frac{1}{2})(j + \frac{3}{2})} G_{1\frac{3}{2}}^{j\pm} - A \sqrt{(j - \frac{1}{2})(j + \frac{3}{2})} \left[ -\frac{\partial}{\partial u} - 2 \cot u \right] G_{2\frac{3}{2}}^{j\pm} = 0. \end{aligned} \tag{26}$$

Die Austauschoperation  $E_{12}$  bewirkt folgende Koordinatenänderungen:

$$u \rightarrow \pi - u, \quad \alpha \rightarrow \pi + \alpha, \quad \beta \rightarrow \pi - \beta, \quad \gamma \rightarrow 2\pi - \gamma;$$

die restlichen Koordinaten bleiben unverändert. Aus den Symmetrieforderungen für den Lösungsansatz (23) ergeben sich damit folgende Beziehungen:

$$G_{1\nu}^{j\pm a}(\pi-u) = \mp (-1)^{\nu-\frac{1}{2}} G_{1\nu}^{j\pm a}(u), \\ G_{2\nu}^{j\pm a}(\pi-u) = \pm (-1)^{\nu-\frac{1}{2}} G_{2\nu}^{j\pm a}(u). \tag{24}$$

Die Ergebnisse der Anwendung von  $H$  auf die einzelnen Glieder von  $\Psi_{j\mu}^{\pm}$  sind im Anhang zusammengestellt.

Da die  $2j+1$  Funktionen  $J_{1\nu}^{j\pm}$ ,  $J_{2\nu}^{j\pm}$  linear unabhängige Funktionen sind, müssen die auftretenden Koeffizienten verschwinden. Man erhält so ein System von  $2j+1$  verkoppelten partiellen Differentialgleichungen für die inneren Funktionen  $G_{1\nu}^{j\pm}$ ,  $G_{2\nu}^{j\pm}$ :

Da in die Differentialgleichungen (26) die Parität des Lösungsansatzes  $\Psi_{j\mu}^{\pm}$  eingeht, unterscheidet sich das Differentialgleichungssystem der Eigenzustände gerader Parität von demjenigen der Eigenzustände ungerader Parität.

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung des Dreiteilchensystems ist damit auf die Lösung dieser zwei Differentialgleichungssysteme zurückgeführt. Eine weitere Reduktion der Lösung ist erst möglich, wenn nähere Annahmen über die potentielle Energie des Systems gemacht werden. Dies geschieht in Kap. III, in dem das Dreiteilchensystem als Modell für eine bestimmte Gruppe von Atomkernen verwendet wird; dabei ergeben sich interessante Vergleiche mit anderen Kernmodellen.

### III. Behandlung von Kernen mit Außenukleon und deformiertem Kernrumpf

Zur quantitativen Behandlung von deformierten Kernen führt NILSSON<sup>5</sup> eine Schalenmodellrechnung durch mit axialsymmetrisch deformiertem Oszillatorenpotential, Spin-Bahn-Wechselwirkung und einem Term, der die Interpolation zwischen Oszillatoren- und Kastenpotential wiedergibt. Das von ihm verwendete Potential übernimmt KERMAN<sup>6</sup> für die Behandlung eines Modells aus Rumpf und Außenpartikel, wobei der das Potential erzeugende Rumpf nicht mehr unendlich schwer angenommen wird, so daß eine Wechselwirkung zwischen Teilchen- und Rumpfbewegung auftritt.

#### 1. Diskussion des Modells von Kerman

Der Hamilton-Operator von KERMAN lautet:  $H = H_R + H_p + H_c$  mit

$$\begin{aligned} H_R &= \frac{\hbar^2}{2\Theta_0} (\mathbf{J}^2 - J_3^2 - j_3^2) + \frac{\hbar^2}{2\Theta_3} (J_3^2 - j_3^2), \\ H_p &= \left\{ \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}, \mathbf{l}, \mathbf{s}) \right\} + \frac{\hbar^2}{2\Theta_0} \mathbf{j}^2, \\ H_c &= -\frac{\hbar^2}{2\Theta_0} (J_+ j_- + J_- j_+). \end{aligned} \quad (27)$$

Bis auf den Faktor  $\hbar$  ist  $\mathbf{J}$  der Drehimpulsoperator des Kernes,  $\mathbf{l}$  derjenige des Rumpfes und  $\mathbf{j}$  der Gesamtdrehimpulsoperator des Teilchens, alle dargestellt durch die Komponenten in einem mit dem Rumpf verbundenen Koordinatensystem; es ist  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{j}$ . Die Größen  $\Theta_0$  und  $\Theta_3$  sind die Träg-

heitsmomente des axialsymmetrisch deformierten Rumpfes;  $J_3$  bzw.  $j_3$  die Komponenten von  $\mathbf{J}$  bzw.  $\mathbf{j}$  in Richtung der Symmetriechse des Rumpfes;  $J_{\pm}$ ,  $j_{\pm}$  sind die entsprechenden Schiebeoperatoren. In  $H_p$  erkennt man in den beiden zusammengeklammerten Termen den Hamilton-Operator des Nilsson-Modells; jetzt ist aber  $m$  die reduzierte Masse aus Rumpf und Teilchenmasse.

Da in diesem Modell die Rumpfmasse als groß angenommen wird und das Teilchen an den Rumpf stark gebunden ist, sind die Anregungsenergien von Teilchen und Rumpfrotation sehr verschieden von einander. KERMAN zerlegt den Hamilton-Operator in einen ungestörten Anteil  $H_0 = H_R + H_p$  und einen Störterm  $H_c$ . Die Eigenzustände von  $H_0$  werden durch einen Typ von Wellenfunktionen dargestellt, der auch bei der Behandlung von Molekülen verwendet wird:

$$|JMK\Omega\rangle \quad (28)$$

$$= \sum_j C_{j\Omega} (|j\Omega\rangle D_{MK}^J + (-1)^{J-K-j+\Omega} |j-\Omega\rangle D_{M-K}^J).$$

Die Größen  $D_{MK}^J$  sind die Kreiseleigenfunktionen mit den Quantenzahlen des Drehimpulsoperators des Gesamtkerns. Die Größen  $\sum_j C_{j\Omega} |j\Omega\rangle$  stellen die Eigenzustände zu  $H_p$  in Form einer Entwicklung nach Eigenzuständen  $|j\Omega\rangle$  des kugelsymmetrischen Anteils des Nilsson-Potentials dar; hierbei sind  $j$  und  $\Omega$  die zu  $\mathbf{j}$  und  $j_3$  gehörigen Quantenzahlen. Da  $H_p$  den Term  $\frac{1}{2}(\hbar^2/\Theta_0) \mathbf{j}^2$  enthält, sind die Eigenwerte  $E_p(\Omega)$  von  $H_p$  nicht die gleichen wie bei Nilsson.

Die Eigenwerte von  $H_0$  ergeben sich zu:

$$E_0(JK\Omega) = \frac{\hbar^2}{2\Theta_0} [J(J+1) - K^2 - \Omega^2] + \frac{\hbar^2}{2\Theta_3} (K^2 - \Omega^2) + E_p(\Omega). \quad (29)$$

KERMAN wählt Zustände  $|JMK\Omega\rangle$  mit  $K = \Omega$  aus, da im Bereich niedriger Anregungsenergien der Kerne die Rotation des Rumpfes um die Symmetriechse nicht angeregt ist ( $\Theta_3 \ll \Theta_0$ ); ein Drehimpuls in Richtung der Symmetriechse kommt also nur durch die Bewegung des Teilchens zustande.

Für  $E_0(JK\Omega)$  folgt dann:

$$E_0(JKK) = \frac{\hbar^2}{2\Theta_0} [J(J+1) - 2K^2] + E_p(K). \quad (30)$$

<sup>5</sup> S. G. NILSSON, Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat. Fys. Medd. **29**, 16 [1955].

<sup>6</sup> A. K. KERMAN, Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat. Fys. Medd. **30**, 15 [1956].

Die Eigenwerte  $E_0(JKK)$  zu verschiedenen Deformationen lassen sich als Nilsson-Diagramm auftragen: Auf den modifizierten Nilsson-Niveaus bauen sich Rotationsbanden auf; jeder Bandenkopf ist durch die Quantenzahl  $K$  des Drehimpulsoperators  $J_3$  gekennzeichnet.

Der Störoperator  $H_c$  liefert Matrixelemente der Form:

$$\langle JK+1 | H_c | JK \rangle = A_K V(J-K)(J+K+1)$$

$$\text{mit } A_K = -\frac{\hbar^2}{2\Theta_0} \sum_j C_{jK+1}^* C_{jK} V(j-K)(j+K+1);$$

$$\langle J\frac{1}{2} | H_c | J\frac{1}{2} \rangle = \frac{\hbar^2}{2\Theta_0} (-1)^{J+\frac{1}{2}} (J+\frac{1}{2}) a \quad (31)$$

$$\text{mit } a = \sum_j |C_{j\frac{1}{2}}|^2 (-1)^{j+\frac{1}{2}} (j+\frac{1}{2}).$$

$a$  wird "decoupling parameter" genannt.

Zur Erläuterung der Berechnung der gestörten Energieniveaus stellen wir ungestörte und gestörte Energieniveaus durch zwei Schemata (Abb. 4 und Abb. 5) dar, die zum Gesamtdrehimpuls  $J$  gehören. Dabei seien die modifizierten Nilsson-Zustände mit gleichem  $K$  durch den Index  $\lambda$  unterschieden, indem wir für die Eigenzustände von  $H_0$  jetzt  $|JMK_\lambda\rangle$  schreiben.

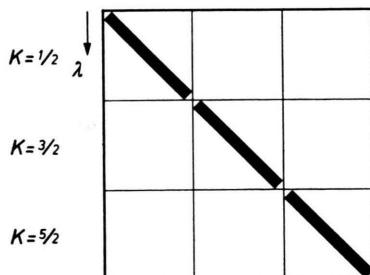


Abb. 4. Ungestörte Matrix  $\langle H_0 \rangle$ . Die schwarz ausgefüllten Rechtecke stellen die Diagonalelemente  $\langle H_0 \rangle$  aus den Zuständen  $|JMK_1\rangle, |JMK_2\rangle$  usw. dar.

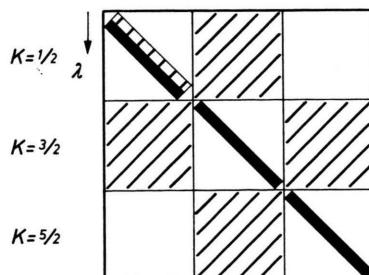


Abb. 5. Gestörte Matrix  $\langle H_0 + H_c \rangle$ . Die schraffierten Felder sind mit den Matrixelementen  $\langle H_c \rangle$  (31) gefüllt. Für  $K=1/2$  gibt es auch Diagonalelemente.

Bei der Berechnung der Energieniveaus nach KERMAN sind also folgende drei Aufgaben zu bewältigen:

1. Diagonalisierung des Hamilton-Operators  $H_p$  des modifizierten Nilsson-Modells und Berechnung der Entwicklungskoeffizienten  $C_{jK}$ .
2. Berechnung der Matrixelemente des Störoperators  $H_c$  (31).
3. Diagonalisierung von  $\langle H_0 + H_c \rangle$  gemäß Abb. 5.

Die Durchführung dieses Programms ist recht mühsam. KERMAN diagonalisiert infolgedessen nicht die ganze Matrix (Abb. 5), sondern wählt geeignete  $(2 \times 2)$ -Matrizen aus, die den Hauptbeitrag liefern. Außerdem passt er sein Modell dem Experiment nicht mit den primär gegebenen Modellparametern an, sondern mit den Größen  $A_K$  und dem "decoupling parameter"  $a$ , wobei die Frage der Widerspruchsfreiheit aller eingeführten Größen offen bleibt.

## 2. Das Drei-Teilchensystem als Modell eines Atomkerns

Wenn wir den Massenpunkten  $m_1$  und  $m_2$  gleiche Masse  $M$  und einen festen Abstand  $\varrho_0$  geben, so können wir das so entstandene Gebilde als Modell für den Kernrumpf, den Massenpunkt  $m_3$  als Außennukleon ansehen.

Die Behandlung dieses „Drei-Teilchen-Kernmodells“ ist in unseren bisherigen Darlegungen enthalten. Das beim Übergang zu einem festen Abstandswert  $\varrho_0$  einzuschlagende Verfahren wurde schon früher erläutert (NÄPFEL und RUDER<sup>7</sup>). Der Hamilton-Operator (18) bzw. das Differentialgleichungssystem (25), (26) enthalten demnach die Koordinate  $\varrho$  nur noch in der Form  $A = A_0 = \hbar^2/M \varrho_0^2$ , der Term  $-A[\varrho]$  ist verschwunden.

Das Trägheitsmoment  $\frac{1}{2} M \varrho_0^2$  der Hantel entspricht dem Trägheitsmoment  $\Theta_0$  des Rumpfes bei KERMAN; das Trägheitsmoment um die Hantelachse ( $Z'$ -Achse) ist Null. Ein Drehimpuls in  $Z'$ -Richtung wird also nur durch eine Bewegung des Außennukleons mit der Masse  $m_3$  erzeugt. Gegenüber dem Drei-Teilchensystem enthält das Kerman-Modell einen Freiheitsgrad mehr, der jedoch durch die Auswahl von Zuständen mit  $K=\Omega$  ausgeschaltet wird.

Kerman-Modell und „Drei-Teilchenmodell“ sind dann völlig äquivalent, wenn in dem letzteren die Wechselwirkung zwischen der Hantel (Rumpf) und

<sup>7</sup> H. NÄPFEL u. H. RUDER, Diplomarbeiten, Erlangen 1964 (unveröffentlicht).

dem Massenpunkt  $m_3$  (Teilchen) ebenfalls durch ein Nilsson-Potential beschrieben wird. Mit den von uns eingeführten Koordinaten nimmt es die Form an:

$$U_N = \frac{1}{2} \mu_2 \omega_0^2 r^2 - \delta \mu_2 \omega_0^2 \frac{4}{3} \sqrt{\pi/5} r^2 Y_{20}(u, 0) + C(1/\hbar^2) \mathbf{S}' \cdot \mathbf{L}_2' + D(1/\hbar^2) \mathbf{L}_2'^2. \quad (32)$$

Die hier auftretenden Parameter des Potentials,  $\omega_0$ ,  $\delta$ ,  $C$ ,  $D$  sind genau die gleichen wie bei NILSSON,  $\mu_2$  ist die reduzierte Masse aus Hantelmasse und  $m_3$ . Der zweite Term in (32) werde mit  $-\delta U_{\text{an}}$  bezeichnet. Im Hamilton-Operator des Drei-Teilchensystems (18) ist also  $U + H_{\text{SB}}$  durch den in (32) gegebenen Ausdruck zu ersetzen.

Die Energieniveaus des Drei-Teilchenmodells erhalten wir durch Lösung des entsprechenden Differentialgleichungssystems (25), (26). Die Methode, die wir hierzu anwenden, wird ausführlich bei RUDER<sup>8</sup> diskutiert und kann als Entwicklung der inneren Funktionen nach Funktionen eines „ungestörten“ Problems gekennzeichnet werden. Die Entwicklungskoeffizienten sind aus einem homogenen Gleichungssystem zu bestimmen, das aus dem Differentialgleichungssystem durch Einsetzen der inneren Funktionen und Integration hervorgeht. Die Energieniveaus ergeben sich dann als Nullstellen der Determinante des homogenen Gleichungssystems.

Als „ungestörtes“ Problem verwenden wir das Drei-Teilchenmodell ohne den Term  $-\delta U_{\text{an}}$ . Das zugehörige reduzierte System (Abb. 2) hat folgende Eigenschaften:  $\mu_1$  (Bahndrehimpulsoperator  $\mathbf{L}_1$ ) ist mit festem Abstand  $q_0$  an den Ursprung gebunden,  $\mu_2$  (Bahndrehimpulsoperator  $\mathbf{L}_2$ , Spinoperator  $\mathbf{S}$ ) bewegt sich in einem isotropen Oszillatorenpotential mit Zentrifugalterm  $[D(1/\hbar^2) \mathbf{L}_2^2]$  und Spin-Bahn-Wechselwirkung  $[C(1/\hbar^2) \mathbf{L}_2' \cdot \mathbf{S}]$ ; die Bewegungen von  $\mu_1$  und  $\mu_2$  erfolgen also unabhängig voneinander.

Die Energieniveaus mit definiertem Gesamtdrehimpuls  $j$  werden durch eine Linearkombination von Produkten aus drei Drehimpulseigenfunktionen dargestellt gemäß der Kopplung der Drehimpulsoperatoren im raumfesten Koordinatensystem

$$\mathbf{J} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{J}_2 = \mathbf{L}_1 + (\mathbf{S} + \mathbf{L}_2) :$$

$$\Psi_{j\mu} = \sum_{m_1, \sigma} C(l_1 j_2 j; m_1 m \mu) C(\frac{1}{2} l_2 j_2; \sigma m_2 m) \cdot Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1) \chi(\frac{1}{2} \sigma) R_{nl_2}(r) Y_{l_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2). \quad (33)$$

Zur Definition von Wigner-Koeffizienten und Kugelfunktionen verweisen wir auf ROSE<sup>4</sup>; die Größen

<sup>8</sup> H. RUDER, Z. Naturforsch. 23a, 579 [1968].

$\chi(\frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2})$  sind die Paulischen Spinoren,  $R_{nl_2}(r)$  die normierten Radialfunktionen des isotropen harmonischen Oszillators, wobei die Radialquantenzahl  $n$  und die Drehimpulsquantenzahl  $l_2$  mit der Oszillatorquantenzahl  $N$  über  $N = 2n + l_2$  verknüpft sind. Die Energieniveaus (33) werden analog zu RUDER in die Variablen von (25), (26) umgerechnet. Die inneren Funktionen nehmen die Form an:

$$G_{1\nu}^{j\pm} = \sqrt{(2l_1 + 1)/2\pi} C(l_1 j_2 j; 0 \nu \nu) \cdot C(\frac{1}{2} l_2 j_2; \frac{1}{2} \nu - \frac{1}{2} \nu) R_{nl_2}(r) Y_{l_2 \nu - \frac{1}{2}}(u, 0), \\ G_{2\nu}^{j\pm} = \sqrt{(2l_1 + 1)/2\pi} C(l_1 j_2 j; 0 \nu \nu) \cdot C(\frac{1}{2} l_2 j_2; -\frac{1}{2} \nu + \frac{1}{2} \nu) R_{nl_2}(r) Y_{l_2 \nu + \frac{1}{2}}(u, 0). \quad (34)$$

Die Parität ist durch  $\pi = (-1)^{l_1 + l_2}$  bestimmt.

Tritt zum „ungestörten“ Problem der anisotropen Term  $-\delta U_{\text{an}}$  hinzu, so sind in (34) die Ausdrücke für die inneren Funktionen durch Summen über die Quantenzahlen  $l_1$ ,  $l_2$ ,  $j_2$ ,  $n$  zu ersetzen. Wie bei RUDER an einem übersichtlichen Beispiel erläutert wird, ist es im Falle der Bestimmung der Energieniveaus durch ein Diagonalisierungsverfahren vorteilhaft, die inneren Funktionen direkt nach den normierten Funktionen  $\sqrt{2\pi} R_{nl_2}(r) Y_{l_2 \nu \mp \frac{1}{2}}(u, 0)$  zu entwickeln, obwohl dann beim „ungestörten“ Problem die Energiematrix nicht diagonal ist.

$$G_{1\nu}^{j\pm} = \sum_{l_2, n} C_{1\nu l_2 n}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{nl_2}(r) Y_{l_2 \nu - \frac{1}{2}}(u, 0), \\ G_{2\nu}^{j\pm} = \sum_{l_2, n} C_{2\nu l_2 n}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{nl_2}(r) Y_{l_2 \nu + \frac{1}{2}}(u, 0), \\ \nu = \frac{1}{2}, \dots, j. \quad (35)$$

Die Struktur der Energiematrizen für „ungestörtes“ Problem und Drei-Teilchenmodell zeigen die schematisierten Matrizen in Abb. 6 und Abb. 7, die zum Gesamtdrehimpuls  $j$  gehören. Die Quantenzahl  $\nu$  entspricht der Größe  $K$  von Abb. 4 und 5.

$\nu = \frac{1}{2}$ ( $G_{1\nu}^{j\pm}$ )	$l_2, n$	◆	◆	◆	◆
$\nu = \frac{1}{2}$ ( $G_{2\nu}^{j\pm}$ )		◆	◆	◆	◆
$\nu = \frac{3}{2}$		◆	◆	◆	◆
$\nu = \frac{3}{2}$		◆	◆	◆	◆

Abb. 6. Energiematrix des „ungestörten“ Problems. Die Feinschraffur kennzeichnet den Anteil der Matrixelemente, der von der Spin-Bahn-Wechselwirkung herrührt.

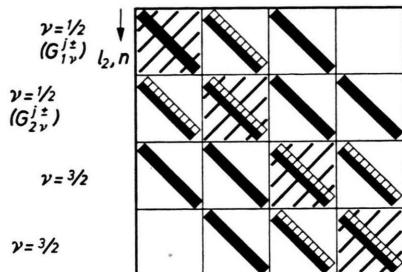


Abb. 7. Energiematrix des Drei-Teilchenmodells.

Im ersten Fall (Abb. 6) ist jede innere Funktion nur eine Funktion vom Typ  $\sqrt{2\pi} R_{nl_2}(r) Y_{l_2, \mp \frac{1}{2}}(u, 0)$ . Dem Differentialgleichungssystem (25), (26) ist zu entnehmen, daß jedes „ $\nu$ -Kästchen“ auf der Hauptdiagonale und den je zwei benachbarten Diagonalen nur von einem Matrixelement besetzt ist.

Im zweiten Fall (Abb. 7) sind die inneren Funktionen Summen der Entwicklungsfunktionen. Deshalb entarten alle Matrixelemente in den „ $\nu$ -Kästchen“ von Abb. 6 zu Untermatrizen in Diagonalf orm; den Untermatrizen der Hauptdiagonale werden noch die Störmatrizen mit den Elementen

$$\langle \sqrt{2\pi} R_{n'l_2'} Y_{l_2', \mp \frac{1}{2}}(u, 0) | -\delta U_{an} | \sqrt{2\pi} R_{nl_2} Y_{l_2, \mp \frac{1}{2}}(u, 0) \rangle \quad (36)$$

überlagert, was die Grobschraffur in Abb. 7 andeutet soll.

Wir sind damit an einem Punkt angelangt, wo wir unsere Methode zur Berechnung der Energieeigenwerte mit derjenigen von KERMAN vergleichen können.

Die Energieeigenwerte werden bei uns durch Diagonalisierung einer einzigen Matrix (Abb. 7) erhalten. Die Energiematrix des „ungestörten“ Problems ist im Gegensatz zu KERMAN nichtdiagonal; ihre Energieeigenwerte werden jedoch bei der Diagonalisierung der Matrix (Abb. 7), die notwendigerweise mit einem Rechenprogramm an einer Datenverarbeitungsanlage durchgeführt werden muß, für  $\delta = 0$  miterhalten.

Da das Modell an das Experiment anzupassen ist, wird man zur besseren Übersicht entsprechende Nilsson-Diagramme zu verschiedenen Parametersätzen  $A_0, C, D$  aufstellen. Dazu müßten nach KERMAN in einem ersten Diagonalisierungsverfahren für jeden Satz von  $\delta, C, D$  die Energieeigenwerte  $E_p(K)$  in (30) und die Koeffizienten  $C_{jK}$  berechnet werden, und mit letzteren die Matrixelemente (31) für das zweite Diagonalisierungsverfahren. Es ist daher ver-

ständlich, weshalb KERMAN den „decoupling parameter“  $a$  und die Größen  $A_K$  zur Anpassung verwendet.

Bei unserer Methode gehen die primär gegebenen Modellparameter auf einfache und übersichtliche Weise in den Diagonalisierungsprozeß ein. Die zu diagonalisierende Matrix (Abb. 7) läßt sich folgendermaßen zerlegen:

$$M = M(0) + \delta M(U_{an}) + A_0 M(J) + C M(SB) + D M(Z). \quad (37)$$

Im einzelnen bedeuten  $M(0)$  eine Diagonalmatrix mit Energieeigenwerten des isotropen harmonischen Oszillators,  $M(U_{an})$  eine Matrix mit den Elementen (36) bis auf den Faktor  $\delta$ ,  $M(J)$  eine Matrix, die bis auf den Faktor  $A_0$  alle mit  $A_0$  multiplizierten Elemente von Abb. 7 darstellt,  $M(SB)$  und  $M(Z)$  Matrizen, welche analog zu  $M(J)$  durch die Matrixelemente der Spin-Bahn-Wechselwirkung und des Zentrifugalterms definiert sind. Die Elemente von  $M(U_{an})$  sind bei NILSSON zu finden. Alle anderen Matrizen sind einfach zu berechnen, wie man sich leicht am Differentialgleichungssystem (25), (26) überzeugt.

Zur Diagonalisierung der Matrix (37) wird ein Rechenprogramm von RUDER übernommen, das sich bei ähnlichen Problemen bewährt hat. Dieses Programm ist so gestaltet, daß in die Datenverarbeitungsanlage die Matrizen  $M(0)$ ,  $M(U_{an})$ ,  $M(J)$ ,  $M(SB)$ ,  $M(Z)$  sowie die Parametersätze  $\delta, A_0, C, D$  als voneinander unabhängige Dateneinheiten eingegeben werden. Daher ist die eigentliche Rechenarbeit in der Aufstellung der fünf Matrizen zu suchen; es sei noch angemerkt, daß sich die Matrizen (37) zu verschiedenen Gesamtdrehimpuls ab einem gewissen  $J$  nur durch die Matrizen  $M(J)$  unterscheiden.

Es zeigt sich also, daß die hier gegebene Lösungstheorie die Behandlung eines Kernmodells erlaubt, welches zwar physikalisch demjenigen von KERMAN weitestgehend entspricht, wobei sich jedoch bei unserer Methode eine recht einfache Bestimmung der Energieeigenwerte ergibt. Eine Folge davon ist, daß die primär gegebenen Modellparameter (Potential des Außenkkleons, Trägheitsmoment des Rumpfes) auf einfache und eindeutige Weise durch Anpassung an das experimentelle Termschema erhalten werden.

### 3. Numerische Rechnungen zum Drei-Teilchen-Kernmodell

Wir beschränken uns auf Zustände, die im Bereich der tieferen Oszillatoren schalen liegen.

Als Entwicklungsfunktionen für die inneren Funktionen wählen wir Oszillatoreigenfunktionen aus der Schale  $N=1$  bzw.  $N=2$ , da wir wie NILSSON die Kopplung mit den übernächsten Schalen, also  $N=3$  bzw.  $N=0, 4$ , vernachlässigen.

Um die numerischen Ergebnisse im Zusammenhang mit dem Diagramm von NILSSON zu diskutieren, halten wir uns an die Bezeichnungen von NILSSON. Im Differentialgleichungssystem setzen wir  $r = (\hbar/\mu_2 \omega_0)^{\frac{1}{2}} r'$  und  $E = \hbar \omega_0 E'$  und schreiben im folgenden statt der dimensionslosen Größen  $r'$ ,  $E'$  wieder  $r$ ,  $E$ . Dann geht (32) über in:

$$U_N = \frac{1}{2} r^2 - \delta \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2}{5}} r^2 Y_{20}(u, 0) - \frac{\delta}{\eta} 2 \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{S}' \cdot \mathbf{L}_2' - \frac{\delta}{\eta} \mu \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{L}_2'^2. \quad (38)$$

Die Definition der dimensionslosen Parameter  $\delta$ ,  $\eta$ ,  $\mu$  ist wie bei NILSSON:

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{\delta}{\varkappa} \left[ 1 - \frac{4}{3} \delta^2 - \frac{16}{27} \delta^3 \right]^{-\frac{1}{2}}, \\ \varkappa &= -\frac{1}{2} \frac{C}{\hbar \omega_0}, \quad \mu = \frac{2D}{C}. \end{aligned} \quad (39)$$

Der Modellparameter  $A_0 = \hbar^2/M \omega_0^2$  geht in den dimensionslosen Ausdruck  $\hbar/M \omega_0^2 \omega_0$  über; dieser sei wieder mit  $A_0$  bezeichnet. Den letzten Term von (38) lassen wir wie NILSSON weg, da wir nur die Schalen

$$\begin{aligned} M(0) &= \begin{vmatrix} \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & \frac{5}{2} \end{vmatrix} \\ j = \frac{3}{2} \quad M(J) &= \begin{vmatrix} 4 & -\sqrt{2} & -\sqrt{6} \\ -\sqrt{2} & 5 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{6} & -\sqrt{3} & 3 \end{vmatrix} \end{aligned}$$

Für  $j \geq \frac{3}{2}$  treten stets  $(3 \times 3)$ -Matrizen auf.

b)  $N=2$

Die inneren Funktionen lauten:

$$\begin{aligned} G_{1v}^{j\pm} &= C_{1v01}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{10}(r) Y_{0v-\frac{1}{2}}(u, 0) \\ &\quad + C_{1v20}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{02}(r) Y_{2v-\frac{1}{2}}(u, 0), \\ G_{2v}^{j\pm} &= C_{2v01}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{10}(r) Y_{0v+\frac{1}{2}}(u, 0) \\ &\quad + C_{2v20}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{02}(r) Y_{2v+\frac{1}{2}}(u, 0). \end{aligned}$$

$$M(0) = \begin{vmatrix} \frac{7}{2} & & & 0 \\ & \frac{7}{2} & & \\ & & \frac{7}{2} & \\ 0 & & & \frac{7}{2} \end{vmatrix}$$

$N=1, 2$  betrachten. Wir führen noch die Größe

$$\xi = \frac{\delta}{\eta} = \varkappa \left[ 1 - \frac{4}{3} \delta^2 - \frac{16}{27} \delta^3 \right]^{\frac{1}{2}}$$

ein; da der Deformationsparameter  $\delta$  im Intervall  $-0,3 \leq \delta \leq 0,3$  liegen soll, folgt:  $\xi \approx \varkappa$ . Die Beziehung (37) geht dann über in

$$M = M(0) + \delta M(U_{\text{an}}) + A_0 M(J) + \xi M(\text{SB}). \quad (40)$$

a)  $N=1$

Die inneren Funktionen lauten:

$$\begin{aligned} C_{1v}^{j\pm} &= C_{1v01}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{01}(r) Y_{1v-\frac{1}{2}}(u, 0), \\ C_{2v}^{j\pm} &= C_{2v10}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{01}(r) Y_{1v+\frac{1}{2}}(u, 0). \end{aligned}$$

Analog zu BOHR und MOTTELSON<sup>9</sup> wählen wir solche Zustände aus, die wir bei der Untersuchung der Austauschoperation  $E_{12}$  in Kap. II, Abs. 2 c, mit „symmetrisch“ bezeichnet haben. Aus den Symmetrieforderungen für die inneren Funktionen (24) folgt, daß wir es bei  $N=1$  mit Zuständen ungerader Parität zu tun haben; also  $G_{1v}^{j+} = G_{2v}^{j+} = 0$ .

Aus dem Differentialgleichungssystem (25), (26) erhalten wir z. B. für  $j = \frac{1}{2}$ ,  $j = \frac{3}{2}$  folgende Matrizen:

$$\begin{aligned} j = \frac{1}{2} \quad M(0) &= \begin{vmatrix} \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & \frac{5}{2} \end{vmatrix} & M(U_{\text{an}}) &= \begin{vmatrix} -\frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{vmatrix} \\ M(J) &= \begin{vmatrix} 4 & 2\sqrt{2} \\ 2\sqrt{2} & 2 \end{vmatrix} & M(\text{SB}) &= \begin{vmatrix} 0 & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & 1 \end{vmatrix}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M(U_{\text{an}}) &= \begin{vmatrix} -\frac{2}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{vmatrix} \\ M(\text{SB}) &= \begin{vmatrix} 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Die Symmetrieforderungen (24) für symmetrische Zustände lassen nur Zustände mit gerader Parität zu, so daß nur die Funktionen  $G_{1v}^{j+}$  und  $G_{2v}^{j+}$  auftreten.

Entsprechend zu oben erhalten wir für  $j = \frac{1}{2}$   $(3 \times 3)$ -Matrizen, für  $j = \frac{3}{2}$   $(5 \times 5)$ -Matrizen und für alle  $j \geq \frac{5}{2}$   $(6 \times 6)$ -Matrizen. Als Beispiel geben wir die Matrizen für  $j = \frac{5}{2}$  an:

$$M(U_{\text{an}}) = \begin{vmatrix} 0 & \frac{2}{3}\sqrt{2} & & & & 0 \\ \frac{2}{3}\sqrt{2} & -\frac{2}{3} & & & & \\ & & -\frac{1}{3} & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \frac{2}{3} & \\ & & & & & \frac{2}{3} \end{vmatrix}$$

<sup>9</sup> A. BOHR u. B. R. MOTTELSON, Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat. Fys. Medd. 27, 16 [1953].

$$M(J) = \begin{vmatrix} 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12 & -\sqrt{24} & -\sqrt{48} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{24} & 14 & -\sqrt{8} & -\sqrt{32} & 0 \\ 0 & -\sqrt{48} & -\sqrt{8} & 12 & 2 & -\sqrt{20} \\ 0 & 0 & -\sqrt{32} & 2 & 9 & -\sqrt{5} \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{20} & -\sqrt{5} & 5 \end{vmatrix} \quad M(\text{SB}) = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{6} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{vmatrix}$$

Die Matrizen wurden für verschiedene Parameter-  
sätze  $\delta$ ,  $A_0$ ,  $\xi$  und verschiedene Werte von  $j$  dia-  
gonalisiert. Die erhaltenen Energieniveaus sind als  
Funktion des Deformationsparameters  $\delta$  in den Ab-  
bildung 8, 9 und 10 dargestellt.

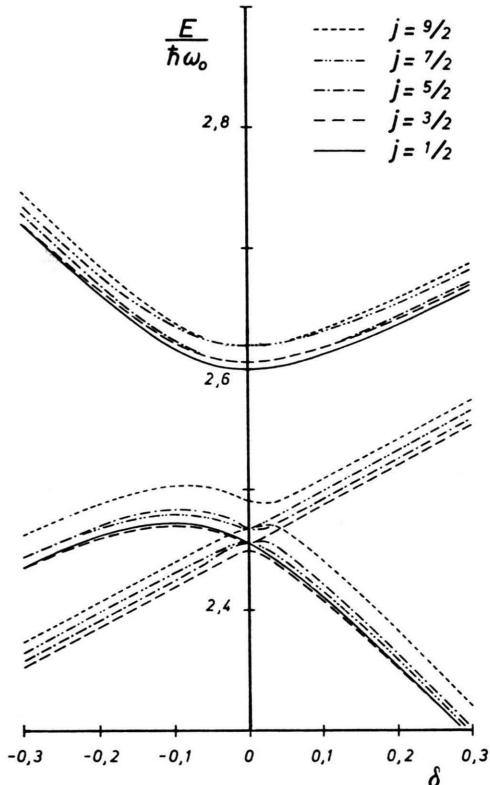


Abb. 8. Energieniveaus des Drei-Teilchenmodells als  
Funktion des Deformationsparameters  $\delta$ .  
 $A_0=0,0010$  und  $\xi=0,0500$ .

Wir betrachten zunächst den Fall kleiner  $A_0$ -Werte, d. h. großer Trägheitsmomente des Rumpfes. In Abb. 8 ist  $A_0=0,0010$ . Dieser Wert liegt in der Kernphysik beispielsweise dann vor, wenn der Rumpf aus zwei  $\alpha$ -Teilchen mit dem sehr großen gegenseitigen Abstand von ca.  $20 \cdot 10^{-13}$  cm bestehen würde. Im Grenzfall  $A_0 \rightarrow 0$  ergeben sich die – nicht gesondert eingezzeichneten – Energieniveaus des Nilsson-Modells. Die Aufspaltung entspricht den ver-

schiedenen Werten des Gesamtdrehimpulses  $j$ , die wegen der Mitbewegung des Rumpfes möglich sind.

In Abb. 9 ist  $A_0=0,0050$ ; der obige Abstand wäre ca.  $10 \cdot 10^{-13}$  cm. Die Nilsson-Niveaus spalten in diesem Fall schon wesentlich stärker auf.

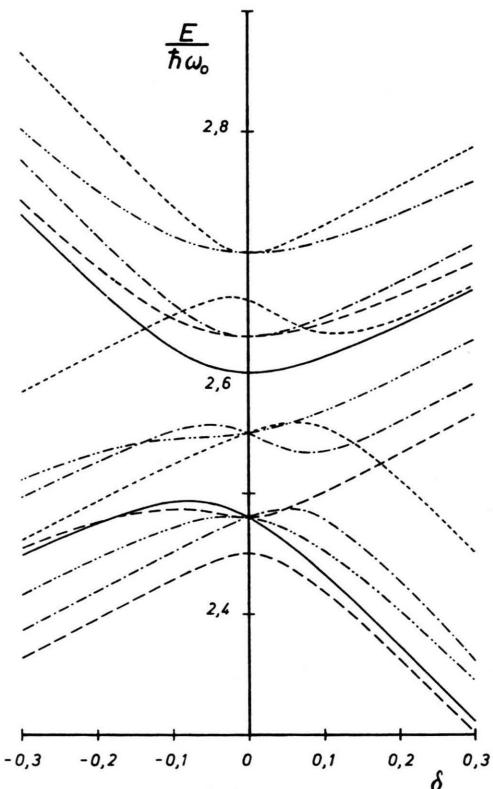
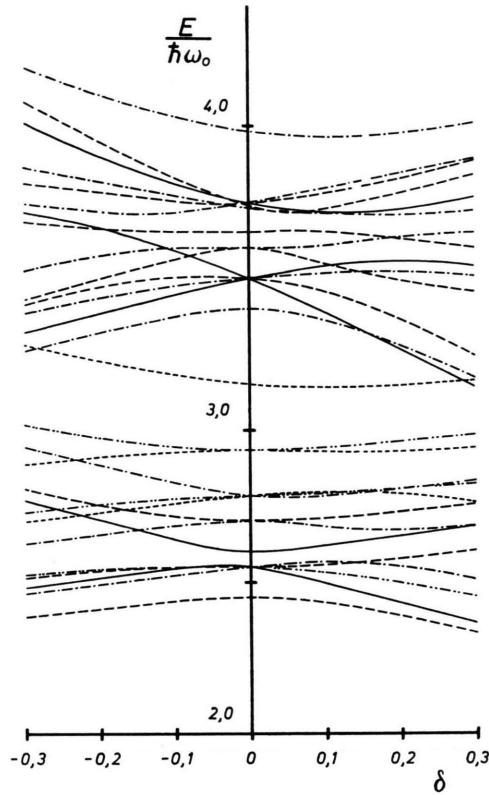


Abb. 9. Energieniveaus.  $A_0=0,0050$  und  $\xi=0,0500$ .  
Darstellung der verschiedenen Drehimpulswerte wie in Abb. 8.

Abb. 10 stellt den Fall  $A_0=0,0167$  dar; der obige Abstand wäre ca.  $5 \cdot 10^{-13}$  cm, also eine für das gewählte Beispiel einigermaßen sinnvolle Größe. Das Eigenwertspektrum wird hier stark von der Mitbewegung des Rumpfes bestimmt; die gezeichneten Rotationsbanden überlappen sich innerhalb einer Oszillatorschale beträchtlich. Für  $N=2$  sind nur Energieniveaus zum Gesamtdrehimpuls  $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$  dargestellt.



Auf der Ordinate ( $\delta = 0$ ) sind wieder die Energien eigenwerte des „ungestörten“ Problems zu finden.

Für die Anwendung der hier durchgeführten Rechnungen auf schwere ug- und gu-Kerne ( $A = 150$  bis  $250$ ) müssen höhere Oszillatorschalen mit  $N = 4, 5, 6$  betrachtet werden. Dies wird in einer späteren Arbeit geschehen.

Herrn Professor Dr. H. VOLZ danke ich für sein wohlwollendes Interesse an dieser Arbeit und für viele nützliche Anregungen. — Ferner waren die zahlreichen Diskussionen mit Herrn H. RUDER für diese Arbeit sehr fördernd. — Die numerischen Rechnungen wurden an einer Datenverarbeitungsanlage Siemens DVA 2002 ausgeführt. Der Firma Siemens AG möchte ich für die großzügig zur Verfügung gestellte Rechenzeit danken.

Abb. 10. Energieniveaus.  $A_0 = 0,0167$  und  $\xi = 0,0500$ . Darstellung der verschiedenen Drehimpulswerte wie in Abb. 8.

## Anhang (Formelsammlung)

Die Schrödinger-Gleichung zum Drei-Teilchensystem in Kap. II, Abs. 2, lässt sich wegen der linearen Unabhängigkeit der Entwicklungsfunktionen  $J_{1\mu\nu}^{i\pm}$ ,  $J_{2\mu\nu}^{i\pm}$  in ein Differentialgleichungssystem überführen. Hierzu werden die folgenden Ausdrücke berechnet:

$$\begin{aligned}
& \mathbf{L}'^2 \mathcal{J}_{1\mu\nu}^{j\pm} = \hbar^2 \left\{ [j(j+1) + \frac{3}{4} - \nu] \mathcal{J}_{1\mu\nu}^{j\pm} - \sqrt{(j-\nu+1)(j+\nu)} \mathcal{J}_{2\mu\nu-1}^{j\pm} \right\}, \\
& \mathbf{L}'^2 \mathcal{J}_{2\mu\nu}^{j\pm} = \hbar^2 \left\{ [j(j+1) + \frac{3}{4} + \nu] \mathcal{J}_{2\mu\nu}^{j\pm} - \sqrt{(j-\nu)(j+\nu+1)} \mathcal{J}_{1\mu\nu+1}^{j\pm} \right\}, \\
& L_Z^2 \mathcal{J}_{1\mu\nu}^{j\pm} = \hbar^2 (\nu - \frac{1}{2})^2 \mathcal{J}_{1\mu\nu}^{j\pm}, \quad L_Z^2 \mathcal{J}_{2\mu\nu}^{j\pm} = \hbar^2 (\nu + \frac{1}{2})^2 \mathcal{J}_{2\mu\nu}^{j\pm}; \\
& \bar{O} \quad \mathcal{J}_{1\mu\nu}^{j\pm} = -\hbar^2 \left\{ \sqrt{(j-\nu+1)(j+\nu)} \left[ -\frac{\partial}{\partial u} - (\nu - \frac{1}{2}) \cot u \right] \mathcal{J}_{1\mu\nu-1}^{j\pm} - \left[ \frac{\partial}{\partial u} - (\nu - \frac{1}{2}) \cot u \right] \mathcal{J}_{2\mu\nu}^{j\pm} \right. \\
& \quad \left. + \sqrt{(j-\nu)(j+\nu+1)} \left[ \frac{\partial}{\partial u} - (\nu - \frac{1}{2}) \cot u \right] \mathcal{J}_{1\mu\nu+1}^{j\pm} \right\}, \\
& \bar{O} \quad \mathcal{J}_{2\mu\nu}^{j\pm} = -\hbar^2 \left\{ \sqrt{(j-\nu+1)(j+\nu)} \left[ -\frac{\partial}{\partial u} - (\nu + \frac{1}{2}) \cot u \right] \mathcal{J}_{2\mu\nu-1}^{j\pm} - \left[ -\frac{\partial}{\partial u} - (\nu + \frac{1}{2}) \cot u \right] \mathcal{J}_{1\mu\nu}^{j\pm} \right. \\
& \quad \left. + \sqrt{(j-\nu)(j+\nu+1)} \left[ \frac{\partial}{\partial u} - (\nu + \frac{1}{2}) \cot u \right] \mathcal{J}_{2\mu\nu+1}^{j\pm} \right\},
\end{aligned}$$

$$\text{mit } \quad \bar{O} = L_+ ' \left[ \hbar \frac{\partial}{\partial u} + \cot u L_{Z'} \right] + L_- ' \left[ -\hbar \frac{\partial}{\partial u} + \cot u L_{Z'} \right];$$

$$\mathbf{S}' \cdot \mathbf{L}_2' \mathcal{J}_{1\mu\nu}^{\pm} = \frac{\hbar^2}{2} \left\{ (\nu - \frac{1}{2}) \mathcal{J}_{1\mu\nu}^{\pm} + \left[ \frac{\partial}{\partial u} - (\nu - \frac{1}{2}) \cot u \right] \mathcal{J}_{2\mu\nu}^{\pm} \right\},$$

$$\mathbf{S}' \cdot \mathbf{L}'_2 J_{2\mu\nu}^{\pm} = \frac{\hbar^2}{2} \left\{ -(\nu + \frac{1}{2}) J_{2\mu\nu}^{\pm} + \left[ -\frac{\partial}{\partial u} - (\nu + \frac{1}{2}) \cot u \right] J_{1\mu\nu}^{\pm} \right\};$$

$$\mathbf{L}'^2 J_{1\mu\frac{1}{2}}^{j\pm} = -\hbar^2 (j + \frac{1}{2}) [j + \frac{1}{2} \mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}] J_{1\mu\frac{1}{2}}^{j\pm};$$

$$\bar{O} \quad J_{1\mu\frac{1}{2}}^{j\pm} = -\hbar^2 \left\{ \left[ -1 \pm (j + \frac{1}{2}) (-1)^{j-\frac{1}{2}} \right] \frac{\partial}{\partial u} J_{2\mu\frac{1}{2}}^{j\pm} + \sqrt{(j - \frac{1}{2})(j + \frac{3}{2})} \frac{\partial}{\partial u} J_{1\mu\frac{3}{2}}^{j\pm} \right\}$$

$$\bar{O} \quad \mathcal{J}_{2\mu\frac{1}{3}}^{\pm} = -\hbar^2 \left\{ \left[ -1 \pm (j + \frac{1}{2}) (-1)^{j-\frac{1}{2}} \right] \left[ -\frac{\partial}{\partial u} - \cot u \right] \mathcal{J}_{1\mu\frac{1}{3}}^{\pm} + V(j - \frac{1}{2})(j + \frac{3}{2}) \left[ \frac{\partial}{\partial u} - \cot u \right] \mathcal{J}_{2\mu\frac{1}{3}}^{\pm} \right\}$$