

Zur Lösung des quantenmechanischen Drei-Körper-Problems

H. RUDER

Institut für Theoretische Physik der Universität Erlangen-Nürnberg

(Z. Naturforsch. **23 a**, 579–596 [1968]; eingegangen am 11. Januar 1968)

For the description of a three-body-system 6 coordinates are introduced which take full advantage of the symmetry properties of the system. The Schrödinger equation in these coordinates is derived. Using rotational and reflection symmetry one obtains a set of l respectively $l+1$ coupled differential equations containing only the 3 coordinates of the triangle formed by the 3 masses. Solutions are given for special potentials and arbitrary l . The physical meaning of the differential operators appearing in the equations becomes evident from their application to the solution functions. This leads to a rearrangement of the Hamiltonian in a very transparent form and gives a hint how to get the most effective perturbation expansion. A simple example is worked out. For systems with Coulomb interaction a modification of the method is suggested by physical considerations. The calculation of the ground state energy of the Helium atom shows the rapid convergence of the procedure.

A. Koordinatenwahl

Die in der Natur vorkommenden Systeme aus 3 Teilchen unterscheiden sich durch die Masse der Teilchen und durch die Wechselwirkung zwischen ihnen. Für das folgende nehmen wir an, daß die Wechselwirkung nur eine Funktion der 3 Abstände ist, also keine Spin-Bahn-Kopplung oder ähnliches vorkommt. Wir suchen zunächst Koordinaten, die den allgemeinen physikalischen Symmetrien des Systems angepaßt sind, ohne daß wir dabei auf spezielle Potentiale bzw. Massenverhältnisse Bezug nehmen. Da die meisten Arbeiten über das quantenmechanische 3-Körper-Problem im wesentlichen durch die verwendeten Koordinaten charakterisiert sind, geben wir gleichzeitig einen Überblick über bisher verwendete Ansätze und diskutieren sie kurz.

1. Allgemeine Überlegungen

Da sich die Schwerpunktsbewegung abseparieren läßt, legen wir den Ursprung des raumfesten Koordinatensystems XYZ in den als ruhend gedachten Schwerpunkt. Zur Beschreibung der Lage der 3 Massenpunkte genügen dann 6 Koordinaten. Für diese gibt es 2 Möglichkeiten.

- Man beschreibt jeden Massenpunkt unter Mitverwendung des Schwerpunktsatzes vom raumfesten System aus.
- Man verwendet 3 Koordinaten, um die Gestalt des Dreiecks festzulegen, das von den 3 Massenpunkten gebildet wird, und die restlichen 3 für die Orientierung des Dreiecks im Raum.

Ein Spezialfall von a) wird von WEIGERT¹ behandelt. Die von ihm gewählten Koordinaten liefern

einen einfachen Ausdruck für die kinetische Energie, aber die potentielle Energie hängt im allgemeinen von allen 6 Koordinaten ab. Daher kann man für ein beliebiges Potential nur wenig Allgemeines aussagen. Für unser Ziel ist zweifellos b) besser geeignet, denn hierbei wird der physikalische Tatbestand, daß die potentielle Energie nur von der relativen Lage der 3 Massenpunkte abhängt, voll ausgenutzt. Die potentielle Energie ist dann eine Funktion der 3 Koordinaten, die die Gestalt des Dreiecks festlegen. Diese Koordinaten nennen wir *innere*, die 3 restlichen *äußere* Koordinaten.

II. Innere Koordinaten

Für die Wahl der inneren Koordinaten hat man folgende Möglichkeiten:

- 3 Längen im Dreieck,
- 2 Längen und 1 Winkel,
- 1 Länge und 2 Winkel.

Je nach der Art des vorliegenden Problems wird sich eine der Möglichkeiten als besonders vorteilhaft erweisen.

Im Fall a) ist es naheliegend, für die 3 Längen die gegenseitigen Abstände der 3 Massenpunkte zu wählen, wie es z. B. FLÜGGE und Mitarbeiter² tun. Die potentielle Energie nimmt dann eine einfache Gestalt an, während sich für die kinetische Energie ein recht komplizierter Ausdruck ergibt. Diese Koordinaten zeichnen kein Teilchen aus; sie sind daher besonders der Behandlung von Systemen angepaßt, bei denen die 3 Teilchen entweder alle gleich oder aber alle wirklich verschieden sind.

¹ L. WEIGERT, Dissertation, Erlangen 1959.

² H. DIEHL, S. FLÜGGE, U. SCHRÖDER, A. VÖLKEL u. A. WEIGUNY, Z. Phys. **162**, 1 [1961].



Für den Fall b) bieten sich mehrere Möglichkeiten an, so zum Beispiel 2 Seiten und der dazwischenliegende Winkel. Jedoch ist eine Möglichkeit, die von MANNEBACK und seinem Schüler VO-THE-HAO³, sowie von NÄPFEL und RUDER⁴ verwendet wird, besonders ausgezeichnet. Sie wird in Abb. 1 a erläutert.

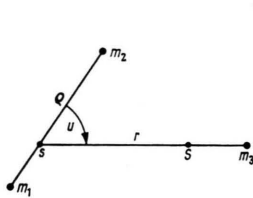


Abb. 1 a. s: Schwerpunkt von m_1 und m_2 . S: Gesamt-schwerpunkt.

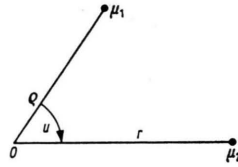


Abb. 1 b. Reduziertes System. 0: Ursprung des raumfesten Koordinatensystems.

Abb. 1. Koordinaten im 3-Teilchen-System. Variationsbereich von q, r, u : $0 \leq q \leq \infty$, $0 \leq r \leq \infty$, $0 \leq u \leq \pi$.

Die Koordinaten q, r und u sollen auch in der vorliegenden Arbeit benutzt werden. Sie haben zwei wesentliche Vorteile:

1. Der Ausdruck für die kinetische Energie des 3-Teilchen-Systems wird gleich dem für ein 2-Teilchen-System mit den Massen

$$\mu_1 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \text{und} \quad \mu_2 = \frac{(m_1 + m_2) m_3}{m_1 + m_2 + m_3}$$

in der Anordnung von Abb. 1 b. Die Umrechnung findet man in⁴. Dieses 2-Teilchen-System nennen wir das reduzierte System, μ_1 und μ_2 die reduzierten Massen. Wir können nun mit dem einfacheren reduzierten System rechnen, müssen aber beachten, daß alle physikalischen Überlegungen am 3-Teilchen-System durchzuführen und dann auf das 2-Teilchen-System zu übertragen sind. So gehen beispielsweise in die potentielle Energie nicht die geometrischen Abstände des reduzierten Systems ein, sondern die wirklichen Abstände

$$q, \sqrt{r^2 + \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} q\right)^2} - 2r \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} q\right) \cos u, \\ \sqrt{r^2 + \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} q\right)^2} + 2r \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} q\right) \cos u.$$

2. Die physikalisch interessanten 3-Teilchen-Systeme enthalten meist 2 gleiche Teilchen. Da unsere Koordinaten 2 Teilchen auszeichnen, können wir diese Symmetrie in einfacher Weise verwerten. Das zeigt sich unter anderem daran, daß bei der Vertau-

schung von Teilchen 1 und 2, falls $m_1 = m_2$ ist, nur eine innere Koordinate geändert wird: der Winkel u geht in $\pi - u$ über.

Fall c) dürfte besonders für Probleme geeignet sein, bei denen der Endzustand aus 3 auseinander fliegenden Teilchen besteht, weil dabei asymptotisch das von den 3 Teilchen gebildete Dreieck ähnlich bleibt und sich also nur eine Koordinate, nämlich die Länge, ändert. Zum Fall c) gehören auch die von ZICKENDRAHT^{5, 6} verwendeten Koordinaten.

III. Äußere Koordinaten

Wir müssen jetzt die Orientierung des Dreiecks im Raum angeben. Dazu führen wir ein rechtwinkliges Koordinatensystem $\xi\eta\zeta$ ein, dessen Lage durch die 3 Massenpunkte eindeutig bestimmt ist. Dieses Koordinatensystem nennen wir körpergebunden. Sein Ursprung soll mit dem Ursprung S des raumfesten Systems zusammenfallen, seine Orientierung gegenüber XYZ wird durch Eulersche Winkel $\alpha\beta\gamma$ festgelegt, die dann unsere äußeren Koordinaten sind.

Für die Einführung des körpergebundenen Koordinatensystems gibt es verschiedene Möglichkeiten. Eine Achsenrichtung, nämlich die Flächennormale, ist durch das System ausgezeichnet. Die für die beiden restlichen Achsen noch verbleibenden Möglichkeiten unterscheiden sich nur durch eine Drehung um diese Achse. Inwieweit dadurch die Schrödinger-Gleichung beeinflusst wird, wurde in⁴ genau untersucht. Auf Grund dieser Ergebnisse nehmen wir als zweite Richtung die q -Richtung. Die Modifikationen, die sich bei Wahl der an sich gleichberechtigten r -Richtung ergeben, werden am Schluß diskutiert. In beiden Fällen ist die für die Anwendung wichtige Symmetrie zweier gleicher Teilchen berücksichtigt.

Es gibt jetzt noch mehrere Möglichkeiten, die Achsen mit ξ, η, ζ zu bezeichnen. Da hierdurch üblicherweise festgelegt wird, wie die Eulerschen Winkel gezählt werden, wirkt sich auch diese Entscheidung in der Schrödinger-Gleichung aus. Es zeigt sich, daß die Wahl der q - (bzw. r -) Richtung als ζ -Achse und damit als körpergebundene Quantisierungsachse zu einer besonders übersichtlichen Schrödinger-Gleichung führt. Die η -Achse soll in Richtung der Flächennormalen liegen. Die gewählten Koordinaten sind in Abb. 2 dargestellt.

³ VO-THE-HAO, Dissertation, Louvain 1960.

⁴ H. NÄPFEL u. H. RUDER, Diplomarbeiten, Erlangen 1964 (unveröffentlicht).

⁵ W. ZICKENDRAHT, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S. **52**, 1565 [1964].

⁶ W. ZICKENDRAHT, Ann. Phys. New York **35**, 18 [1965].

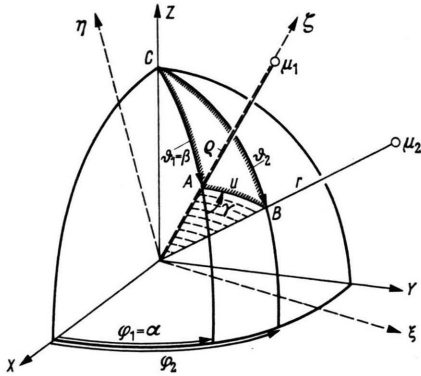


Abb. 2. Innere Koordinaten ρ, r, u und äußere Koordinaten α, β, γ .

$\rho \partial_1 \varphi_1$ und $r \partial_2 \varphi_2$ sind die sphärischen Polarkoordinaten für die reduzierten Massen μ_1 und μ_2 im raumfesten System XYZ . Der Winkel u ist der Polarwinkel von μ_2 im körpergebundenen Koordinatensystem $\xi\eta\zeta$. Der dazugehörige Azimutwinkel ist Null, da μ_2 in der $\xi\zeta$ -Ebene liegt. Diese Feststellungen werden dann wichtig, wenn wir die Lösungsfunktionen und Operatoren der Schrödinger-Gleichung interpretieren.

Verhalten bei Symmetrieeoperationen:

1. Spiegelung am Ursprung

Wir nennen den Paritätsoperator P , seine Wirkung auf die Koordinaten ist:

$$\alpha \rightarrow \pi + \alpha, \quad \beta \rightarrow \pi - \beta, \quad \gamma \rightarrow \pi - \gamma, \\ u \rightarrow u, \quad \rho \rightarrow \rho, \quad r \rightarrow r. \quad (1)$$

2. Vertauschung von Teilchen 1 und 2

Den Austauschoperator bezeichnen wir mit E_{12} ; wenn $m_1 = m_2$ ist, bewirkt er folgende Änderung in den Koordinaten:

$$\alpha \rightarrow \pi + \alpha, \quad \beta \rightarrow \pi - \beta, \quad \gamma \rightarrow 2\pi - \gamma; \\ u \rightarrow \pi - u, \quad \rho \rightarrow \rho, \quad r \rightarrow r. \quad (2)$$

B. Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung für unser System in den Koordinaten $\rho, r, u; \alpha, \beta, \gamma$ erhalten wir am einfachsten auf dem in ⁷ angedeuteten Weg. Es ergibt sich:

$$H \Psi = (H_i + H_a + H_k) \Psi = E \Psi,$$

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \\ - \left(\frac{\hbar^2}{2\mu_1 \rho^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu_2 r^2} \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} + \frac{1}{\sin^2 u} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \right) + V(\rho r u), \\ H_a = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1 \rho^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + \cot \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\sin^2 \beta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} - 2 \cos \beta \frac{\partial^2}{\partial \gamma \partial \alpha} + \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right) - 2 \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \right] \\ H_k = \frac{1}{2\mu_1 \rho^2} \left[\frac{\hbar}{i} e^{-i\gamma} \left(\cot \beta \frac{\partial}{\partial \gamma} + i \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) \left(\cot u \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \gamma} + \hbar \frac{\partial}{\partial u} \right) \right. \\ \left. + \frac{\hbar}{i} e^{i\gamma} \left(\cot \beta \frac{\partial}{\partial \gamma} - i \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) \left(\cot u \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \gamma} - \hbar \frac{\partial}{\partial u} \right) \right]. \quad (3)$$

Für $m_1 = \infty$, $m_2 = m_3$ Elektronenmasse geht (3) in die Schrödinger-Gleichung von HYLLEAAS ⁸ für 2 Elektronen im Zentralfeld über. Bei dieser Zuordnung hat man allerdings nicht mehr das einfache Verhalten bei Vertauschung der beiden Elektronen.

Für das Folgende erweist es sich als zweckmäßig, den Gesamtdrehimpuls \mathbf{L} auf die Achsen des körpergebundenen Koordinatensystems zu zerlegen. Diese Komponenten nennen wir kurz körpergebundene Komponenten. Während in der klassischen Physik ein Drehimpulsvektor immer ohne Schwierigkeiten auch auf mitbewegte Achsen zerlegt werden kann, ist beim quantenmechanischen Drehimpulsoperator Vorsicht geboten, denn die körpergebundenen Komponenten zeigen hier ein anderes Verhalten als die raumfesten. Die auftretenden Probleme wurden in ⁷ erörtert. Wir geben an dieser Stelle nur die Ausdrücke an, die wir später brauchen.

Die körpergebundenen Komponenten von \mathbf{L} sind in unserem Fall:

$$L_\xi = \frac{\hbar}{i} \left(\sin \gamma \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{\cos \gamma}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} + \cot \beta \cos \gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right), \\ L_\eta = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \gamma \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{\sin \gamma}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} - \cot \beta \sin \gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right), \quad L_\zeta = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \gamma}.$$

Sie genügen den „anormalen“ Vertauschungsrelationen: $L_\xi L_\eta - L_\eta L_\xi = (\hbar/i) L_\zeta$ und zyklisch.

⁷ H. NÄPFEL, H. RUDER u. H. VOLZ, Z. Naturforsch. **23 a**, 199 [1968].

⁸ E. A. HYLLEAAS, Z. Phys. **48**, 469 [1928].

Wir definieren noch folgende Operatoren:

$$\begin{aligned} L_+ &= L_\xi + i L_\eta = \frac{\hbar}{i} e^{-i\gamma} \left(\cot \beta \frac{\partial}{\partial \gamma} + i \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right), \\ L_- &= L_\xi - i L_\eta = \frac{\hbar}{i} e^{i\gamma} \left(\cot \beta \frac{\partial}{\partial \gamma} - i \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right), \\ L^2 &= L_\xi^2 + L_\eta^2 + L_\zeta^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + \cot \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\sin^2 \beta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} - 2 \cos \beta \frac{\partial^2}{\partial \gamma \partial \alpha} + \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Mit diesen Operatoren läßt sich die Schrödinger-Gleichung (3) wie folgt schreiben:

$$\left\{ H_i + \frac{1}{2 \mu_1 \varrho^2} (L^2 - 2 L_\zeta^2) + \frac{1}{2 \mu_1 \varrho^2} \left[L_+ \left(\cot u L_\zeta + \hbar \frac{\partial}{\partial u} \right) + L_- \left(\cot u L_\zeta - \hbar \frac{\partial}{\partial u} \right) \right] \right\} \Psi = E \Psi. \quad (4)$$

Eine ähnliche Zusammenfassung wurde von MANNEBACK angegeben (mündliche Mitteilung).

C. Invarianzen des Hamilton-Operators

I. Drehinvarianz

Da die potentielle Energie nur von den inneren Koordinaten abhängt, ist der Hamilton-Operator drehinvariant. Die Eigenfunktionen lassen sich dann nach den Darstellungskoeffizienten der Drehgruppe entwickeln. Im Laufe dieser Arbeit hat es sich als zweckmäßig erwiesen, mit den Darstellungskoeffizienten $D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma)$ von ROSE⁹ zu rechnen; man vermeidet dadurch unter anderem Faktoren wie $(-1)^{m-n}$. Wir notieren einige Eigenschaften dieser $D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma)$:

$$\begin{aligned} D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma) &= e^{im\alpha} d_{mn}^l(\beta) e^{in\gamma}, \\ \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} D_{mn}^l(\alpha\beta\gamma) D_{m'n'}^{l'*}(\alpha\beta\gamma) d\alpha \sin \beta d\beta d\gamma &= \frac{8\pi^2}{2l+1} \delta_{mm'} \delta_{nn'} \delta_{ll'}, \\ L^2 D_{mn}^{l*} &= \hbar^2 l(l+1) D_{mn}^{l*}, \quad L_\zeta D_{mn}^{l*} = \hbar n D_{mn}^{l*}; \end{aligned} \quad (5)$$

l ist die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses, m die Projektion auf die raumfeste Z -Achse und n die Projektion auf die körpergebundene ζ -Achse.

$$L_+ D_{mn}^{l*} = \hbar \sqrt{(l+n)(l-n+1)} D_{m+1,n}^{l*}, \quad L_- D_{mn}^{l*} = \hbar \sqrt{(l-n)(l+n+1)} D_{m-1,n}^{l*}. \quad (6)$$

Dieser gegenüber den raumfesten Operatoren umgekehrte Schraubsinn von L_+ und L_- folgt aus den anomalen Vertauschungsrelationen.

Die Drehinvarianz des Hamilton-Operators liefert also folgende Gestalt der Eigenfunktionen für einen Zustand mit gegebenem l und m :

$$\Psi_m^l(\varrho r u, \alpha\beta\gamma) = \sum_{n=-l}^{n=+l} \Phi_{mn}^l(\varrho r u) D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma). \quad (7)$$

Die Projektionsquantenzahl n nimmt im allgemeinen alle Werte von $-l$ bis $+l$ an, da unser Hamilton-Operator einen Teil, nämlich H_k , enthält, der gegenüber Drehungen um die ζ -Achse nicht invariant ist. Zur vollständigen Lösung der Schrödinger-Gleichung müssen wir jetzt noch die $2l+1$ unbekannten Funktionen $\Phi_{mn}(\varrho r u)$ bestimmen.

II. Parität

Der Hamilton-Operator unseres Systems ist invariant gegen Spiegelung am Ursprung. Die Eigenfunktionen besitzen daher Parität: $P\Psi = \pm\Psi$. Von (1) wissen wir, wie der Paritätsoperator P auf die Koordinaten wirkt; damit erhalten wir:

$$P D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma) = D_{mn}^{l*}(\pi+\alpha, \pi-\beta, \pi-\gamma) = (-1)^{l+n} D_{m-n}^{l*}(\alpha\beta\gamma). \quad (8)$$

Mit dieser Überlegung läßt sich unser Lösungsansatz weiter einschränken. Wir bilden dazu Funktionen mit bestimmter Parität:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha\beta\gamma) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma) \pm (-1)^{l+n} D_{m-n}^{l*}(\alpha\beta\gamma) \}, \quad n \neq 0, \\ \mathcal{L}_{m0}^{l\pm}(\alpha\beta\gamma) &= \frac{1}{2} \{ D_{m0}^{l*}(\alpha\beta\gamma) \pm (-1)^l D_{m0}^{l*}(\alpha\beta\gamma) \}, \quad n = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

⁹ M. E. ROSE, Elementary Theory of Angular Momentum, John Wiley & Sons, New York 1966.

Die Funktionen \mathcal{L}_{mn}^{l+} haben positive, \mathcal{L}_{mn}^{l-} negative Parität: $P \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = \pm \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}$, $\mathcal{L}_{m0}^{l+} \equiv 0$ für l ungerade, $\mathcal{L}_{m0}^{l-} \equiv 0$ für l gerade.

Der Faktor $1/\sqrt{2}$ bzw. $1/2$ dient nur dazu, daß die $\mathcal{L}_{mn}^{l\pm}$ dieselbe Normierung besitzen wie die $D_{mn}^{l\pm}$.

Unsere Lösungsfunktionen mit definierter Parität werden dann:

$$\Psi_m^{l\pm} = \sum_{n=0, n-1}^{n=l} \Phi_{mn}^{l\pm}(\varrho r u) \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha \beta \gamma); \quad P \Psi_m^{l\pm} = \pm \Psi_m^{l\pm}. \quad (10)$$

Auf Grund dieser Paritätsüberlegung reduziert sich für einen Zustand mit Drehimpuls l und gegebener Parität die Zahl der unbekannten Funktionen $\Phi_{mn}^{l\pm}$ auf l bzw. $l+1$.

III. Teilchenvertauschung

Wir betrachten den Fall, daß in unserem System 2 Teilchen gleich sind. Der Hamilton-Operator ist dann invariant gegen Vertauschung der beiden Teilchen, und die Wellenfunktion verhält sich entweder symmetrisch oder antisymmetrisch bei dieser Operation. Die beiden gleichen Teilchen werden bei unserer Wahl der Koordinaten die Teilchen 1 und 2. Wie sich bei ihrer Vertauschung die Koordinaten ändern, haben wir in (2) angegeben. Damit läßt sich die Wirkung des Austauschoperators E_{12} auf unseren Lösungsansatz berechnen:

$$\begin{aligned} E_{12} D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma) &= D_{mn}^{l*}(\pi + \alpha, \pi - \beta, 2\pi - \gamma) = (-1)^l D_{m-n}^{l*}(\alpha \beta \gamma), \\ E_{12} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha \beta \gamma) &= \pm (-1)^n \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha \beta \gamma), \\ E_{12} \Psi_m^{l\pm} &= E_{12} \sum_n \Phi_{mn}^{l\pm} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = \sum_n (E_{12} \Phi_{mn}^{l\pm}) \cdot (E_{12} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}) = \pm \sum_n (E_{12} \Phi_{mn}^{l\pm}) \cdot (-1)^n \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = \left(\pm\right) \Psi_m^{l\pm} \\ &\rightarrow E_{12} \Phi_{mn}^{l\pm}(\varrho r u) = \Phi_{mn}^{l\pm}(\varrho r \pi - u) = \pm (-1)^n \Phi_{mn}^{l\pm}(\varrho r u). \end{aligned} \quad (11)$$

Wir führen die 4 verschiedenen Fälle einzeln auf:

$$\begin{aligned} E_{12} \Psi_m^{l+} &= + \Psi_m^{l+} \rightarrow E_{12} \Phi_{mn}^{l+} = + (-1)^n \Phi_{mn}^{l+}, \\ E_{12} \Psi_m^{l-} &= - \Psi_m^{l-} \rightarrow E_{12} \Phi_{mn}^{l-} = - (-1)^n \Phi_{mn}^{l-}, \\ E_{12} \Psi_m^{l+} &= + \Psi_m^{l-} \rightarrow E_{12} \Phi_{mn}^{l-} = - (-1)^n \Phi_{mn}^{l-}, \\ E_{12} \Psi_m^{l-} &= - \Psi_m^{l+} \rightarrow E_{12} \Phi_{mn}^{l+} = + (-1)^n \Phi_{mn}^{l+}. \end{aligned} \quad (12)$$

Diese Überlegungen verringern die Anzahl der Funktionen $\Phi_{mn}^{l\pm}$, die für einen Zustand mit gegebenen Quantenzahlen zu bestimmen sind, nicht weiter, wie dies bei der Parität der Fall war, sondern liefern eine Aussage über die Funktionen $\Phi_{mn}^{l\pm}$ selbst. Wir werden deshalb die Lösungstheorie für die äußeren Koordinaten ohne Spezialisierung auf 2 gleiche Teilchen durchführen und erst im Laufe der Lösungstheorie für die inneren Koordinaten wieder darauf zurückkommen.

D. Lösungstheorie für die äußeren Koordinaten

Wir müssen nun den Hamilton-Operator auf unseren Lösungsansatz

$$\Psi_m^{l\pm}(\varrho r u, \alpha \beta \gamma) = \sum_n \Phi_{mn}^{l\pm}(\varrho r u) \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha \beta \gamma)$$

wirken lassen und die $\mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha \beta \gamma)$ abseparieren, damit wir Bestimmungsgleichungen für die unbekannten Funktionen $\Phi_{mn}^{l\pm}(\varrho r u)$ erhalten. Dazu untersuchen wir zunächst, wie die einzelnen in der Schrödinger-Gleichung vorkommenden Operatoren auf die Funktionen $\mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha \beta \gamma)$ wirken.

$$\begin{aligned} L^2 \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} &= \hbar^2 l(l+1) \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}, \quad L_z^2 \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = \hbar^2 n^2 \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}, \\ H_i \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} &= \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varrho^2} + \frac{2}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\hbar^2}{2\mu_1 \varrho^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu_2 r^2} \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} - \frac{n^2}{\sin^2 u} \right) + V(\varrho r u) \right\} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} \stackrel{\text{Def.}}{=} H_{in} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}, \\ H_a \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} &= \frac{\hbar^2}{2\mu_1 \varrho^2} \{ l(l+1) - 2n^2 \} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}, \quad H_{in} + \frac{\hbar^2}{2\mu_1 \varrho^2} \{ l(l+1) - 2n^2 \} \stackrel{\text{Def.}}{=} H_{in}^l, \\ H_k \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} &= \frac{\hbar^2}{2\mu_1 \varrho^2} \left\{ \sqrt{l(l-n)(l+n+1)} \left(n \cot u - \frac{\partial}{\partial u} \right) \mathcal{L}_{mn+1}^{l\pm} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{l(l+n)(l-n+1)} \left(n \cot u + \frac{\partial}{\partial u} \right) \mathcal{L}_{mn-1}^{l\pm} \right\} \\ &= b_{n+1}^l \mathcal{L}_{mn+1}^{l\pm} - b_{-(n-1)}^l \mathcal{L}_{mn-1}^{l\pm}; \quad n \neq 0, n \neq 1, n \neq l \end{aligned}$$

mit
$$b_n^l = \frac{\hbar^2}{2\mu_1 \varrho^2} \sqrt{(l+n)(l-n+1)} \left((n-1) \cot u - \frac{\partial}{\partial u} \right).$$

Die Operatoren H_i und H_a lassen n unverändert, während H_k von n auf $n+1$ und $n-1$ schraubt. An dieser Stelle macht sich bemerkbar, daß H_i und H_a gegenüber Drehungen um die ζ -Achse invariant sind, H_k dagegen nicht.

Das Verhalten für $n=0$, $n=1$ und $n=l$ wird getrennt untersucht:

$$\begin{aligned} l \text{ gerade: } & \begin{cases} n=0: & \mathcal{L}_{m0}^{l-} \equiv 0, & H_k \mathcal{L}_{m0}^{l+} = \sqrt{2} b_1^l \mathcal{L}_{m1}^{l+}, \\ n=1: & H_k \mathcal{L}_{m1}^{l-} = b_2^l \mathcal{L}_{m2}^{l-}, & H_k \mathcal{L}_{m1}^{l+} = b_2^l \mathcal{L}_{m2}^{l+} - \sqrt{2} b_{-0}^l \mathcal{L}_{m0}^{l+}; \end{cases} \\ l \text{ ungerade: } & \begin{cases} n=0: & \mathcal{L}_{m0}^{l+} \equiv 0, & H_k \mathcal{L}_{m0}^{l-} = \sqrt{2} b_1^l \mathcal{L}_{m1}^{l-}, \\ n=1: & H_k \mathcal{L}_{m1}^{l+} = b_2^l \mathcal{L}_{m2}^{l+}, & H_k \mathcal{L}_{m1}^{l-} = b_2^l \mathcal{L}_{m2}^{l-} - \sqrt{2} b_{-0}^l \mathcal{L}_{m0}^{l-}; \end{cases} \\ \text{für alle } l: & \quad n=l: \quad H_k \mathcal{L}_{ml}^{l\pm} = -b_{-(l-1)}^l \mathcal{L}_{m(l-1)}^{l\pm}. \end{aligned}$$

Wir wenden jetzt den Hamilton-Operator auf unsere Lösungsfunktion an, und zwar zunächst ohne Berücksichtigung der Sonderfälle $n=0$, $n=1$ und $n=l$:

$$\begin{aligned} (H-E) \Psi_m^{l\pm} &= (H_i + H_a + H_k - E) \sum_n \Phi_{mn}^{l\pm} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} \\ &= \sum_n \{ (H_{in}^l - E) \Phi_{mn}^{l\pm} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} + b_{n+1}^l \Phi_{mn}^{l\pm} \mathcal{L}_{mn+1}^{l\pm} - b_{-(n-1)}^l \Phi_{mn}^{l\pm} \mathcal{L}_{mn-1}^{l\pm} \} \\ &= \sum_n \{ (H_{in}^l - E) \Phi_{mn}^{l\pm} + b_n^l \Phi_{mn-1}^{l\pm} - b_{-n}^l \Phi_{mn+1}^{l\pm} \} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = 0. \end{aligned}$$

Die Funktionen $\mathcal{L}_{mn}^{l\pm}$ sind linear unabhängig; es muß daher jede Klammer für sich verschwinden. Zusammen mit den bereits untersuchten Sonderfällen $n=0$, $n=1$ und $n=l$ erhalten wir so zu jeder Parität und jedem Drehimpuls ein System von gekoppelten Differentialgleichungen für die Funktionen $\Phi_{mn}^{l\pm}$. Zur besseren Übersicht schreiben wir die auftretenden Fälle ausführlich hin.

Positive Parität

$$\begin{aligned} \underline{l=0:} \quad & (H_{i0}^0 - E) \Phi_{m0}^{0+} = 0; \\ \underline{l=1:} \quad & (H_{i1}^1 - E) \Phi_{m1}^{1+} = 0; \\ \underline{l=2:} \quad & (H_{i0}^2 - E) \Phi_{m0}^{2+} - \sqrt{2} b_{-0}^2 \Phi_{m1}^{2+} = 0 \\ & \sqrt{2} b_1^2 \Phi_{m0}^{2+} + (H_{i1}^2 - E) \Phi_{m1}^{2+} - b_{-1}^2 \Phi_{m2}^{2+} = 0 \\ & b_2^2 \Phi_{m1}^{2+} + (H_{i2}^2 - E) \Phi_{m2}^{2+} = 0 \\ \underline{l \text{ ungerade}} & \\ (H_{i1}^l - E) \Phi_{m1}^{l+} - b_{-1}^l \Phi_{m2}^{l+} &= 0 \\ b_2^l \Phi_{m1}^{l+} + (H_{i2}^l - E) \Phi_{m2}^{l+} - b_{-2}^l \Phi_{m3}^{l+} &= 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - \\ b_n^l \Phi_{mn-1}^{l+} + (H_{in}^l - E) \Phi_{mn}^{l+} - b_{-n}^l \Phi_{mn+1}^{l+} &= 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - \\ b_l^l \Phi_{ml-1}^{l+} + (H_{il}^l - E) \Phi_{ml}^{l+} &= 0 \end{aligned} \tag{13}$$

$$\begin{aligned} \underline{l \text{ gerade}} & \\ (H_{i0}^l - E) \Phi_{m0}^{l+} - \sqrt{2} b_{-0}^l \Phi_{m1}^{l+} &= 0 \\ \sqrt{2} b_1^l \Phi_{m0}^{l+} + (H_{i1}^l - E) \Phi_{m1}^{l+} - b_{-1}^l \Phi_{m2}^{l+} &= 0 \\ b_2^l \Phi_{m1}^{l+} + (H_{i2}^l - E) \Phi_{m2}^{l+} - b_{-2}^l \Phi_{m3}^{l+} &= 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - \\ b_n^l \Phi_{mn-1}^{l+} + (H_{in}^l - E) \Phi_{mn}^{l+} - b_{-n}^l \Phi_{mn+1}^{l+} &= 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - \\ b_l^l \Phi_{ml-1}^{l+} + (H_{il}^l - E) \Phi_{ml}^{l+} &= 0 \end{aligned} \tag{14}$$

Negative Parität

$l=0$ existiert nicht. Der Grundzustand hat immer positive Parität.

$$l=1: \quad (H_{i0}^1 - E) \Phi_{m0}^{1-} - \sqrt{2} b_{-0}^1 \Phi_{m1}^{1-} = 0, \quad \sqrt{2} b_1^1 \Phi_{m0}^{1-} + (H_{i1}^1 - E) \Phi_{m1}^{1-} = 0;$$

$$l=2: \quad (H_{i1}^2 - E) \Phi_{m1}^{2-} - b_{-1}^2 \Phi_{m2}^{2-} = 0, \quad b_2^2 \Phi_{m1}^{2-} + (H_{i2}^2 - E) \Phi_{m2}^{2-} = 0;$$

l ungerade bei negativer Parität entspricht dem Fall l gerade bei positiver Parität und umgekehrt.

E. Lösungstheorie für die inneren Koordinaten

Während sich die Lösungstheorie für die äußeren Koordinaten ohne Annahme über die Form der potentiellen Energie entwickeln ließ, ist das für die inneren Koordinaten nicht mehr möglich. Die Funktionen $\Phi_{mn}^{l\pm}(\varrho r u)$ können ohne Kenntnis des Potentials nicht näher bestimmt werden. Eine exakte Lösung mit bekannten Funktionen wird nur in speziellen Fällen möglich sein; im übrigen wird man numerisch oder mit Störungsrechnung vorgehen müssen. Wir suchen zunächst solche Spezialfälle und diskutieren die Lösungen. Dazu wählen wir einen Weg, der uns ohne viel Rechnung zum Ziel führt.

I. Spezielle Lösung im raumfesten Koordinatensystem

Wir erinnern uns an die in Abschnitt A erwähnte Möglichkeit, die 2 reduzierten Massen im raumfesten XYZ-System mit den sphärischen Polarkoordinaten $\varrho, \vartheta_1, \varphi_1$ und $r, \vartheta_2, \varphi_2$ zu beschreiben. In diesen Koordinaten können wir den Hamilton-Operator sofort angeben:

$$H(\varrho \vartheta_1 \varphi_1, r \vartheta_2 \varphi_2) = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \Delta(\varrho \vartheta_1 \varphi_1) - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \Delta(r \vartheta_2 \varphi_2) + V(\varrho \vartheta_1 \varphi_1, r \vartheta_2 \varphi_2) \quad (15)$$

Dabei bedeutet $\Delta(\varrho \vartheta_1 \varphi_1)$ bzw. $\Delta(r \vartheta_2 \varphi_2)$ den Laplace-Operator in den entsprechenden Koordinaten.

Wir betrachten jetzt den Fall, daß zwischen den beiden reduzierten Massen keine Wechselwirkung vorhanden ist: die potentielle Energie hat dann die Form

$$V(\varrho \vartheta_1 \varphi_1, r \vartheta_2 \varphi_2) = V_1(\varrho \vartheta_1 \varphi_1) + V_2(r \vartheta_2 \varphi_2),$$

und der Hamilton-Operator ist separierbar in

$$H(\varrho \vartheta_1 \varphi_1, r \vartheta_2 \varphi_2) = H_1(\varrho \vartheta_1 \varphi_1) + H_2(r \vartheta_2 \varphi_2).$$

Berücksichtigen wir noch, daß die potentielle Energie bei unseren 3-Teilchen-Systemen nur von den inneren Koordinaten ϱ, r, u abhängt, so erhalten wir

die Bedingung:

$$V_1(\varrho \vartheta_1 \varphi_1) + V_2(r \vartheta_2 \varphi_2) = V(\varrho r u).$$

Sie ist nur dann erfüllt, wenn in der potentiellen Energie die Winkel überhaupt nicht vorkommen, also $V = V_1(\varrho) + V_2(r)$ ist. Wir haben damit 2 voneinander unabhängige Teilchen in einem Zentralfeld, wobei die radiale Abhängigkeit des Potentials für beide Teilchen verschieden sein kann. Dieses Problem läßt sich sofort weiter lösen: Man separiert die Winkel $\vartheta_1 \varphi_1$ und $\vartheta_2 \varphi_2$ ab und erhält 2 unabhängige Differentialgleichungen für ϱ und r . Als Eigenfunktion für die reduzierte Masse μ_1 bekommen wir: $P_{il_1}(\varrho) Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1)$ und für μ_2 : $R_{kl_2}(r) Y_{l_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2)$. Dabei sind $Y_{l m}(\vartheta, \varphi)$ die Eigenfunktionen des raumfesten Bahndrehimpulsoperators $L_v^{2,0}$. l_v ist die Quantenzahl des Bahndrehimpulses und m_v die Projektion auf die raumfeste Z-Achse. $P_{il_1}(\varrho)$ und $R_{kl_2}(r)$ sind die zu den speziellen Potentialen $V_1(\varrho)$ und $V_2(r)$ gehörenden Radialfunktionen. Die uns interessierenden Lösungen müssen einen scharfen Gesamtdrehimpuls mit der Quantenzahl l und der Projektion m auf die Z-Achse und Parität besitzen. Wir bilden deshalb die entsprechende Linearkombination und erhalten als Lösung für das Gesamtsystem:

$$\Psi_m^{u, l \pm}(\varrho \vartheta_1 \varphi_1, r \vartheta_2 \varphi_2) = P_{il_1}(\varrho) R_{kl_2}(r) \sum_{m_1+m_2=m} C(l_1 l_2 l, m_1 m_2 m) Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1) Y_{l_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2). \quad (16)$$

$C(l_1 l_2 l, m_1 m_2 m)$ sind die Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Die Parität dieser Lösung ist $(-1)^{l_1+l_2}$, denn die Funktionen $Y_{l m}(\vartheta, \varphi)$ haben in diesem Fall die Parität $(-1)^{l_v}$.

Nach (10) läßt sich in den Koordinaten $\varrho r u$, $\alpha \beta \gamma$ jede Lösung wie folgt schreiben:

$$\Psi_m^{l \pm}(\varrho r u, \alpha \beta \gamma) = \sum_n \Phi_{mn}^{l \pm}(\varrho r u) \mathcal{L}_{mn}^{l \pm}(\alpha \beta \gamma).$$

Ein Vergleich mit der obigen Lösung im raumfesten System zeigt, daß für das spezielle von u unabhängige Potential $V = V_1(\varrho) + V_2(r)$ gelten muß:

$$\Phi_{mn}^{l \pm}(\varrho r u) = P_{il_1}(r) R_{kl_2}(r) \chi_{mn}^{u, l \pm}(u). \quad (17)$$

Nun hängen die Winkel $\vartheta_1, \varphi_1; \vartheta_2, \varphi_2$ eindeutig mit den Winkeln α, β, γ, u zusammen, und die Funktionen $Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1), Y_{l_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2)$ und $\mathcal{L}_{mn}^{l_1 \pm}(\alpha, \beta, \gamma)$ sind bekannt. Wir können also die unbekannten Funktionen $\chi_{mn}^{l_1 l_2 \pm}(u)$ bestimmen, indem wir die raumfeste Lösung umrechnen. Die Koordinaten ϱ und r werden von der Umrechnung nicht betroffen. An dieser Stelle sieht man, daß der Winkel u für die Lösungstheorie der inneren Koordinaten eine besondere Rolle spielt. Wir beschäftigen uns deshalb zuerst mit der u -Abhängigkeit. Damit die Rechnungen übersichtlicher werden, lassen wir die ϱ - und r -Abhängigkeit vorläufig außer Acht. Wir können sie später ohne zusätzliche Schwierigkeiten wieder mitnehmen.

Wir setzen das in unsere raumfeste Lösung ein:

$$\begin{aligned} \Psi_m^{l_1 l_2 \pm}(\vartheta_1 \varphi_1, \vartheta_2 \varphi_2) &= \sum_{m_1+m_2=m} C(l_1 l_2 l, m_1 m_2 m) Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1) Y_{l_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2) \\ &= \sum_{m_1+m_2=m} C(l_1 l_2 l, m_1 m_2 m) \sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}} D_{m_1 0}^{l_1*}(\alpha \beta \gamma) \cdot \sum_{n=-l_2}^{l_2} D_{m_2 n}^{l_2*}(\alpha \beta \gamma) Y_{l_2 n}(u, 0) = \Psi_m^{l_1 \pm}(u, \alpha \beta \gamma). \end{aligned}$$

Diesen Ausdruck formen wir mit der folgenden Beziehung⁹ weiter um:

$$\sum_{m_1+m_2=m} C(l_1 l_2 l, m_1 m_2 m) D_{m_1 n_1}^{l_1*}(\alpha \beta \gamma) D_{m_2 n_2}^{l_2*}(\alpha \beta \gamma) = C(l_1 l_2 l, n_1 n_2 n_1 + n_2) D_{mn_1+n_2}^{l*}(\alpha \beta \gamma)$$

und erhalten:

$$\Psi_m^{l_1 l_2 \pm}(u, \alpha \beta \gamma) = \sum_{n=-l_2}^{l_2} \sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}} C(l_1 l_2 l, 0 n n) Y_{l_2 n}(u, 0) D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma). \quad (18)$$

Um mit (10) vergleichen zu können, fassen wir die Glieder mit n und $-n$ zusammen. Wir verwenden dazu:

$$\begin{aligned} C(l_1 l_2 l, 0 -n -n) &= (-1)^{l_1+l_2-l} C(l_1 l_2 l, 0 n n), \\ Y_{l_2 -n}(u, 0) &= (-1)^n Y_{l_2 n}^*(u, 0) = (-1)^n Y_{l_2 n}(u, 0). \end{aligned}$$

Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} \Psi_m^{l_1 l_2 \pm}(u, \alpha \beta \gamma) &= \sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}} C(l_1 l_2 l, 0 0 0) Y_{l_2 0}(u, 0) D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma) \\ &+ \sum_{n=1}^{l_2} \sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}} C(l_1 l_2 l, 0 n n) Y_{l_2 n}(u, 0) \{D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma) + (-1)^{l_1+l_2} (-1)^{l+n} D_{m-n}^{l*}(\alpha \beta \gamma)\}. \end{aligned} \quad (19)$$

Wenn wir noch berücksichtigen, daß die Parität dieser Lösung $(-1)^{l_1+l_2}$ ist, dann sehen wir, daß die Klammern $\{D_{mn}^{l*} + (-1)^{l_1+l_2} (-1)^{l+n} D_{m-n}^{l*}\}$ bis auf den Faktor $1/\sqrt{2}$ bzw. $1/2$ die Funktionen $\mathcal{L}_{mn}^{l_1 \pm}$ sind. Der Fall $n=0$ paßt sich dadurch an, daß für l_1+l_2+l ungerade $C(l_1 l_2 l, 0 0 0) = 0$ ist. Damit erhalten wir für die gesuchten Funktionen:

$$\begin{aligned} \chi_{mn}^{l_1 l_2 \pm}(u) &= \sqrt{\frac{2l_1+1}{2\pi}} C(l_1 l_2 l, 0 n n) Y_{l_2 n}(u, 0), n \neq 0 \\ \chi_{m0}^{l_1 l_2 \pm}(u) &= \sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}} C(l_1 l_2 l, 0 0 0) Y_{l_2 0}(u, 0). \end{aligned} \quad (20)$$

Die Lösungsfunktionen mit l_1+l_2 gerade gehören zu $\chi_{mn}^{l_1 l_2 +}(u)$, die mit l_1+l_2 ungerade zu $\chi_{mn}^{l_1 l_2 -}(u)$.

II. Umrechnung der raumfesten Lösung

Wegen des Transformationsverhaltens der Kugelfunktionen bei Drehungen gilt:

$$Y_{l_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2) = \sum_{n=-l_2}^{l_2} D_{m_2 n}^{l_2*}(\alpha \beta \gamma) Y_{l_2 n}(u, 0).$$

Die Kugelfunktionen hängen mit den Darstellungskoeffizienten zusammen:

$$Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1) = \sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}} D_{m_1 0}^{l_1*}(\varphi_1 \vartheta_1 0).$$

Da $\varphi_1 = \alpha, \vartheta_1 = \beta$ ist und $D_{m_1 0}^{l_1*}$ vom dritten Winkel nicht abhängt, können wir schreiben:

$$Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1) = \sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}} D_{m_1 0}^{l_1*}(\alpha \beta \gamma).$$

III. Diskussion der umgerechneten Lösung

Als erstes stellen wir fest, daß unsere umgerechneten Lösungsfunktionen $P_{il_1}(\varrho) R_{kl_2}(r) \chi_{mn}^{l_1 l_2 \pm}(u)$ von der Quantenzahl m nicht abhängen. Das gilt nicht nur für dieses spezielle Potential, sondern ganz allgemein, denn in den gekoppelten Differentialgleichungen für die $\Phi_{mn}^{l_1 \pm}(\varrho r u)$ kommt m nicht vor. Wir können uns das anschaulich so klarmachen: Bei einer potentiellen Energie, die von den äußeren Koordinaten α, β, γ unabhängig ist, können die Anteile der Wellenfunktion, die die Lage der Massen relativ zum körpergebundenen Koordinatensystem beschreiben,

nicht von der Richtung des Gesamtdrehimpulses im Raum abhängen.

Für die weitere Diskussion formen wir die Lösung mit der folgenden Beziehung um:

$$\begin{aligned} C(l_1 l_2 l, 0 n n) \\ = (-1)^{l_2+n} \sqrt{\frac{2l+1}{2l_1+1}} C(l l_2 l_1, -n n 0) \\ = (-1)^{l-l_1+n} \sqrt{\frac{2l+1}{2l_1+1}} C(l l_2 l_1, n -n 0). \end{aligned}$$

Damit wird:

$$\begin{aligned} \Psi_m^{l l_1 l_2 \pm}(u, \alpha \beta \gamma) &= (-1)^{l-l_1} \sum_{n=-l_2}^{l_2} C(l l_2 l_1, n -n 0) \\ &\cdot \sqrt{\frac{2l+1}{8\pi^2}} D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma) \sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0). \quad (21) \end{aligned}$$

Wir betrachten jetzt die einzelnen Faktoren:

$\sqrt{(2l+1)/8\pi^2} D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma)$ kennen wir bereits (5), es sind die auf 1 normierten Eigenfunktionen zum Gesamtdrehimpulsoperator L^2 .

Um den Faktor $\sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0)$ zu deuten, erinnern wir uns, woraus diese Funktionen entstanden sind. Wir haben sie erhalten, indem wir die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulsoperators L_2^2 vom XYZ-System auf das $\xi\eta\zeta$ -System transformiert haben. Die $Y_{l_2-n}(u, 0)$ sind also die Eigenfunktionen von L_2^2 im körpergebundenen Koordinatensystem, und $-n$ ist die Projektionsquantenzahl von L_2 auf die ζ -Achse. Die Winkel u und 0 sind die Polarwinkel von μ_2 im $\xi\eta\zeta$ -System. Der Azimutwinkel ist Null, weil die ξ -Achse durch μ_2 gerade so definiert wird, daß μ_2 in der ξ - ζ -Ebene liegt (s. Abschnitt A III). Wir transformieren also von einem raumfesten in ein anderes verdrehtes Koordinatensystem, das sich mit μ_2 in spezieller Weise mitbewegt. Diese Besonderheit ist auch der Grund dafür, daß nicht die Funktionen $Y_{l_2-n}(u, 0)$, sondern $\sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0)$ auf 1 normiert sind, denn das Volumenelement für das Normierungsintegral lautet in unserem Fall

$$d\tau = \sin u \, du \, d\alpha \, \sin \beta \, d\beta \, d\gamma^4,$$

und es gilt

$$\int_0^\pi Y_{l_2-n}(u, 0) Y_{l_2'-n}(u, 0) \sin u \, du = (1/2\pi) \delta_{l_2 l_2'}.$$

Die Orthogonalität bezüglich der Quantenzahl n liefern die Funktionen $D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma)$.

Vergleichen wir die in den Clebsch-Gordan-Koeffizienten auftretenden Quantenzahlen $l l_2 l_1, n -n 0$ mit den Quantenzahlen der Funktionen

$$\sqrt{(2l+1)/8\pi^2} D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma) \text{ und } \sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0)$$

und beachten die Summation über n , so sehen wir, daß unsere Funktion $\Psi_m^{l l_1 l_2 \pm}(u, \alpha \beta \gamma)$ die gleiche Form hat wie eine Clebsch-Gordan-Summe, bei der aus den Produkten der Eigenfunktionen von L^2 und L_2^2 eine Wellenfunktion gebildet wird, die zusätzlich Eigenfunktion von $L_1^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{L}_2)^2$ ist. Das Pluszeichen zwischen \mathbf{L} und \mathbf{L}_2 werden wir gleich diskutieren. Der resultierende Drehimpuls \mathbf{L}_1 besitzt die Projektionsquantenzahl Null auf die ζ -Achse. Wir veranschaulichen uns diese Überlegungen an den Abb. 3 a und 3 b.

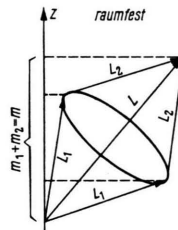


Abb. 3 a. Vektormodell für $\Psi_m^{l l_1 l_2 \pm}(u, \alpha \beta \gamma)$.

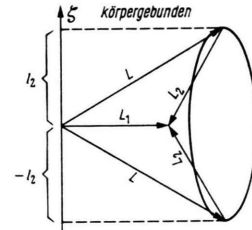


Abb. 3 b. Vektormodell für $\Psi_m^{l l_1 l_2 \pm}(u, \alpha \beta \gamma)$.

Diese Zeichnungen besitzen natürlich die üblichen Mängel solcher Vektormodelle.

Der scheinbare Widerspruch, daß es im raumfesten System $\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 = \mathbf{L}$ heißt und im körpergebundenen System $\mathbf{L} + \mathbf{L}_2 = \mathbf{L}_1$, löst sich auf, wenn wir bedenken, daß alle zu 3 a gehörenden Drehimpulsoperatoren die normalen Vertauschungsrelationen besitzen, während die Operatoren von 3 b zum Teil den normalen und zum Teil den anomalen Vertauschungsrelationen genügen, und zwar verhält sich, wie wir in IV sehen werden, \mathbf{L}_2 normal und \mathbf{L} und \mathbf{L}_1 anomal. Nun bewirkt aber der Übergang eines Drehimpulses \mathbf{L}_i in $-\mathbf{L}_i$ einen Wechsel der Vertauschungsrelationen; d. h. wir müssen \mathbf{L}_2 durch $-\mathbf{L}_2$ ersetzen, damit alle 3 Operatoren von 3 b die körpergebundenen anomalen Vertauschungsrelationen haben. Die ζ -Komponente von \mathbf{L}_1 ist Null, da die Masse μ_1 bei unserer Definition des körpergebundenen Koordinatensystems auf der ζ -Achse liegt. Die ζ -Komponente des Gesamtdrehimpulses wird also nur von \mathbf{L}_2 geliefert.

Damit können wir auch verstehen, warum die Summationsgrenze der umgerechneten Lösung l_2 ist, während bei dem allgemeinen Lösungsansatz die Summe bis l läuft. Für $l < l_2$ sieht das zunächst wie ein Widerspruch aus; da aber die Clebsch-Gordan-Koeffizienten $C(l l_2 l_1, n -n 0)$ für $n > \text{Min}(l_2, l)$ Null sind, wird auch hier nur bis l summiert. Für

$l > l_2$ sind bei unserer speziellen Lösung alle Funktionen $\Phi_{mn}^{l\pm}(qr u)$ mit $l_2 < n \leq l$ Null. Das liegt an dem besonderen Potential: Wir haben zwischen μ_1 und μ_2 keine Wechselwirkung, so daß l_2 eine feste Quantenzahl ist. Im allgemeinen Lösungsansatz dagegen sind solche Wechselwirkungen enthalten. Dadurch tritt ein Drehimpulsaustausch zwischen \mathbf{L}_1 und \mathbf{L}_2 auf, und l_2 kann alle Werte annehmen. Die Projektionsquantenzahl n wird deshalb im allgemeinen Fall von l begrenzt.

IV. Einsetzen der Lösung

Man bekommt einen Einblick in die physikalische Bedeutung der Differentialoperatoren, wenn man

ihre Wirkung auf die Funktionen $\chi_{mn}^{ll_2\pm}(u)$ untersucht. Die Koordinaten q und r lassen wir dazu wie in ⁴ mit einem Sperrpotential bei q_0 bzw. r_0 starr werden. Das Sperrpotential hat die Form $V_1(q) + V_2(r)$ und gehört somit zu den Potentialen, für die unsere spezielle Lösung gilt. Unser System besteht in dieser Vereinfachung aus den beiden reduzierten Massen μ_1 und μ_2 , die in den festen Abständen q_0 bzw. r_0 mit den Drehimpulsen \mathbf{L}_1 und \mathbf{L}_2 um den Koordinatenursprung umlaufen. In den Differentialgleichungen kommen dann die Ableitungen

$$\frac{\partial}{\partial q}, \frac{\partial^2}{\partial q^2}, \frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial^2}{\partial r^2}$$

nicht mehr vor.

Wir bestimmen zunächst, wie die u -abhängigen Operatoren auf die Funktionen $Y_{l_2 n}(u, 0)$ wirken:

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} - \frac{n^2}{\sin^2 u} \right) Y_{l_2 n}(u, 0) &= \hbar^2 l_2(l_2 + 1) Y_{l_2 n}(u, 0), \\ \hbar \left(\frac{\partial}{\partial u} - n \cot u \right) Y_{l_2 n}(u, 0) &= \hbar \sqrt{(l_2 - n)(l_2 + n + 1)} Y_{l_2 n+1}(u, 0), \\ \hbar \left(-\frac{\partial}{\partial u} - n \cot u \right) Y_{l_2 n}(u, 0) &= \hbar \sqrt{(l_2 + n)(l_2 - n + 1)} Y_{l_2 n-1}(u, 0). \end{aligned} \quad (22)$$

Die $Y_{l_2 n}(u, 0)$ sind, wie wir aus III wissen, die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses von μ_2 im $\xi\eta\zeta$ -System. Wir können also die 3 Operatoren auf Grund ihrer Wirkung formal als die körpergebundenen, allerdings von n abhängigen Operatoren L_2^2 , L_{2+} und L_{2-} deuten.

Bevor wir uns mit den Einzelheiten dieser Deutung näher beschäftigen, setzen wir noch die Funktionen $\chi_{mn}^{ll_2\pm}(u)$ in unsere gekoppelten Differentialgleichungen ein. Mit den obigen Beziehungen wird:

$$\begin{aligned} H_{in}^l \chi_{mn}^{ll_2\pm}(u) &= \left\{ \left(\frac{\hbar^2}{2\mu_1 q_0^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu_2 r_0^2} \right) l_2(l_2 + 1) + \frac{\hbar^2}{2\mu_1 q_0^2} [l(l+1) - 2n^2] \right\} \chi_{mn}^{ll_2\pm}(u), \\ b_n^l \chi_{mn-1}^{ll_2\pm}(u) &= - \frac{\hbar^2}{2\mu_1 q_0^2} [l, n] [l_2, n] \frac{C(l_1 l_2 l, 0 n-1 n-1)}{C(l_1 l_2 l, 0 n n)} \chi_{mn}^{ll_2\pm}(u), \\ b_{-n}^l \chi_{mn+1}^{ll_2\pm}(u) &= \frac{\hbar^2}{2\mu_1 q_0^2} [l, -n] [l_2, -n] \frac{C(l_1 l_2 l, 0 n+1 n+1)}{C(l_1 l_2 l, 0 n n)} \chi_{mn}^{ll_2\pm}(u) \end{aligned}$$

mit der Abkürzung: $[l, n] \stackrel{\text{Def.}}{=} \sqrt{(l+n)(l-n+1)}$.

Die n -te Zeile unseres Differentialgleichungssystems ergibt dann:

$$\begin{aligned} 0 &= b_n^l \chi_{mn-1}^{ll_2\pm}(u) + (H_{in}^l - E) \chi_{mn}^{ll_2\pm}(u) - b_{-n}^l \chi_{mn+1}^{ll_2\pm}(u) \\ &= \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu_2 r_0^2} l_2(l_2 + 1) + \frac{\hbar^2}{2\mu_1 q_0^2} [(l_2(l_2 + 1) + l(l+1) - 2n^2) C(l_1 l_2 l, 0 n n) \right. \\ &\quad - [l, n] [l_2, n] C(l_1 l_2 l, 0 n-1 n-1) - [l, -n] [l_2, -n] C(l_1 l_2 l, 0 n+1 n+1)] \\ &\quad \left. + \frac{1}{C(l_1 l_2 l, 0 n n)} - E \right\} \chi_{mn}^{ll_2\pm}(u) = 0. \end{aligned}$$

Der Energieeigenwert E hängt hier scheinbar noch von n ab. Da aber die Clebsch-Gordan-Koeffizienten die Rekursionsbeziehung⁹

$$\begin{aligned} &[-l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1) + l(l+1) - 2n^2] C(l_1 l_2 l, 0 n n) \\ &- [l, n] [l_2, n] C(l_1 l_2 l, 0 n-1 n-1) - [l, -n] [l_2, -n] C(l_1 l_2 l, 0 n+1 n+1) = 0 \end{aligned}$$

erfüllen, erhalten wir:

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu_1\varrho_0^2} l_1(l_1+1) + \frac{\hbar^2}{2\mu_2 r_0^2} l_2(l_2+1).$$

Dieser Ausdruck ist für jede Zeile der gleiche. Das richtige Verhalten der Lösung an den Rändern des Gleichungssystems wird durch die Symmetrien der Clebsch-Gordan-Koeffizienten geregelt. Unser Differentialgleichungssystem ist damit gelöst.

Das Ergebnis für den Energieeigenwert ist unmittelbar verständlich. Wir bemerken noch, daß E die Form $E_1(\varrho) + E_2(r)$ hat. Wenn wir nun die ϱ - und r -Abhängigkeit mitnehmen, erhalten wir genau wie im raumfesten Fall 2 unabhängige Differentialgleichungen für ϱ und r .

Die in (20) gefundene Lösung für die u -Abhängigkeit gilt, wie aus der Herleitung hervorgeht, nicht nur für potentielle Energien der Form $V_1(\varrho) + V_2(r)$, sondern für jede von u unabhängige potentielle Energie $V(\varrho, r)$. Die Differentialgleichungen für ϱ und r sind dann natürlich über $V(\varrho, r)$ gekoppelt. Ein Spezialfall ist das von ZICKENDRAHT^{5,6} verwendete Potential $V(y)$, da y mit unseren Koordinaten verknüpft ist durch

$$y^2 = 2 \frac{m_1 + m_2 + m_3}{m_1 m_2 + m_2 m_3 + m_3 m_1} (\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2).$$

Ein solches Potential $V(y)$ hat allerdings keine unmittelbare physikalische Bedeutung.

Wir wenden uns jetzt wieder der Deutung unserer Operatoren zu. Dazu betrachten wir einen Teil des Hamilton-Operators (3), an dem wir bereits alles Wesentliche diskutieren können.

$$-\frac{\hbar}{i} e^{-i\gamma} \left[\cot \beta \frac{\partial}{\partial \gamma} + i \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right] \cdot \left[-\cot u \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \gamma} - \hbar \frac{\partial}{\partial u} \right].$$

In Abschnitt B haben wir für $(\hbar/i) e^{-i\gamma}$ mal der ersten Klammer den körpergebundenen Schrauboperator L_+ eingeführt. Nachdem dann der Hamilton-Operator auf unseren Lösungsansatz gewirkt hatte, konnten wir die zweite Klammer formal als den von n abhängigen L_{2-} -Operator für die Funktionen $Y_{l,n}(u, 0)$ deuten. Jetzt sehen wir noch eine andere Möglichkeit: Wir verwenden die Beziehung

$$Y_{l,n}(u, 0) D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma) = Y_{l,n}(u, \gamma) D_{mn}^{l*}(\alpha \beta 0),$$

d. h. wir nehmen $e^{in\gamma}$ von $D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma)$ weg, schreiben es zu $Y_{l,n}(u, 0)$ und erhalten $Y_{l,n}(u, \gamma)$. Für

diese Funktion ist dann $e^{-i\gamma}$ mal der zweiten Klammer der normale, von n unabhängige Schrauboperator L_{2-} . Die erste Klammer dagegen bekommt für $D_{mn}^{l*}(\alpha \beta 0)$ erst dann die Bedeutung von L_+ , wenn der gesamte Operator auf $Y_{l,n}(u, \gamma)$ gewirkt hat. Da nur Produkte $Y_{l,n} D_{mn}^{l*}$ mit gleichem n auftreten ($Y_{l,-n}(u, 0) = (-1)^n Y_{l,n}(u, 0)$), stimmt das n in den Operatoren mit dem n der dazugehörigen Funktionen immer überein. An dieser Stelle erkennen wir die Doppelrolle von γ : Einerseits gehört γ zu den Eulerschen Winkeln, die die Lage des $\xi\eta\zeta$ -Systems definieren, und andererseits ist γ der Azimutwinkel von μ_2 . Die erste Möglichkeit haben wir ausgeführt, indem wir das körpergebundene Koordinatensystem durch die Lage von μ_1 und μ_2 festgelegt haben. Den zweiten Fall erhält man, wenn man das $\xi\eta\zeta$ -System allein durch die Lage von μ_1 bestimmt, und zwar so, daß die ξ -Achse in der Z - ζ -Ebene liegt. Die Eulerschen Winkel sind dann $\alpha, \beta, 0$; der Winkel γ ist in diesem System der Azimutwinkel von μ_2 . Beide Möglichkeiten sind aus dieser Sicht gleichberechtigt. Da wir aber wegen der potentiellen Energie zwischen äußeren und inneren Koordinaten unterscheiden, ist es für unser Problem sinnvoller, $\alpha \beta \gamma$ beisammen zu lassen und erst die Funktionen $\mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha \beta \gamma)$ abzusparieren.

Mit diesen Überlegungen ist die zunächst formale Einführung von L_2^2, L_{2+} und L_{2-} für die n -abhängigen Operatoren verstanden. Die auftretenden Schwierigkeiten liegen also an der Doppelrolle von γ ; wenn wir sie beachten, können wir für den betrachteten Operator im weiteren $-L_+ L_{2-}$ schreiben.

An der Gestalt und dem Schraubensinn von L_{2-} sehen wir, daß sich L_{2-} wie ein normaler Drehimpulsoperator verhält; dieses Ergebnis haben wir in III bereits vorweggenommen. In diesem Zusammenhang betrachten wir noch einmal die Wirkung von $-L_+ L_{2-}$ auf die Funktionen $Y_{l,n} D_{mn}^{l*}$. Da sich die Komponenten von L anomal und die von L_{2-} normal verhalten, schrauben L_+ und L_{2-} in dieselbe Richtung, und wir bekommen

$$-\hbar^2 [l, n] [l_2, n] Y_{l,n-1} D_{mn-1}^{l*},$$

also wieder ein Produkt von Eigenfunktionen, bei denen die Projektionsquantenzahlen auf die ζ -Achse gleich sind.

Die Reihenfolge der Operatoren L_+ und L_{2-} wird jetzt ebenfalls verständlich. Dazu stellen wir zunächst fest, daß $e^{-i\gamma}$ mit keiner der beiden Klammern ver-

tauschbar ist, wohl aber die Klammern unter sich. Das heißt, je nachdem wie wir γ deuten wollen, vertauschen wir die beiden Klammern, fassen die an erster Stelle stehende Klammer mit $e^{-i\gamma}$ zusammen

und erhalten entweder $-L_+ L_{2-}$ oder $-L_{2-} L_+$. Der erste Operator des Produkts ist dann immer der vollständige Schrauboperator. In diesem Sinne sind die Operatoren L_+ und L_{2-} sogar vertauschbar.

F. Zusammenfassung der Lösungstheorie

Wir gehen noch einen Schritt weiter und führen die Bahndrehimpulsoperatoren von μ_2 in die Schrödinger-Gleichung (4) ein, also noch bevor wir den Hamilton-Operator auf den Lösungsansatz anwenden. Dieser Schritt liefert uns eine einprägsame Gestalt des Hamilton-Operators, an der wir außerdem einige allgemeine Eigenschaften ablesen können. Wenn wir jedoch mit den Operatoren rechnen, müssen wir auf die in Abschnitt E IV diskutierte Reihenfolge achten und auf unsere bisherigen Ergebnisse zurückgreifen.

Für den Hamilton-Operator erhalten wir:

$$\frac{1}{2\mu_1} \left\{ -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \varrho^2} + \frac{2}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} \right) + \frac{1}{\varrho^2} (L_2^2 + L^2 - 2L_\zeta^2 - L_+ L_{2-} - L_- L_{2+}) \right\} \\ + \frac{1}{2\mu_2} \left\{ -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} L_2^2 \right\} + V(\varrho r u)$$

Nun läßt sich der Operator $2L_\zeta^2$ wegen $L_\zeta = L_{2\zeta}$ durch $2L_\zeta L_{2\zeta}$ ersetzen. Damit können wir dann für die Klammer $(L_2^2 + L^2 - L_+ L_{2-} - L_- L_{2+} - 2L_\zeta^2)$ formal $(\mathbf{L} - \mathbf{L}_2)^2$ schreiben. Wir führen noch die Abkürzung

$$[\varrho] \stackrel{\text{Def.}}{=} -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \varrho^2} + \frac{2}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} \right)$$

ein und stellen die körpergebundene und raumfeste Darstellung einander gegenüber:

Körpergebunden:

Koordinaten $\varrho r u, \alpha \beta \gamma$;

$$H = \frac{1}{2\mu_1} \left\{ [\varrho] + \frac{1}{\varrho^2} (\mathbf{L} - \mathbf{L}_2)^2 \right\} + \frac{1}{2\mu_2} \left\{ [r] + \frac{1}{r^2} L_2^2 \right\} + V(\varrho r u).$$

Lösung für $V(\varrho r u) = V_1(\varrho) + V_2(r)$

$$\Psi_m^{u, l_2 \pm}(\varrho r u, \alpha \beta \gamma) =$$

$$P_{il_1}(\varrho) R_{kl_2}(r) \sum_{n=-l_2}^{l_2} (-1)^{l-l_1} C(l l_2 l_1, n - n_0) \sqrt{\frac{2l+1}{8\pi^2}} D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma) \sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0). \quad (23)$$

Raumfest:

Koordinaten $\varrho \vartheta_1 \varphi_1, r \vartheta_2 \varphi_2$;

$$H = \frac{1}{2\mu_1} \left\{ [\varrho] + \frac{1}{\varrho^2} L_1^2 \right\} + \frac{1}{2\mu_2} \left\{ [r] + \frac{1}{r^2} L_2^2 \right\} + V(\varrho \vartheta_1 \varphi_1, r \vartheta_2 \varphi_2).$$

Lösung für $V(\varrho \vartheta_1 \varphi_1, r \vartheta_2 \varphi_2) = V_1(\varrho) + V_2(r)$

$$\Psi_m^{u, l_1 \pm}(\varrho \vartheta_1 \varphi_1, r \vartheta_2 \varphi_2) = P_{il_1}(\varrho) R_{kl_2}(r) \sum_{m_1+m_2=m} C(l_1 l_2 l, m_1 m_2 m) Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1) Y_{l_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2). \quad (16)$$

Man erhält also den körpergebundenen Fall formal aus dem raumfesten, indem man \mathbf{L}_1 durch $\mathbf{L} - \mathbf{L}_2$ ersetzt, und die Drehimpulse \mathbf{L} und \mathbf{L}_2 auf die Achsen des körpergebundenen Koordinatensystems zerlegt. Dieses Ergebnis ist vom Standpunkt der klassischen Mechanik völlig klar. In der Quantenmechanik jedoch ist bei der Zerlegung von Drehimpulsoperatoren auf mitbewegte Achsen Vorsicht geboten, wie in ⁷ diskutiert wurde.

An dieser Gestalt des Hamilton-Operators sehen wir auch den Unterschied zwischen ϱ - und r -Richtung-Quantisierung: Wenn wir die körpergebundene Quantisierungsachse in die ϱ -Richtung legen, tritt $\mathbf{L} - \mathbf{L}_2$ an die Stelle von \mathbf{L}_1 , wählen wir die r -Richtung, so steht $\mathbf{L} - \mathbf{L}_1$ an Stelle von \mathbf{L}_2 . Bei unserem speziellen Potential ist keine der beiden Möglichkeiten ausgezeichnet.

Wir betrachten nun ein allgemeines Potential $V(\varrho r u)$. Da dann zwischen μ_1 und μ_2 eine Wechselwirkung vorhanden ist, sind \mathbf{L}_1 und \mathbf{L}_2 nicht mehr scharf, und wir müssen über alle Drehimpulsquantenzahlen l_1 und l_2 summieren. Dasselbe gilt auch für die radialen Quantenzahlen i und k . Die allgemeine Lösung sieht daher bei ϱ -Richtung-Quantisierung wie folgt aus:

$$\Psi_m^l(\varrho r u, \alpha \beta \gamma) = \sum_{k l_2} a_{k l_2} R_{k l_2}(r) \sum_{i l_1} b_{k l_2 i l_1} P_{i l_1}(\varrho) \sum_{n=-l_2}^{l_2} C(l l_2 l_1, n - n 0) \sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0) \sqrt{\frac{2l+1}{8\pi^2}} D_{mn}^*(\alpha \beta \gamma).$$

Weil der von u abhängige Teil der Lösung von der Summation über l_1 nicht betroffen wird, fassen wir Ψ_m^l dementsprechend zusammen. Außerdem können wir für die Summationsgrenzen von n auch l an Stelle von l_2 schreiben, wie wir uns in Abschnitt E III überlegt haben.

$$\Psi_m^l(\varrho r u, \alpha \beta \gamma) = \sum_{k l_2} a_{k l_2} R_{k l_2}(r) \sum_{n=-l}^l \left\{ \sum_{i l_1} b_{k l_2 i l_1} P_{i l_1}(\varrho) C(l l_2 l_1, n - n 0) \right\} \sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0) \sqrt{\frac{2l+1}{8\pi^2}} D_{mn}^*(\alpha \beta \gamma).$$

Die in der Klammer stehende Doppelsumme über i und l_1 können wir nun auch durch eine einfache Summe über i' ersetzen, indem wir die ϱ -Abhängigkeit nach einem neuen vollständigen Funktionensystem $P'_{i' k l_2 n}(\varrho)$ entwickeln. Zusätzlich ordnen wir die Summen über l_2 und n um und erhalten:

$$\Psi_m^l(\varrho r u, \alpha \beta \gamma) = \sum_{n=-l}^l \left\{ \sum_{i' k; l_2 \geq |n|} a'_{i' k l_2 n} R_{k l_2}(r) P'_{i' k l_2 n}(\varrho) \sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0) \right\} \sqrt{\frac{2l+1}{8\pi^2}} D_{mn}^*(\alpha \beta \gamma). \quad (24)$$

Wir haben also die Entwicklung nach Eigenzuständen von i, k, l_1, l_2 durch die Entwicklung nach i', k, l_2, n ersetzt, und es werden hier für jedes l_2 die dazugehörigen l_1 -Werte exakt mitgenommen.

Im Falle der r -Richtung-Quantisierung können wir analog vorgehen und erhalten dann eine Entwicklung nach Eigenzuständen von i, k', l_1, n' , wobei n' die Projektion von \mathbf{L}_1 bzw. \mathbf{L} auf die r -Richtung ist.

Mit diesen Überlegungen können wir jetzt in vielen Fällen entscheiden, welche Richtung für die ζ -Achse günstiger ist. Wir betrachten dazu die Energieeigenwerte der Funktionen, nach denen wir entwickeln, in Abhängigkeit von l_2 und n bzw. l_1 und n' . Wenn beispielsweise die Energiestufen von l_1 dichter liegen als die von l_2 , ist es vorteilhafter, nach l_2 zu entwickeln, also die ϱ -Richtung zu wählen, denn dann ist l_2 in besserer Näherung als l_1 noch eine Quantenzahl, und man kommt bei l_2 mit weniger Entwicklungskoeffizienten aus. Dieses Ergebnis werden wir in Abschnitt G verwenden.

Im allgemeinen nehmen wir die Summation über n exakt mit, da sie endlich ist. Nun gibt es aber auch wichtige Fälle in der Molekülphysik und bei den Kernmodellen, bei denen n in guter Näherung eine Quantenzahl ist, da die Zustände mit verschiedenem

n energetisch weit auseinander liegen. Da man dann mit einem oder nur wenigen n auskommt, ist es hier besonders vorteilhaft, die ϱ -Richtung als ζ -Achse zu verwenden.

Die Entscheidung zwischen ϱ - und r -Richtung läßt sich auch anschaulich verstehen. Etwas vereinfachend kann man sagen, daß in vielen Fällen dichtliegende Energiestufen klassisch großen Trägheitsmomenten und damit langsamer Rotation entsprechen. Unsere Betrachtungen besagen dann in diesem Bild, daß diejenige Richtung für die ζ -Achse günstiger ist, die langsamer rotiert.

Die bisherigen Ergebnisse gelten für 3 beliebige Massen. Für die Praxis ist jedoch der Fall, daß Teilchen 1 und 2 gleich sind, besonders wichtig. In Abschnitt C III haben wir die Vertauschung dieser beiden Teilchen allgemein behandelt. Wir wenden jetzt die Resultate auf unseren Lösungsansatz an. Es ist

$$E_{12} Y_{l_2 n}(u, 0) = Y_{l_2 n}(\pi - u, 0) = (-1)^{l_2+n} Y_{l_2 n}(u, 0). \quad (25)$$

Da für den symmetrischen Zustand

$$E_{12} \Phi_{mn}^{ls \pm} = \pm (-1)^n \Phi_{mn}^{ls \pm}$$

und für den antisymmetrischen

$$E_{12} \Phi_{mn}^{la \pm} = \mp (-1)^n \Phi_{mn}^{la \pm}$$

sein muß, folgt daraus, daß in einer Lösung mit gegebener Symmetrie bezüglich Teilchenvertauschung nur gerade oder nur ungerade Bahndrehimpulsquantenzahlen l_2 vorkommen dürfen, und zwar enthält bei positiver Parität die symmetrische Lösung nur gerade l_2 , die antisymmetrische Lösung nur ungerade l_2 ; bei negativer Parität ist es genau umgekehrt. Die Teilchensymmetrie reduziert also die Entwicklungsfunktionen für einen Zustand mit bestimmter Symmetrie auf die Hälfte. Im nächsten Abschnitt werden wir das an einem Beispiel ausführlich diskutieren.

G. Lösungspraxis

In diesem Abschnitt verwenden wir unsere Ergebnisse, um die gekoppelten Differentialgleichungssysteme für konkrete Potentiale numerisch zu lösen. Dazu entwickeln wir die gesuchten Wellenfunktionen nach geeignet gewählten Funktionen aus Abschnitt F und bestimmen die Entwicklungskoeffizienten sowie den Energieeigenwert, indem wir die auftretenden Matrizen diagonalisieren. Die erforderlichen Rechnungen wurden auf einer Siemens DVA 2002 durchgeführt.

Damit man an einem übersichtlichen Beispiel sieht, wie dieses Verfahren im Falle unserer gekoppelten

Differentialgleichungen aussieht, beginnen wir hier genauso wie in der Lösungstheorie mit einem System, bei dem q und r starr sind.

I. q und r starr; $V = V(u)$.

Beispiel $V(u) = \delta(\cos^2 u - 1/3)$

Wir betrachten im folgenden nur Systeme, bei denen die beiden Teilchen 1 und 2 gleich sind. Die potentielle Energie muß dann die Eigenschaft $V(u) = V(\pi - u)$ haben. Für u -unabhängiges Potential konnten wir das Problem exakt lösen. Es waren dabei \mathbf{L}_1 , \mathbf{L}_2 und \mathbf{L} scharf. Jetzt ist nur noch der Gesamtdrehimpuls \mathbf{L} scharf. Da keine Funktionen von q und r vorhanden sind, erhalten wir die vollständige Entwicklung unserer Lösung, wenn wir mit unbestimmten Koeffizienten über einen der beiden Drehimpulse summieren. Die Wahl der Quantisierungsachse richtet sich hier nach dem Verhältnis der beiden Trägheitsmomente $\mu_1 q_0^2$ und $\mu_2 r_0^2$. Wir wählen $\mu_1 q_0^2 > \mu_2 r_0^2$ und entwickeln daher nach l_2 . Die Eigenzustände werden nach Gesamtdrehimpuls, Parität und Symmetrie bezüglich Teilchenvertauschung klassifiziert.

Da die Differentialgleichungen nur über die Koordinate u verkoppelt sind, zeigt unser einfaches Beispiel bereits alles Wesentliche; wir schreiben deshalb die auftretenden Funktionen ausführlich hin:

l gerade ($l_2 \geq n$):

$$\begin{aligned} \Psi_m^{l+} &= \sum_{n=0}^l \Phi_{mn}^{l+} \mathcal{L}_{mn}^{l+} \begin{cases} \Psi_m^{ls+} = \sum_{n=0}^l \left(\sum_{l_2=0,2,4,\dots} c_{l_2 n}^{ls+} Y_{l_2 n}(u, 0) \right) \mathcal{L}_{mn}^{l+}, \\ \Psi_m^{la+} = \sum_{n=0}^l \left(\sum_{l_2=1,3,5,\dots} c_{l_2 n}^{la+} Y_{l_2 n}(u, 0) \right) \mathcal{L}_{mn}^{l+}, \end{cases} \\ \Psi_m^{l-} &= \sum_{n=1}^l \Phi_{mn}^{l-} \mathcal{L}_{mn}^{l-} \begin{cases} \Psi_m^{ls-} = \sum_{n=1}^l \left(\sum_{l_2=1,3,5,\dots} c_{l_2 n}^{ls-} Y_{l_2 n}(u, 0) \right) \mathcal{L}_{mn}^{l-}, \\ \Psi_m^{la-} = \sum_{n=1}^l \left(\sum_{l_2=2,4,6,\dots} c_{l_2 n}^{la-} Y_{l_2 n}(u, 0) \right) \mathcal{L}_{mn}^{l-}. \end{cases} \end{aligned} \quad (26)$$

Für l ungerade erhält man die gleichen Fälle, und zwar entspricht

$$\begin{aligned} (l \text{ ungerade}, s, +) &\triangleq (l \text{ gerade}, a, -), \\ (l \text{ ungerade}, a, +) &\triangleq (l \text{ gerade}, s, -), \\ (l \text{ ungerade}, s, -) &\triangleq (l \text{ gerade}, a, +), \\ (l \text{ ungerade}, a, -) &\triangleq (l \text{ gerade}, s, +). \end{aligned}$$

Die zu diagonalisierenden Matrizen entstehen, indem wir die Funktionen

$$\Phi_{mn}^{l\pm} = \sum_{l_2} c_{l_2 n}^{l\pm} Y_{l_2 n}(u, 0)$$

in die gekoppelten Differentialgleichungen (13) bzw. (14) einsetzen, von links mit $Y_{l_2' n}(u, 0)$ multiplizieren und dann mit dem Faktor $\sin u \, du$ integrieren, und zwar muß, wegen der Orthogonalität der Funktionen $\mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha \beta \gamma)$ bezüglich n die n -te Zeile nur mit $Y_{l_2' n}(u, 0)$, $l_2' \geq n$, multipliziert werden. Die Wirkung der Operatoren H_{in}^l , b_n^l , b_{-n}^l auf $Y_{l_2 n}(u, 0)$ kennen wir von Abschnitt E IV. Wir führen noch die folgenden Abkürzungen ein:

$$E_{l_2}^0(l, n) \stackrel{\text{Def.}}{=} \frac{\hbar^2}{2\mu_1 \varrho_0^2} [l_2(l_2+1) + l(l+1) - 2n^2] \\ + \frac{\hbar^2}{2\mu_2 r_0^2} l_2(l_2+1),$$

$$V_{l_2' l_2}^n \stackrel{\text{Def.}}{=} 2\pi \int_0^\pi Y_{l_2' n}(u, 0) V(u) Y_{l_2 n}(u, 0) \sin u \, du,$$

$$A \stackrel{\text{Def.}}{=} \frac{\hbar^2}{2\mu_1 \varrho_0^2}, \quad [l, n] = \sqrt{(l+n)(l-n+1)}$$

und geben in Abb. 4 als Beispiel die Matrix für $l=2, s, +$ an (Abb. 4 siehe vorhergehende S. 593).

Die Matrizen besitzen für alle Kombinationen von $l(l_2) (\pm)$ dieselbe Struktur: Um die Hauptdiagonale stehen für jedes n quadratische Untermatrizen, deren Elemente vom Potential, aber nicht von l abhängen. Die Untermatrix n ist über „Nebendiagonalen“ mit den Untermatrizen $n-1$ und $n+1$ verknüpft. Die Quantenzahl l kommt nur noch in den Nebendiagonalen und in der Hauptdiagonale vor, und zwar in ganz einfacher Weise. Darin liegt der große Vorteil dieser Entwicklung gegenüber der Entwicklung nach Eigenfunktionen von l_1 und l_2 , die für unser System die Form

$$\sum_{l_1 l_2} a_{l_1 l_2} \left\{ \sum_n C(l l_2 l_1, n - n_0) Y_{l_2 - n}(u, 0) D_{mn}^*(\alpha \beta \gamma) \right\}$$

hat und die als Matrixelemente

$$V_{l_1' l_2' l_1 l_2} = \sum_n C(l l_2' l_1', n - n_0) C(l l_2 l_1, n - n_0) V_{l_2' l_2}^n$$

liefert, also Matrixelemente, die nicht nur komplizierter, sondern auch für jedes l verschieden sind. Für Diagonalisierungsverfahren ist daher immer unsere Methode besser; die zweite Möglichkeit ist dagegen für eine erste Näherung geeignet, weil man hier für das ungestörte Problem eine Diagonalmatrix erhält.

An unseren Matrizen erkennen wir wieder unmittelbar die Bedeutung der ϱ - bzw. r -Richtung-Quantisierung. Im einen Fall enthalten die Nebendiagonalen den Faktor $\hbar^2/(2\mu_1 \varrho_0^2)$, im anderen $\hbar^2/(2\mu_2 r_0^2)$. Es hängt somit direkt von der Größe der Trägheitsmomente ab, wie stark die Zustände mit verschiedenem n bzw. n' untereinander über die Nebendiagonalen verknüpft sind.

Als spezielles Beispiel wählen wir

$$V(u) = \delta(\cos^2 u - \frac{1}{3}) = \delta \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\pi}{5}} Y_{20}(u, 0)$$

und

$$\frac{\mu_1 \varrho_0^2}{\mu_2 r_0^2} = 5.$$

Die Niveaus sind in Abb. 5 als Funktion von δ aufgetragen. Für $\delta = 0$ ist

$$E = \frac{\hbar^2 l_1(l_1+1)}{2\mu_1 \varrho_0^2} + \frac{\hbar^2 l_2(l_2+1)}{2\mu_2 r_0^2}$$

und wir haben Entartung, da zu gegebenem l_1 und l_2 alle Gesamtdrehimpulse mit $|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2$ gehören. Diese Entartung wird für $\delta \neq 0$ aufgehoben.

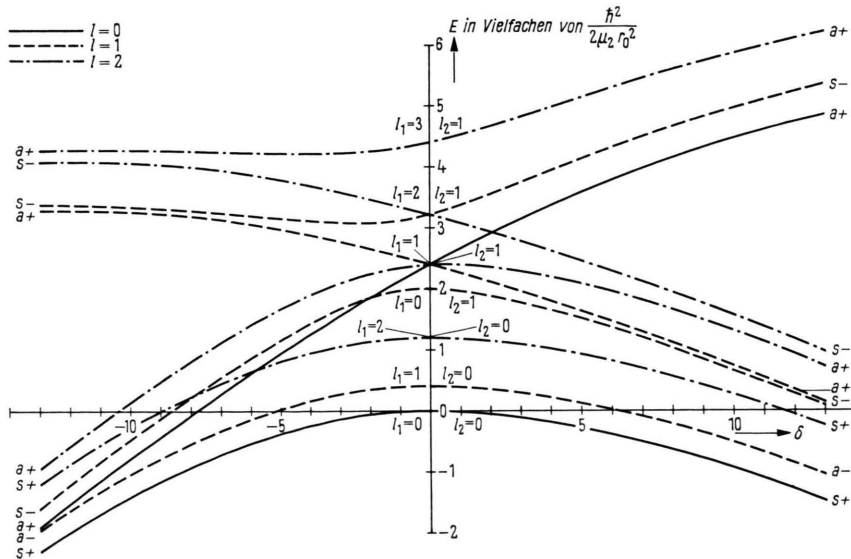


Abb. 5. Energieniveaus für das Potential $V(u) = \delta(\cos^2 u - 1/3)$ als Funktion von δ .

ben. Für große δ oder kleine $\hbar^2/(2\mu_1\varrho_0^2)$, das heißt, wenn die Matrixelemente $V_{l',l}^n$ größer werden als die in den Nebendiagonalen, erhalten wir näherungsweise die Niveaus, die durch Diagonalisierung der n -Untermatrizen für sich allein entstehen würden. Diese Niveaus unterscheiden sich für gleiches n aber verschiedenes l wegen der Form von $E_{l,n}^0(l,n)$ nur durch $[\hbar^2/(2\mu_1\varrho_0^2)]l(l+1)$ und sind damit normale Rotationsbanden.

Unser Beispiel zeigt also den Übergang von der völlig entkoppelten Bewegung, die durch l_1 und l_2 beschrieben wird, bis zur stark gekoppelten, die durch l , n und den Zustand von $\mu_2 r_0^2$ charakterisiert ist und bei welcher μ_2 der „langsamen Rotation“ von μ_1 wegen des u -abhängigen Potentials adiabatisch folgt.

II. ϱ starr, $V = V(r, u)$

Dieser Fall entspricht den Modellen für u-g-Kerne: Der aus den Massen m_1 und m_2 gebildete Rumpf besitzt um die Verbindungslinie ϱ kein Trägheitsmoment, und damit ist auch der Drehimpuls des Rumpfes um diese Achse immer Null, wie es experimentell beobachtet wird. Da in der Nebendiagonale bei ϱ -Richtung-Quantisierung kein r vorkommt, ändert sich die Struktur der Matrizen nicht. Lediglich die Elemente der Untermatrizen werden jetzt ebenfalls Matrizen, deren Länge durch die Anzahl der Entwicklungsfunktionen für die r -Abhängigkeit gegeben ist, und die Nebendiagonalen werden entspre-

chend länger. Im übrigen treffen alle unter I angestellten Überlegungen auch hier zu. Ein qualitativer Vergleich mit den vorhandenen Modellen ist nur möglich, wenn man den Spin von Teilchen 3 mitnimmt. Dies geschieht unter Verwendung der hier gewonnenen Erfahrungen bei NÄPFEL¹⁰. Wir beschränken uns deshalb im folgenden auf atomare Systeme mit Coulomb-Wechselwirkung, bei denen der Spin keine wesentliche Rolle spielt.

III. $V = V(\varrho, r, u)$

Unsere vorhergehenden Überlegungen sind methodisch zugeschnitten auf solche 3-Teilchen-Systeme, die genau 2 gleiche Teilchen enthalten. Im atomaren Bereich gehören hierzu das Heliumatom und heliumähnliche Ionen sowie das H_2^+ -Ion und ähnliche Gebilde. Die Ortsanteile der Wellenfunktionen solcher Systeme verhalten sich bei Teilchenvertauschung symmetrisch oder antisymmetrisch. Im Prinzip ist es möglich, alle Eigenzustände zu berechnen, indem wir die u -Abhängigkeit wie oben nach $Y_{l,n}(u, 0)$ und die ϱ - und r -Abhängigkeit nach geeigneten Polynomen entwickeln und damit die nach Gesamtdrehimpuls und Parität getrennten Differentialgleichungssysteme lösen. Die für die Matrixelemente benötigten Integrale lassen sich geschlossen auswerten, wenn man die in der potentiellen Energie vorkommenden Abstände zwischen Teilchen 1 und 3 sowie Teilchen 2 und 3 folgendermaßen entwickelt (Teilchen 1 und 2 sollen wieder gleich sein):

$$\frac{1}{\sqrt{\frac{1}{4}\varrho^2 + r^2 + \varrho r \cos u}} + \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{4}\varrho^2 + r^2 - \varrho r \cos u}} = \begin{cases} \frac{4}{\varrho} \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{2r}{\varrho}\right)^{2\nu} P_{2\nu}(\cos u) & \text{für } r \leq \varrho/2, \\ \frac{2}{r} \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{\varrho}{2r}\right)^{2\nu} P_{2\nu}(\cos u) & \text{für } \varrho/2 \leq r. \end{cases}$$

Während jedoch die Entwicklung der Eigenfunktionen nach $Y_{l,n}(u, 0)$ bei unserem Beispiel in I und bei den in II erwähnten Kernmodellen gut konvergiert, ist dies bei der Coulomb-Wechselwirkung nicht mehr der Fall. Das hat folgenden physikalischen Grund: Bei den zuerst genannten Problemen ist die potentielle Energie eine relativ glatte Funktion von u . Bei der Coulomb-Wechselwirkung dagegen enthält sie für $r = \varrho/2$ an den Stellen $u = 0$ und $u = \pi$ Singularitäten. Wenn zwischen Teilchen 1 und 3 sowie Teilchen 2 und 3 Anziehung herrscht, ist die Wellenfunktion in diesem Bereich besonders groß

und besitzt dort eine Spitze. Um diese Spitze in der u -Abhängigkeit mit $Y_{l,n}(u, 0)$ gut anzunähern, müssen wir viele Funktionen mitnehmen. Da wir das Verhalten der exakten Lösung an den singulären Punkten kennen, gibt uns diese Überlegung gleichzeitig einen Hinweis, wie wir eine bessere Konvergenz erzielen können. Wir ziehen dazu eine geeignet gewählte Funktion als Faktor heraus und entwickeln den „glatteren“ Rest. Dabei geht zwar die Orthogonalität unserer Entwicklungsfunktionen verloren, aber das ist für das Diagonalisierungsverfahren belanglos.

¹⁰ H. NÄPFEL, Z. Naturforsch. **23 a**, 562 [1968]; voranstehende Arbeit.

Mit dieser Methode behandeln wir das Heliumatom. Die Ordnungszahl Z lassen wir dabei zunächst allgemein stehen. Es ist dann

$$m_1 = m_2 = m_e, \quad m_3 = m_{\text{He}}, \quad \mu_1 = m_e/2, \quad \mu_2 = \frac{2 m_e}{1 + 2 m_e/m_{\text{He}}}.$$

Weiter führen wir dimensionslose Größen ein:

$$Q' = \frac{1}{2} \frac{Z e^2 2 m_e}{4 \pi \varepsilon_0 \hbar^2} Q, \quad r' = \frac{Z e^2 2 m_e}{4 \pi \varepsilon_0 \hbar^2} r, \quad \lambda = \frac{(4 \pi \varepsilon_0)^2 \hbar^2}{Z^2 e^4 m_e} E.$$

Für $l=0$ erhalten wir die folgende Eigenwertgleichung:

$$\left\{ \left[\frac{\partial^2}{\partial Q'^2} + \frac{2}{Q'} \frac{\partial}{\partial Q'} + \frac{1}{Q'^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} \right) \right] + \left(1 + \frac{2 m_e}{m_{\text{He}}} \right) \left[\frac{\partial^2}{\partial r'^2} + \frac{2}{r'} \frac{\partial}{\partial r'} + \frac{1}{r'^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} \right) \right] \right. \\ \left. + 2 \left[\frac{1}{\sqrt{Q'^2 + r'^2 - 2 Q' r' \cos u}} + \frac{1}{\sqrt{Q'^2 + r'^2 + 2 Q' r' \cos u}} - \frac{1}{2 Z Q'} \right] + \lambda \right\} \Psi = 0. \quad (27)$$

Den He-Kern nehmen wir als unendlich schwer an, bemerken aber, daß dabei der Charakter als 3-Körper-Problem keineswegs verloren geht und daß auch eine endliche Masse m_3 in unseren Koordinaten relativ einfach mitzunehmen wäre. Für die Wellenfunktion machen wir auf Grund unserer obigen Überlegungen den Ansatz:

$\Psi = \Psi_0(Q' r' u) f(Q' r' u)$ mit

$$\Psi_0 = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sqrt{Q'^2 + r'^2 - 2 Q' r' \cos u} - \frac{1}{2} \sqrt{Q'^2 + r'^2 + 2 Q' r' \cos u} + \frac{1}{2 Z} Q' \right\} \quad (28)$$

der, in die Eigenwertgleichung eingesetzt, liefert:

$$\Psi_0 \left[\frac{\partial^2}{\partial Q'^2} + \frac{2}{Q'} \frac{\partial}{\partial Q'} + \frac{1}{Q'^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} \right) + \frac{\partial^2}{\partial r'^2} + \frac{2}{r'} \frac{\partial}{\partial r'} + \frac{1}{r'^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} \right) + \left(1 - \frac{1}{(2 Z)^2} + \lambda \right) \right] f \\ + 2 \left[\frac{\partial \Psi_0}{\partial Q'} \left(\frac{1}{2 Z} + \frac{\partial}{\partial Q'} \right) + \frac{\partial \Psi_0}{\partial r'} \frac{\partial}{\partial r'} + \left(\frac{1}{Q'^2} + \frac{1}{r'^2} \right) \frac{\partial \Psi_0}{\partial u} \frac{\partial}{\partial u} \right] f = 0. \quad (29)$$

Da $\Psi_0(Q' r' u) = \Psi_0(Q' r' \pi - u)$ ist, also symmetrisch bezüglich Teilchenvertauschung, hat Ψ die gleiche Symmetrie wie f . Für den symmetrischen Grundzustand sieht daher die Entwicklung von f folgendermaßen aus:

$$f(Q' r' u) = \{ g_0(Q' r') Y_{00}(u, 0) + g_2(Q' r') Y_{20}(u, 0) + \dots \}. \quad (30)$$

Wir haben drei Näherungen gerechnet, an denen man die gute Konvergenz des Verfahrens erkennt.

$$f=1: \quad E = -2,85550 \text{ atom. Einh.}$$

$$f=1 + c_1 Q': \quad E = -2,87919 \text{ atom. Einh.}$$

$$f=1 + c_1 Q' + c_2 r'^2: E = -2,90001 \text{ atom. Einh.}$$

Ein Vergleich mit dem genaueren Wert

$$E = -2,90372 \text{ a. E.}$$

zeigt, daß unser Ergebnis, das nur 2 Parameter enthält, auf ca. 1‰ genau ist. Wir haben damit auch für Systeme mit Coulomb-Wechselwirkung eine Methode gefunden, die mit übersichtlichen Entwicklungsfunktionen rasch konvergiert.

Wir stellen noch für $Z \geq 2$ unseren Ansatz nullter Näherung für den Grundzustand ($f=1$) dem für Systeme dieser Art üblichen einparametrischen Varia-

tionsansatz

$$\exp \left\{ -k \left(\sqrt{Q'^2 + r'^2 - 2 Q' r' \cos u} + \sqrt{Q'^2 + r'^2 + 2 Q' r' \cos u} \right) \right\}$$

in Tab. 1 gegenüber.

Z	Variation	$f=1$	Experiment
2	- 2,848	- 2,856	- 2,904
3	- 7,223	- 7,235	- 7,280
4	-13,598	-13,612	-13,656
5	-21,973	-21,988	-22,032

Tab. 1. Berechnete und gemessene Grundzustandsenergien in atomaren Einheiten für verschiedene Ordnungszahlen Z .

Unser vor die Lösungsentwicklung gezogener Faktor $\Psi_0(Q' r' u)$ eignet sich also für jedes $Z \geq 2$ und ergibt stets einen besseren Wert als der einparametrische Variationsansatz, wobei die Güte mit wachsendem Z noch zunimmt.

Herr Professor Dr. H. VOLZ widmete dieser Arbeit viel Zeit und Interesse und gab mir in zahlreichen Diskussionen viele wertvolle Anregungen. Ich möchte mich dafür herzlich bedanken. — Der freundschaftliche Gedankenaustausch mit Herrn H. NÄPFEL hat zur Klärung mancher Probleme beigetragen. — Der Firma Siemens A.G. danke ich für die großzügig zur Verfügung gestellte Rechenzeit.