

Abb. 4. Reduktionsmöglichkeiten (α) und (β) für das 4-Teilchen-System im Fall $m_1 = m_2 \gg m_3 \approx m_4$.

ist in beiden Fällen der gleiche, obwohl die μ_i und ρ_i nach (α) bzw. (β) verschieden definiert sind. Bei starker Rumpf-Teilchen-Wechselwirkung und schwacher Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung wählen wir die Reduktion (α), im umgekehrten Fall die Reduktion (β).

Bei der Behandlung des Diff.-Gl.-Systems (32) gehen wir genauso vor wie in der bereits zitierten Arbeit von RUDER¹. Außerdem sind bei realistischer Beschreibung von uu-Kernen noch die Spins der beiden ungepaarten Nukleonen zu berücksichtigen; wie dies geschehen kann, ist in einer Arbeit von NÄPFEL⁵ untersucht worden.

Herr Professor Dr. H. VOLZ hat diese Arbeit von Anfang an mit Interesse verfolgt. Wir möchten ihm an dieser Stelle für die vielen nützlichen Diskussionen und wertvollen Anregungen herzlich danken.

⁵ H. NÄPFEL, Z. Naturforsch. **23 a**, 562 [1968].

Zur rotatorischen Bewegung eines Systems von n Massenpunkten. II.

H. RUDER und H. VOLZ

Institut für Theoretische Physik der Universität Erlangen-Nürnberg

(Z. Naturforsch. **24 a**, 1171—1188 [1969]; eingegangen am 10. April 1969)

In part I, the problem of the separation of a collective rotational motion from the internal motion in a system of point masses was discussed. It was shown that in the Hamiltonian $H = H_1 + H_k + H_2$, where H_1 describes the internal, H_2 the collective motion, the coupling term H_k in general cannot be eliminated by any choice of the internal frame of reference. This result applies to classical as well as to quantum mechanics. In this paper, the problem is further discussed on the basis of wave mechanics, especially for the case of the three-body-problem. Starting from the dependence of H_k on the connection of the internal frame with the configuration, we choose this frame in such a way that $H_k \Phi_0 = 0$, where Φ_0 is the separated internal part of the wave function. Our procedure, which we call the method of specific decoupling, ensures that for the considered wave function and the corresponding frame of reference, the internal and collective motions are fully decoupled in that degree of perturbation which corresponds to the concept of rotational energies proportional to L^2 . It turns out that the condition $H_k \Phi_0 = 0$ is equivalent to a minimum principle for $\langle H_2 \rangle$. Thus the frame of reference in question can be found by solution of a differential equation as well as by variational methods. The Eulerian angles of that frame of reference respective to a fixed system of coordinates are the variables which enter the functions $D_{mn}^l(\alpha, \beta, \gamma)$ describing the rotational motion of our system of point masses. In the course of our procedure, we immediately get effective moments of inertia. These are markedly smaller than the normal expectation values. Some simple models are quantitatively discussed. It is shown that the normally defined principal axes of inertia are no suitable starting point for the problem, because their connection with the configuration becomes undefined, when two principal moments are equal.

1. Innere Bewegung, kollektive Bewegung und Kopplungsglieder

Die Behandlung eines Systems von n Massenpunkten, in welchem nur innere Kräfte wirken, läßt sich wegen der Gültigkeit des Schwerpunktssatzes stets zurückführen auf diejenige eines Systems von $n - 1$ „reduzierten“ Massenpunkten, die sich in ge-

wissen, bei der Reduzierung anfallenden Abständen um ein festes Zentrum bewegen (reduziertes System). Die $3n - 3$ Variablen, die dieses reduzierte System beschreiben, lassen sich einteilen in eine Gruppe von $3n - 6$ Variablen, welche die innere Struktur ohne Rücksicht auf die Orientierung des Systems im Raum festlegen, und die wir im folgenden wie in Teil I¹ als „innere“ Variable zusammenfassend mit dem

Sonderdruckanforderungen erbeten an Prof. Dr. H. VOLZ, Institut für Theoretische Physik der Universität Erlangen-Nürnberg, D-8520 Erlangen, Glückstr. 6.

¹ H. RUDER u. H. VOLZ, Z. Naturforsch. **23 a**, 1419 [1968].



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

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

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

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

Symbol q_1 bezeichnen. Dazu treten als „äußere“ Variable 3 Eulersche Winkel α, β, γ , welche die Orientierung eines geeignet in die Struktur hineindefinierten „körpergebundenen“ Bezugssystems bezüglich eines raumfesten kartesischen Koordinatensystems angeben, und die wir zusammenfassend mit q_2 bezeichnen. In der Hamiltonschen Behandlung sind neben diesen Koordinaten die zugehörigen Impulse p_1 und p_2 bzw. die entsprechenden Differentialoperatoren einzuführen. Wir werden die Hamilton-Funktion bzw. den Hamilton-Operator unseres Systems, wo es auf eine Unterscheidung nicht ankommt, wiederum kurz als Hamilton-Form (hamiltonian) bezeichnen.

In Teil I wurde gezeigt, daß sich die Hamilton-Form bei Einführung von Variablen der oben genannten Art in der Gestalt

$$H = H_1(q_1, p_1) + H_k(q_1, q_2, p_1, p_2) + H_2(q_1, q_2, p_2) \quad (1)$$

schreiben läßt. Das erste Glied H_1 bestimmt die innere Struktur unseres Systems. Das Kopplungsglied war in Teil I zunächst als derjenige Teil H_k der Hamilton-Form definiert worden, welcher – in der Sprache der klassischen Mechanik – die gemischten Produkte $p_1 p_2$ enthält. Wir werden im folgenden im Zusammenhang mit der wellenmechanischen Behandlung Veranlassung haben, in das Kopplungsglied noch weitere Glieder aufzunehmen, die zwar in den p_2 linear sind, die jedoch kein p_1 mehr enthalten. Wir können also schreiben

$$H_k = \tilde{H}_k(q_1, q_2, p_1, p_2) + H_a(q_1, q_2, p_2). \quad (2)$$

H_2 ist eine quadratische Form in den Drehimpulsen p_2 bzw. deren wellenmechanischer Übersetzung. Wenn wir darin die Komponenten L_ξ, L_η, L_ζ des Gesamtdrehimpulses bezüglich des körpergebundenen Achsenkreuzes ξ, η, ζ einführen, so entsteht eine quadratische Form in den Drehimpulskomponenten, deren Koeffizienten nur noch von den q_1 abhängen. Wir sorgen zunächst dafür, daß die Koeffizientenmatrix dieser quadratischen Form symmetrisch wird. Dies kann dadurch geschehen, daß wir die in H_2 auftretenden gemischten Produkte, etwa $L_\xi L_\zeta$, gemäß

$$L_\xi L_\zeta = \frac{1}{2} (L_\xi L_\zeta + L_\zeta L_\xi) - \frac{1}{2} (L_\zeta L_\xi - L_\xi L_\zeta) \quad (3)$$

in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Bestandteil zerlegen, und den letzteren dann mit

Hilfe der Vertauschungsrelation

$$L_\zeta L_\xi - L_\xi L_\zeta = (\hbar/i) L_\eta \quad (4)$$

in ein in L_η lineares Glied überführen. Das anomale Vorzeichen in (4) rührt daher, daß es sich um Drehimpulskomponenten handelt, die auf körpergebundene Achsen bezogen sind². Die dabei entstehenden, in L_ξ, L_η und L_ζ linearen Bestandteile bilden den Anteil H_a des Kopplungsgliedes, wobei der Index a an seine Entstehung aus den antisymmetrischen Teilen des kollektiven Operators erinnert.

Dem Koeffizientenschema von H_2 können wir dann formal einen Trägheitstensor $\hat{\Theta}(q_1)$ entnehmen, mit dessen Hilfe sich H_2 abkürzend in der Form

$$H_2 = \frac{1}{2} \mathbf{L} \hat{\Theta}^{-1} \mathbf{L} \quad (5)$$

schreiben läßt. Wenn man die übrigen Bestandteile von H zunächst außer acht läßt, so kann man diesen Ausdruck als die Energie der kollektiven, also der rotatorischen Bewegung des Systems deuten. Da jedoch an eine Separation des Problems im allgemeinen Falle nicht zu denken ist, so ist einer solchen Deutung gegenüber Vorsicht am Platze.

Welches Ergebnis die Aufteilung des Ausdrucks $H_k + H_2$ in seine beiden Bestandteile liefert, hängt nun wesentlich davon ab, welches körpergebundene Koordinatensystem man verwendet, wie dieses also aus der inneren Struktur des Systems heraus definiert wird. In Teil I wurde gezeigt, daß es, abgesehen von wenigen Spezialfällen, nicht möglich ist, von der Punktconfiguration her zu einer solchen Definition des körpergebundenen Bezugssystems zu gelangen, daß das Kopplungsglied verschwindet. Man braucht dazu vielmehr außer der Kenntnis der jeweiligen Punktconfiguration auch noch die Kenntnis der jeweils vorliegenden Impulse bzw. Geschwindigkeiten. Eine derartige Einführung eines Bezugssystems a posteriori ist aber nicht nur methodisch nutzlos, sie macht es vielmehr überhaupt unmöglich, den Begriff einer Rotation und einer damit verbundenen Energie von der inneren Bewegung abzutrennen. Etwas anders liegen die Dinge bei wellenmechanischer Betrachtung. Wenn wir uns vorstellen, daß der innere Zustand des Systems durch eine Wellenfunktion $\Psi(q_1)$ beschrieben wird, so kann man daran denken, das gesuchte „körpergebundene“ Bezugssystem nicht nur an die momentane Punktconfiguration, sondern auch an die Wellenfunktion des

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

Systeme zu binden. Da diese nicht nur Aussagen über die geometrische Konfiguration, sondern auch gewisse Informationen über die in dem System vorliegenden Impulse enthält, ist die Möglichkeit, auf diese Weise das Kopplungsglied zu beseitigen, von vornherein nicht von der Hand zu weisen. Die folgenden Überlegungen sollen einer genaueren Untersuchung der Glieder H_k und H_2 im Hinblick auf diese Frage dienen. Wir werden diese Untersuchung wiederum zunächst an dem Modell des Dreikörperproblems durchführen, welches eine Reihe von grundsätzlichen Einsichten zu vermitteln vermag. Insbesondere werden wir danach fragen, ob bzw. wie weit sich die Wirkung des Kopplungsgliedes für vorgegebene innere Bewegungsformen beseitigen läßt und welche effektiven Trägheitsmomente dann in H_2 auftreten.

2. Die Hamilton-Form des Dreikörperproblems

Die Hamilton-Form des Dreikörperproblems ist für ein in bestimmter Weise gewähltes körpergebundenes Koordinatensystem von RUDER³ angegeben worden. Dieses System war dabei so gewählt, daß die ζ -Achse parallel zur Verbindungslinie 1–2, die η -Achse die Flächennormale des von den 3 Massenpunkten aufgespannten Dreiecks war. Schon in Teil I wurde davon Gebrauch gemacht, daß das Kopplungsglied die äußeren Variablen nur in Form eines Faktors L_η enthält. Eine Umformung dieses Kopplungsgliedes hinsichtlich einer Entkopplung wird man also in der Richtung suchen, daß man das ursprüngliche körpergebundene System zusätzlich noch einer Drehung um die η -Achse um einen noch zu bestimmenden, von den inneren Koordinaten abhängigen Winkel $\chi(q_1)$ unterwirft.

Der Hamilton-Operator hat im nicht verdrehten System die folgenden Bestandteile:

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varrho^2} + \frac{2}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \left(\frac{\hbar^2}{2\mu_1 \varrho^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu_2 r^2} \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} \right) + V(\varrho r u), \\ H_k &= \tilde{H}_k + H_a = -\frac{1}{\mu_1 \varrho^2} L_\eta \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial u} + \frac{1}{2} \cot u \right), \\ H_2 &= \frac{1}{2\mu_1 \varrho^2} L_\xi^2 + \frac{1}{2\mu_1 \varrho^2} L_\eta^2 + \frac{\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2 \cos^2 u}{2\mu_1 \varrho^2 \mu_2 r^2 \sin^2 u} L_\zeta^2 + \frac{\cot u}{2\mu_1 \varrho^2} (L_\xi L_\zeta + L_\zeta L_\xi) \end{aligned} \quad (6)$$

mit

$$\begin{aligned} L_\xi &= \frac{\hbar}{i} \left(\sin \gamma \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{\cos \gamma}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} + \cot \beta \cos \gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right), \\ L_\eta &= \frac{\hbar}{i} \left(\cos \gamma \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{\sin \gamma}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} - \cot \beta \sin \gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right), \\ L_\zeta &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \gamma}. \end{aligned} \quad (7)$$

Die Einführung des um den Winkel χ verdrehten Bezugssystems macht eine Umrechnung des Hamilton-Operators erforderlich, die wir in ihren wesentlichen Zügen in etwas schematischer Form erläutern wollen.

Da die inneren Koordinaten von der Transformation nicht betroffen werden, gilt zunächst

$$q_1' = q_1. \quad (8)$$

Die von der Transformation erfaßten Koordinaten q_2 sind die Eulerschen Winkel des Systems. Das verdrehte System werde wiederum durch Eulersche Winkel q_2' gegenüber dem raumfesten System festgelegt. Da die Verdrehung der beiden körpergebundenen

Systeme gegeneinander von den inneren Koordinaten abhängt, gilt schematisch

$$q_2' = T(q_1, q_2). \quad (9)$$

Die in dem ursprünglichen H auftretenden Differentialoperatoren $\partial/\partial q_j$ ($j=1, 2$) sind umzurechnen nach dem Schema

$$\frac{\partial}{\partial q_j} = \frac{\partial q_1'}{\partial q_j} \frac{\partial}{\partial q_1'} + \frac{\partial q_2'}{\partial q_j} \frac{\partial}{\partial q_2'}, \quad (10)$$

wobei über die gestrichenen Koordinaten zu summieren ist. Mit den Transformationsformeln (8) und (9) wird so beispielsweise

$$\frac{\partial}{\partial \varrho} = \frac{\partial}{\partial \varrho'} + \frac{\partial \alpha'}{\partial \varrho} \frac{\partial}{\partial \alpha'} + \frac{\partial \beta'}{\partial \varrho} \frac{\partial}{\partial \beta'} + \frac{\partial \gamma'}{\partial \varrho} \frac{\partial}{\partial \gamma'}. \quad (11)$$

In entsprechender Weise wären dann auch die auftretenden 2. Ableitungen umzurechnen. Das damit angedeutete Verfahren wird allerdings recht aufwendig. Es läßt sich wesentlich vereinfachen durch die Bemerkung, daß in H die Variablen p_2 und q_2 in der Weise auftreten, daß sie sich – wie in (6) geschehen – restlos zu Drehimpulsoperatoren L_ξ , L_η und L_ζ zusammenfassen lassen. Diese drei Größen

³ H. RUDER, Z. Naturforsch. **23 a**, 579 [1968].

bilden insgesamt einen Vektoroperator, dessen Umrechnung auf die neuen Variablen einfach die Komponenten dieses Operators in bezug auf die neuen Achsen liefert. Es wird also bei einer Drehung um die η -Achse um den Winkel $\chi(q_1)$:

$$\begin{aligned} L_{\xi} &= \cos \chi L_{\xi'} + \sin \chi L_{\zeta'}, \\ L_{\eta} &= L_{\eta'}, \\ L_{\zeta} &= -\sin \chi L_{\xi'} + \cos \chi L_{\zeta'}. \end{aligned} \quad (12)$$

Dabei haben die Größen $L_{\xi'}$, $L_{\eta'}$ und $L_{\zeta'}$ in den Variablen q_2' dieselbe funktionale Gestalt wie die L_{ξ} , L_{η} und L_{ζ} in den q_2 . Da der Drehwinkel χ nur von den q_1 abhängt, können wir dann ohne Schwierigkeit auch die für die Umrechnung benötigten quadratischen Ausdrücke bilden, womit die Umrechnung von H_2 auf die neuen äußeren Koordinaten durchgeführt ist. Bei der Umrechnung der Glieder mit

inneren Koordinaten treten gemäß der allgemeinen Regel (10) ebenfalls Ableitungen nach den Eulerschen Winkeln auf, die wir in der endgültigen Darstellung von H wiederum durch die Drehimpulskomponenten $L_{\xi'}$, $L_{\eta'}$ und $L_{\zeta'}$ ausdrücken werden. Es ist zweckmäßig, diese Größen bereits in (10) bzw. in der Gesamtheit der Gleichungen (11) einzuführen. Bei einer Verdrehung der körpergebundenen Systeme gegeneinander liefert jede Drehimpulskomponente im allgemeinen Beiträge zu allen drei neuen Komponenten. In unserem speziellen Fall, wo wir es mit einer Drehung um die η -Achse zu tun haben, ergibt sich nach (10)

$$\frac{\partial}{\partial q_1} = \frac{\partial}{\partial q_1'} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \chi}{\partial q_1} L_{\eta'}. \quad (13)$$

Damit nimmt auch die 2. Ableitung eine verhältnismäßig einfache Form an, sie wird nämlich

$$\frac{\partial^2}{\partial q_1^2} = \frac{\partial^2}{\partial q_1'^2} + \frac{2i}{\hbar} \frac{\partial \chi}{\partial q_1} L_{\eta'} \frac{\partial}{\partial q_1'} - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial \chi}{\partial q_1} \right)^2 L_{\eta'}^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_1^2} L_{\eta'}. \quad (14)$$

Für die Bestandteile des umgerechneten Hamilton-Operators erhält man auf diese Weise

$$\begin{aligned} H_1^* &= -\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) - \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} \right) + V(\varrho r u), \\ H_k^* &= \left\{ \frac{1}{\mu_1} \frac{\partial \chi}{\partial \varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} + \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial \chi}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{1}{\mu_1 \varrho^2} + \frac{1}{\mu_2 r^2} \right) \left(\frac{\partial \chi}{\partial u} - \frac{\mu_2 r^2}{\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2} \right) \frac{\partial}{\partial u} \right. \\ &\quad + \frac{1}{2\mu_1} \left(\frac{\partial^2 \chi}{\partial \varrho^2} + \frac{2}{\varrho} \frac{\partial \chi}{\partial \varrho} \right) + \frac{1}{2\mu_2} \left(\frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \chi}{\partial r} \right) \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{2\mu_1 \varrho^2} + \frac{1}{2\mu_2 r^2} \right) \left[\frac{\partial^2 \chi}{\partial u^2} + \cot u \left(\frac{\partial \chi}{\partial u} - \frac{\mu_2 r^2}{\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2} \right) \right] \right\} \frac{\hbar}{i} L_{\eta'}, \\ H_2^* &= \left\{ \frac{\mu_1 \varrho^2 \sin^2 \chi + \mu_2 r^2 \sin^2(u-\chi)}{2\mu_1 \varrho^2 \mu_2 r^2 \sin^2 u} \right\} L_{\xi}^2 + \left\{ \frac{\mu_1 \varrho^2 \cos^2 \chi + \mu_2 r^2 \cos^2(u-\chi)}{2\mu_1 \varrho^2 \mu_2 r^2 \sin^2 u} \right\} L_{\zeta}^2, \\ &\quad + \left\{ \frac{-\mu_1 \varrho^2 \sin \chi \cos \chi + \mu_2 r^2 \sin(u-\chi) \cos(u-\chi)}{2\mu_1 \varrho^2 \mu_2 r^2 \sin^2 u} \right\} (L_{\xi} L_{\zeta} + L_{\zeta} L_{\xi}) \\ &\quad + \left\{ \frac{1}{2\mu_1} \left(\frac{\partial \chi}{\partial \varrho} \right)^2 + \frac{1}{2\mu_2} \left(\frac{\partial \chi}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{1}{2\mu_1 \varrho^2} + \frac{1}{2\mu_2 r^2} \right) \left(\frac{\partial \chi}{\partial u} - \frac{\mu_2 r^2}{\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2} \right)^2 + \frac{1}{2(\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2)} \right\} L_{\eta}^2, \end{aligned} \quad (15)$$

wobei an den Koordinaten ϱ , r und u sowie an den Indizes der Drehimpulskomponenten ein Strich stehen müßte, den wir im folgenden der Einfachheit halber stets weglassen.

In Abb. 1 ist schematisch dargestellt, wie die Anteile des neuen Hamilton-Operators sich aus Beiträgen der alten Anteile zusammensetzen:

	H_1	H_k	H_2
H_1^*	□		
H_k^*	□	□	
H_2^*	□	□	□

Abb. 1. Der Zusammenhang zwischen den umgerechneten Größen H_1^* , H_k^* , H_2^* und den ursprünglichen Größen H_1 , H_k , H_2 .

Die Aufgabe der folgenden Abschnitte wird es sein, die Bestandteile des neuen Hamilton-Operators in ihrer Bedeutung und in ihren gegenseitigen Beziehungen zu diskutieren, um dabei Lösungsmöglichkeiten für das gestellte Problem zu erkennen.

3. Der Operator der inneren Bewegung

Der Operator der inneren Bewegung behält, wie man sieht, auch im transformierten System seine ursprüngliche Gestalt bei. Alle bei der Transformation von H_1 neu auftretenden Glieder, deren Zustandekommen in den Gln. (13) und (14) angedeutet ist, enthalten notwendig die kollektiven Koordinaten q_2

und werden dementsprechend den Anteilen H_k^* und H_2^* zugeschlagen, wobei diese, wie schon ausgeführt, auch die Koordinaten q_1 teils in Form von Operatoren, teils als einfache Variable enthalten. Bezüglich H_1^* werden wir später voraussetzen, daß die zugehörigen Eigenzustände, auf denen sich dann die Rotationszustände aufbauen sollen, energetisch genügend weit auseinanderliegen, so daß die durch die weiteren Glieder bewirkten Korrekturen sich nachträglich, etwa mit Hilfe einer Störungsrechnung, berücksichtigen lassen. Wir werden ferner annehmen, daß der Ausgangszustand rotationsfrei ist, also zu $L = 0$ gehört.

4. Der Operator der kollektiven Bewegung und der Kopplungsoperator

Schon in Abschn. 1 haben wir eine Vorschrift zur eindeutigen Aufteilung des Operators $H_k + H_2$ in seine beiden Bestandteile formuliert. Danach waren antisymmetrische Anteile der Form $L_\xi L_\zeta - L_\zeta L_\xi$ aus H_2 heraus- und mittels der Vertauschungsrelation (4) nach H_k zu überführen. Wir bemerken dazu noch, daß Operatoren der Form $L_\xi L_\zeta$ im Gegensatz zu den übrigen Bestandteilen von H_2 nicht hermitisch sind. Da die Summe $H_k + H_2$ als ganze ebenso

wie H_1 für sich sicher hermitische Operatoren sind, werden durch die genannte Überführung die beiden Anteile H_k und H_2 überhaupt erst hermitische Operatoren und damit einer physikalischen Deutung zugänglich. Für die Größen H_1^* , H_2^* , H_k^* gelten natürlich die gleichen Überlegungen.

Im Gegensatz zu Teil I, wo der formale Aufbau von H_2 außer Betracht bleiben konnte, wird dies von Bedeutung, wenn wir im folgenden unser Augenmerk auf den kollektiven Anteil H_2^* richten und den darin auftretenden Trägheitstensor diskutieren wollen.

Die damit in das Kopplungsglied eintretende Zusatzgröße H_a^* ergänzt dieses jedoch nicht nur im Sinne der Hermitizität. Man erkennt vielmehr, daß sich nunmehr die „alten“ Glieder von H_k^* , die Ableitungen nach den inneren Koordinaten enthalten, und die „neuen“ Glieder von H_k^* , die aus den antisymmetrischen Anteilen von H_2 hervorgegangen sind, so zusammenfassen lassen, daß vollständige Differentiale dastehen. Es ist nämlich in Anwendung auf eine beliebige Wellenfunktion Φ_0 für den Ausgangszustand, die wegen $L = 0$ nur von den inneren Koordinaten abhängt und die wir demgemäß reell annehmen können,

$$H_k^* \Phi_0 = \frac{\hbar}{i} L_\eta \left\{ \frac{1}{\Phi_0} \left[\frac{1}{2 \mu_1 \varrho^2} \frac{\partial}{\partial \varrho} \left(\Phi_0^2 \varrho^2 \frac{\partial \chi}{\partial \varrho} \right) + \frac{1}{2 \mu_2 r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\Phi_0^2 r^2 \frac{\partial \chi}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin u} \left(\frac{1}{2 \mu_1 \varrho^2} + \frac{1}{2 \mu_2 r^2} \right) \frac{\partial}{\partial u} \left(\Phi_0^2 \sin u \left(\frac{\partial \chi}{\partial u} - \frac{\mu_2 r^2}{\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2} \right) \right) \right] \right\}. \quad (16)$$

Wenn man berücksichtigt, daß das Volumenelement bei der Integration über die inneren Variablen die Form $\varrho^2 r^2 \sin u \, du \, dr \, d\varrho$ hat, so sieht man sofort, daß der Erwartungswert jedes der in (16) auftretenden Glieder für sich schon bei Integration über die inneren Koordinaten für jede physikalisch sinnvolle Wellenfunktion verschwindet, so daß also auch im ganzen stets

$$\int \Phi_0 H_k^* \Phi_0 \, d\tau = 0 \quad (17)$$

ist, und zwar für jede Wellenfunktion und jede beliebige Funktion $\chi(\varrho, r, u)$ (wobei wir den Operator L_η zunächst außer acht gelassen haben).

An das Verschwinden von $\langle H_k^* \rangle$ läßt sich folgende Überlegung knüpfen. Wenn wir von einem Zustand Φ_0 ausgehen, der eine Lösung von H_1^* darstellt, so können wir eine Rotation dieses Zustandes so behandeln, daß wir die weiteren Glieder $H_k^* + H_2^*$ als Störglieder betrachten, wobei der

Drehimpuls die Rolle des Störparameters spielt. In niederster Ordnung, also linear in L_η , kommt energetisch nur das Diagonalelement von H_k^* , also $\langle H_k^* \rangle$ ins Spiel. Da dieses verschwindet, treten also in niederster, nichtverschwindender Ordnung quadratische Glieder in den Drehimpulskomponenten auf, wobei diese sowohl Beiträge erster Ordnung von H_2^* wie auch solche zweiter Ordnung in H_k^* aufweisen.

Eine Fortführung der Störungsrechnung würde natürlich weitere Beiträge höherer Ordnung liefern. Da wir uns für Rotationsbanden und die damit zusammenhängenden Trägheitsmomente interessieren, und da diese Begriffe speziell mit den in den Drehimpulsen quadratischen Gliedern zusammenhängen, werden wir annehmen, daß das Energieschema der von uns betrachteten Systeme durch diese Glieder bereits mit hinreichender Genauigkeit wiedergegeben wird, daß also die höheren Potenzen von L

keine wesentliche Rolle spielen. Diese Forderung ist allerdings schon wegen der in dieser Ordnung hinzutretenden energetischen Beiträge von H_k^* keineswegs hinreichend dafür, daß Rotationsstufen – im allgemeinen die des asymmetrischen Kreisels – erwartet werden dürfen. Wir werden diese Zusammenhänge in Abschn. 11 noch näher untersuchen.

Physikalisch bedeutet das Verschwinden der in den Drehimpulskomponenten linearen Glieder einfach die Tatsache, daß für die bei der Rotation hinzutretende Energie die Drehrichtung keine Rolle spielt.

5. Extremalprinzip und spezifische Entkopplung

Wir betrachten den Erwartungswert von H für eine Wellenfunktion $\Psi(qru, \alpha\beta\gamma)$, die wir im Rahmen unserer Überlegungen (vgl. Abschn. 11) als separiert ansetzen können:

$$\Psi(qru, \alpha\beta\gamma) = \Phi_0(qru) f(\alpha\beta\gamma). \quad (18)$$

Eine solche Wellenfunktion erfordert stets noch die zusätzliche Angabe, wie das körpergebundene Achsenkreuz, auf welches die Eulerschen Winkel α, β, γ bezogen sind, an das System angeknüpft ist. In unserem Falle wird also erst durch die Bestimmung des Winkels χ als Funktion der Koordinaten q, r und u die in der Wellenfunktion enthaltene physikalische Aussage endgültig festgelegt, und jede Variation der Funktion χ ist äquivalent zu einer Variation der Wellenfunktion. Für eine gegebene funktionale Form von $\Phi_0(qru) f(\alpha\beta\gamma)$ ist aber die optimale Annäherung an eine strenge Lösung von H sicher diejenige, die bei Variation von χ die Größe $\langle H \rangle$ extremal macht, für die also

$$\delta \int \Psi H \Psi d\tau = 0 \quad (19)$$

gilt. Die zu variierende Funktion erscheint nun zwar in der Wellenfunktion überhaupt nicht explizit. Sie wird aber bei unserem Vorgehen im Hamilton-Operator sichtbar. Eine Variation von χ bedeutet also in unserem Falle zwar formal eine Variation des Hamilton-Operators, physikalisch jedoch nichts anderes als eine Variation der Wellenfunktion.

Das Integral in (19) zerfällt in die 3 Summanden $\langle H_1^* \rangle$, $\langle H_k^* \rangle$ und $\langle H_2^* \rangle$. Der erste Anteil $\langle H_1^* \rangle$ enthält χ nicht, er kann also bei der Variation außer Betracht bleiben. Der zweite Anteil $\langle H_k^* \rangle$ ist nach den Überlegungen des vorigen Abschnitts stets Null. Wir brauchen also in (19) nur $\langle H_2^* \rangle$ zu berücksichtigen. Die Extremalbedingung für $\langle H_2^* \rangle$, bei

welcher wir in unserem speziellen Falle nur das Glied mit L_η^2 zu berücksichtigen brauchen, führt nun aber, wie man leicht nachrechnet, zu einer Euler-Lagrange-Gleichung für χ , die sich mit der Beziehung

$$H_k^* \Phi_0 = 0 \quad (20)$$

– wiederum unter Weglassung des Operators L_η – als identisch erweist. Bei vorgegebenem Φ_0 ist (20) als eine Bestimmungsgleichung für die Funktion χ anzusehen.

Wir haben damit ein grundlegendes Ergebnis gewonnen. Ohne daß der Kopplungsoperator im Hamilton-Operator selbst verschwindet, wird durch die Erfüllung der Beziehung (20) seine Wirkung auf die betrachtete Ausgangsfunktion beseitigt. Mit (20) verschwinden insbesondere alle mit dem Ausgangszustand verknüpften Matrixelemente sowie die bei einer Störungsrechnung daraus hervorgehenden energetischen Beiträge höherer Ordnung.

Im Gegensatz zu dem in Teil I verwendeten Begriff der Entkopplung, der dadurch gekennzeichnet war, daß der Kopplungsterm identisch verschwindet, bezeichnen wir das durch Erfüllung von (20) erreichte, auf eine bestimmte Ausgangswellenfunktion bezogene Ergebnis als „spezifische“ Entkopplung.

Daß die Extremalforderung (19) notwendig mit der Beziehung (20) verbunden ist, erkennt man aus folgender Überlegung. Wir gehen aus von einer strengen Lösung unseres Problems, für welche jedoch die durch χ gegebene Zusatzaussage noch als variierbar betrachtet werden möge. Für die strenge Lösung ist der Eigenwert identisch mit dem Erwartungswert $\langle H_1^* + H_2^* \rangle$, und es gelten gleichzeitig zwei Aussagen: einmal hat $\langle H_2^* \rangle$ bei Variation von χ die Extremaleigenschaft, zum anderen ergeben sich bei einer formal mit dem Störglied H_k^* aufgezogenen Störungsrechnung keine zusätzlichen energetischen Beiträge, was bedeutet, daß die mit dem Ausgangszustand verknüpften Matrixelemente verschwinden. Es handelt sich bei diesen beiden notwendig miteinander verknüpften Aussagen um Beziehungen zwischen den Operatoren H_2^* und H_k^* unabhängig von der Wellenfunktion, womit sich der Zusammenhang zwischen $\delta \langle H_2^* \rangle = 0$ und $H_k^* \Phi_0 = 0$ völlig allgemein ergibt.

6. Die Struktur des Trägheitstensors

Bevor wir zu energetischen Fragen übergehen, betrachten wir zunächst die Struktur des in H_2^* auf-

tretenden Trägheitstensors. Da er sich von dem nach der üblichen Definition gewonnenen Trägheitstensor Θ unterscheidet, bezeichnen wir ihn, wie bereits in

(5) eingeführt, mit $\hat{\Theta}$. Der quadratischen Form H_2^* entnehmen wir

$$\hat{\Theta}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\mu_1 \varrho^2 \sin^2 \chi + \mu_2 r^2 \sin^2(u - \chi)}{\mu_1 \varrho^2 \mu_2 r^2 \sin^2 u} & 0 & \frac{-\mu_1 \varrho^2 \sin \chi \cos \chi + \mu_2 r^2 \sin(u - \chi) \cos(u - \chi)}{\mu_1 \varrho^2 \mu_2 r^2 \sin^2 u} \\ 0 & \frac{1}{\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2} + B & 0 \\ \frac{-\mu_1 \varrho^2 \sin \chi \cos \chi + \mu_2 r^2 \sin(u - \chi) \cos(u - \chi)}{\mu_1 \varrho^2 \mu_2 r^2 \sin^2 u} & 0 & \frac{\mu_1 \varrho^2 \cos^2 \chi + \mu_2 r^2 \cos^2(u - \chi)}{\mu_1 \varrho^2 \mu_2 r^2 \sin^2 u} \end{pmatrix}$$

$$\text{mit } B = \frac{1}{\mu_1} \left(\frac{\partial \chi}{\partial \varrho} \right)^2 + \frac{1}{\mu_2} \left(\frac{\partial \chi}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{1}{\mu_1 \varrho^2} + \frac{1}{\mu_2 r^2} \right) \left(\frac{\partial \chi}{\partial u} - \frac{\mu_2 r^2}{\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2} \right)^2. \quad (21)$$

Wenn man den normalen Trägheitstensor Θ der Punktkonfiguration berechnet und den Reziprokwert bildet, so ergibt sich genau der Ausdruck (21), wenn man in diesem $B = 0$ setzt.

Man sieht daraus, daß sich der Trägheitstensor $\hat{\Theta}$ nur in einem, nämlich in dem auf die Hauptträgheitsachse senkrecht zur Dreiecksebene bezogenen Element von dem normalen Tensor Θ unterscheidet. B ist eine Summe über quadratische Ausdrücke und daher stets ≥ 0 . Schon in Teil I haben wir gezeigt, daß B bei variablen ϱ und r nicht verschwinden kann. Quantitative Aussagen über B können wir machen, sobald für $\chi(\varrho, r, u)$ eine bestimmte Form vorliegt. Beispielsweise wird für unser Ausgangssystem ($\chi = 0$)

$$B = \mu_2 r^2 / [\mu_1 \varrho^2 (\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2)].$$

Ganz allgemein ergibt sich aus (21) für jede Konfiguration eine Verkleinerung des Trägheitsmomentes für diejenige körpergebundene Achse, über welche die Kopplung zwischen innerer und kollektiver Bewegung erfolgt. Dagegen behalten die Trägheitsmomente für die in der Dreiecksebene liegenden Achsen ihre der Konfiguration entsprechenden normalen Werte bei. Anschaulich entspricht der so ermittelte Trägheitstensor $\hat{\Theta}$ einer Massenverteilung, die ein in Richtung der Flächennormale verdicktes und in der Dreiecksebene entsprechend zusammengezogenes Gebilde darstellt. Die energetischen Auswirkungen dieses Effektes, der mit dem Erwartungswert von B zusammenhängt, werden wir in den folgenden Abschnitten diskutieren. Zunächst müssen wir jedoch die Gesichtspunkte entwickeln, die uns zu einer Bestimmung von χ führen.

7. Der Erwartungswert der Rotationsenergie. Erste Annäherung: der Effekt nullter Ordnung

Wir betrachten wiederum zunächst nur den Anteil von L_η^2 an der Rotationsenergie, da wir hier unabhängig von dem Winkel χ stets eine Hauptträgheitsachse, und zwar diejenige mit dem maximalen Trägheitsmoment, vor uns haben. Dabei nehmen wir wieder an, daß die Lösungsfunktion bezüglich der inneren und äußeren Koordinaten separiert ist, also Produktform hat. Wir bilden zunächst den Erwartungswert von H_2^* über die inneren Koordinaten. Dabei ergibt sich eine quadratische Form in den Drehimpulskomponenten mit konstanten Koeffizienten. Der Koeffizient von L_η^2 wird dabei – wenn wir den Index η bis auf weiteres weglassen –

$$\Theta_{\text{eff}}^{-1} = \langle \hat{\Theta}^{-1} \rangle = \left\langle \frac{1}{\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2} + B \right\rangle. \quad (22)$$

Aus (21) wissen wir, daß B stets ≥ 0 ist. Die Forderung möglichst tiefer Energie bedeutet, daß wir B durch geeignete Wahl von χ minimal machen müssen. Als erste Annäherung und Effekt nullter Ordnung bezeichnen wir im folgenden die Ergebnisse, die wir erhalten, wenn wir B überhaupt weglassen. Wir erhalten so eine obere Grenze für das ins Spiel kommende Trägheitsmoment, nämlich

$$\Theta_{\text{eff}}^{(0)} = \langle 1 / (\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2) \rangle^{-1}. \quad (23)$$

Im Nenner innerhalb der Klammer steht das normale Trägheitsmoment der Konfiguration bezüglich der Flächennormale. Wir haben also nicht dieses, sondern seinen Reziprokwert der Mittelung zu unterwerfen und dann den Kehrwert zu nehmen. Es ergibt sich dabei natürlich ein anderer Wert als wenn man das Trägheitsmoment $\Theta = \mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2$ selbst

der Mittelung unterwirft. Eine Mittelung der letzten Art ist vorzunehmen, wenn man etwa Quadrupolmomente einer gegebenen Massenverteilung auszurechnen hat. Diese Feststellung ist immer dann zu berücksichtigen, wenn es sich darum handelt, Aussagen über Massenverteilungen, die aus Quadrupolmessungen einerseits, aus Rotationsenergien andererseits gewonnen werden, miteinander zu vergleichen.

Man erkennt sehr leicht, daß sich $\Theta_{\text{eff}}^{(0)}$ stets kleiner ergibt als $\langle \Theta \rangle$. Wir zeigen dies nur für einen einzelnen (reduzierten) Massenpunkt. Hier haben wir es mit den beiden Mittelwerten $\int \Phi^2 \varrho^2 d\tau$ einerseits, $\int (\Phi^2/\varrho^2) d\tau$ andererseits zu tun. Wenn wir im zweiten Integral die Variable durch einen Strich markieren, so wird das Produkt der beiden Ausdrücke

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Theta \rangle}{\Theta_{\text{eff}}^{(0)}} &= \langle \varrho^2 \rangle \cdot \left\langle \frac{1}{\varrho^2} \right\rangle = \iint \Phi^2 \cdot \Phi'^2 \frac{\varrho^2}{\varrho'^2} d\tau d\tau' \\ &= \frac{1}{2} \left\langle \left\langle \frac{\varrho^2}{\varrho'^2} + \frac{\varrho'^2}{\varrho^2} \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left\langle \frac{\varrho^4 + \varrho'^4}{2 \varrho^2 \varrho'^2} \right\rangle \right\rangle \\ &= 1 + \left\langle \left\langle \frac{(\varrho - \varrho')^2 (\varrho + \varrho')^2}{2 \varrho^2 \varrho'^2} \right\rangle \right\rangle, \end{aligned} \quad (24)$$

worin wir durch zweifache Klammern die doppelte Mittelung angedeutet haben. Das Ergebnis zeigt, daß unser effektives Trägheitsmoment stets kleiner ist als das durch die übliche Mittelung gewonnene. Eine etwas große Abschätzung der rechten Seite liefert die Aussage

$$\langle \Theta \rangle / \Theta_{\text{eff}}^{(0)} \approx 1 + 4 \langle \Delta \varrho^2 \rangle / \langle \varrho^2 \rangle. \quad (25)$$

Wir wollen den hier gefundenen Effekt wegen seiner Bedeutung für unsere Fragestellung für einige Beispiele noch quantitativ angeben.

a) Wir betrachten als einfachsten Fall eine (fiktive) Wellenfunktion, die innerhalb einer Kugel vom Radius R eine konstante Dichteverteilung für ein Einzelteilchen darstellt. Die Berechnung von $\Theta_{\text{eff}}^{(0)}$ aus $\langle 1/\varrho^2 \rangle$ und von $\langle \Theta \rangle$ aus $\langle \varrho^2 \rangle$ ergibt den Zusammenhang

$$\Theta_{\text{eff}}^{(0)} = \frac{5}{9} \langle \Theta \rangle.$$

b) Die gleiche Rechnung für eine Gauß-Funktion liefert

$$\Theta_{\text{eff}}^{(0)} = \frac{1}{3} \langle \Theta \rangle.$$

c) Wir betrachten einen Massenpunkt, der sich in dem Potential $V = -D \cdot (1/\varrho - 1/2 \varrho^2)$ bewegt. Dieses Potential, der bekannte KRATZERSche⁴ Ansatz

zur Behandlung der Rotations-Schwingungsspektren zweiatomiger Moleküle, ist exakt lösbar. Das Minimum des Potentials liegt bei $\varrho = 1$. Je nach der Potentialtiefe D sind die Zustände mehr oder weniger um diesen Abstand herum lokalisiert. Die Wellenfunktion des Grundzustandes (Radialquantenzahl $n = 0$, Drehimpulsquantenzahl $l = 0$) hat die Gestalt

$$\Phi = C \varrho^\mu e^{-\beta \varrho}$$

mit $\mu = -\frac{1}{2} + \sqrt{D + \frac{1}{4}}$, $\beta = D/(1 + \mu)$, $m = \hbar = 1$.

Für große D , d. h. gute Lokalisierung des Zustandes in der Nähe des Gleichgewichtsabstandes, ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle \varrho^2 \rangle &\approx 1 + 7/(2\sqrt{D}), \\ \langle 1/\varrho^2 \rangle &\approx 1 - 3/(2\sqrt{D}), \\ \langle \Delta \varrho^2 \rangle / \langle \varrho^2 \rangle &\approx 1/(2\sqrt{D}), \end{aligned}$$

womit sich

$$\frac{\langle \Theta \rangle}{\Theta_{\text{eff}}^{(0)}} = \langle \varrho^2 \rangle \cdot \left\langle \frac{1}{\varrho^2} \right\rangle \approx 1 + 4 \frac{\langle \Delta \varrho^2 \rangle}{\langle \varrho^2 \rangle}$$

ergibt, in Übereinstimmung mit unserer obigen Abschätzung. Wenn wir uns vorstellen, daß dieser zunächst drehungsfreie Zustand „in Rotation versetzt“ wird, so schließen wir auf eine damit verbundene Rotationsenergie

$$E_{\text{rot}} = l(l+1)/(2 \Theta_{\text{eff}}^{(0)}).$$

Auf der anderen Seite stehen von der exakten Lösung des Problems her die Eigenwerte in Form einer Reihenentwicklung nach den Quantenzahlen n und l zur Verfügung. Man erhält dabei eine Reihe von Gliedern, die der Reihe nach üblicherweise als Schwingungsenergie, Rotationsenergie, Kopplungsenergie, Anharmonizitätsglieder usw. bezeichnet werden. Der Vergleich zeigt, daß unser obiger Ausdruck für die Rotationsenergie bereits alle Glieder dieser Entwicklung, die den Faktor $l(l+1)$ enthalten, einheitlich zusammenfaßt, womit die obigen Bezeichnungen bzw. Deutungen zum mindesten teilweise entbehrlich werden.

Die hier gegebenen Beispiele beziehen sich auf den einfachsten Fall des einzelnen Massenpunktes, also auf das reduzierte Zweikörpersystem. Sie sind in der Hinsicht exakt, als in diesem Fall die Zusatzgröße B aus (21) nicht auftritt. Auch im Falle mehrerer Teilchen wird als Grundbestandteil der Rotationsenergie immer ein Ausdruck der Form $\frac{1}{2} \mathbf{L} \langle \Theta^{-1} \rangle \mathbf{L}$ auftreten. Auch hier ist also eine Mittelung über den Reziprokwert des üblichen Trägheitstensors vorzunehmen. Dem Ergebnis ist dann jedoch nach (22)

⁴ A. KRATZER, Z. Phys. 3, 289 [1920].

die Größe $\langle B \rangle$ hinzuzufügen, was eine weitere Verkleinerung von Θ_{eff} gegenüber $\langle \Theta \rangle$ bewirkt. Wir werden diesen Effekt am Dreikörperproblem in den nächsten Abschnitten näher untersuchen.

Es soll hier nur noch bemerkt werden, daß es sich bei dieser, aus der Art der Mittelbildung sich ergebenden Verkleinerung von Θ_{eff} gegenüber $\langle \Theta \rangle$ keineswegs um ein quantenmechanisches Phänomen handelt, sondern daß dieser Effekt bei entsprechender Betrachtung bereits im Rahmen der klassischen Mechanik auftritt, wie im Anhang II an einem einfachen Beispiel gezeigt wird.

8. Variationsansätze

Die Überlegungen des vorigen Abschnitts haben gezeigt, daß schon der Effekt nullter Ordnung zu einer erheblichen Verminderung des effektiven Trägheitsmomentes gegenüber seinem normalen Wert führen kann. Vom Dreiteilchenproblem ab tritt nun die Kopplungsgröße B hinzu, die eine weitere Verkleinerung des effektiven Trägheitsmomentes bewirkt. Wir werden diese Größe nunmehr mitnehmen und die darin auftretende Funktion χ unseren früheren Überlegungen entsprechend so zu bestimmen suchen, daß $\langle B \rangle$ seinen Minimalwert annimmt, um auf diese Weise dem durch (20) bestimmten Zustand der spezifischen Entkopplung möglichst nahe zu kommen.

Schon in Teil I hatten wir zwei Fälle festgestellt, in denen sich in guter Näherung Entkopplung erzielen läßt: der eine war der, daß die Radien nur eine geringe Schwankungsbreite um ihren Mittelwert aufweisen, der andere der, daß der Winkel u in der Nähe eines bestimmten Mittelwertes u_0 bleibt. Wir untersuchen die den beiden Fällen entsprechenden Ansätze im Sinne einer Minimalisierung von $\langle B \rangle$.

A. Der Ansatz $\chi = C u$

Im Falle fester Zentralabstände führt dieser Ansatz zu einer vollständigen Entkopplung. Die Extremalforderung für den Fall variabler Zentralabstände liefert

$$C = \frac{\langle 1/\mu_1 \varrho^2 \rangle}{\langle 1/\mu_1 \varrho^2 + 1/\mu_2 r^2 \rangle}.$$

Für das effektive Trägheitsmoment ergibt sich daraus der Ausdruck

$$\Theta_{\text{eff}} = \mu_1 \langle 1/\varrho^2 \rangle^{-1} + \mu_2 \langle 1/r^2 \rangle^{-1}. \quad (26)$$

Man erkennt, daß dieser Wert des effektiven Trägheitsmomentes um den gleichen Faktor unterhalb des normalen Erwartungswertes liegt wie im Falle eines Einzelteilchens (wo B nicht auftrat). Bei variablen Zentralabständen wird unser Ansatz allerdings das Variationsproblem nicht exakt lösen, d. h. wir erhalten nicht das absolute Minimum von $\langle B \rangle$. Das bedeutet, daß wir den Ausdruck (26) — wie überhaupt die Ergebnisse von Variationsansätzen — als untere Grenze für das effektive Trägheitsmoment zu betrachten haben. Nach den Beispielen a) und b) des vorigen Abschnitts liegen die betreffenden Werte bei 30 bis 60% der normalen Trägheitsmomente. Andererseits ergaben die Überlegungen des vorigen Abschnitts mit (23) eine obere Grenze, die bei unserem 3-Teilchensystem — je nach dem Grad der Starrheit — bei 60 bis 100% des Normalwertes liegen wird. Wir werden die quantitativen Verhältnisse weiter unten noch an Beispielen diskutieren.

$$B. \text{ Der Ansatz } \chi = \frac{\mu_2 r^2}{\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2} (u - u_0)$$

Nach den Überlegungen von Teil I empfiehlt sich dieser Ansatz für Probleme, wo der Winkel u in der Nähe eines mittleren Wertes u_0 bleibt. Die Extremalforderung führt zu dem Ergebnis, daß für u_0 der Erwartungswert von u zu nehmen ist. Einsetzen in $\langle B \rangle$ liefert für das effektive Trägheitsmoment die Aussage

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} &= \left\langle \frac{1}{\Theta} \left[1 + 4(u - u_0)^2 \frac{\mu_1 \varrho^2 \mu_2 r^2}{(\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2)^2} \right] \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{1}{\Theta} \left[1 + (u - u_0)^2 \left(1 - \frac{(\mu_1 \varrho^2 - \mu_2 r^2)^2}{(\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2)^2} \right) \right] \right\rangle. \end{aligned} \quad (27)$$

In der zweiten Form erkennt man wiederum, wie das effektive Trägheitsmoment von dem Schwankungsquadrat, in diesem Fall der Winkelvariablen, abhängt, wobei eine Unsymmetrie im radialen Verhalten auf diesen Einfluß abschwächend wirkt.

C. Anwendung auf ein spezielles Dreiteilchenproblem

Wir betrachten ein Gebilde, welches aus 3 gleichen Teilchen der Masse m mit den gegenseitigen Abständen r_{12} , r_{23} und r_{31} besteht, die durch eine anziehende Wechselwirkung zusammengehalten werden. Wir wenden die Überlegungen der beiden vorigen Abschnitte an, indem wir dem System für den rotationsfreien Ausgangszustand zwei Wellenfunktionen zuordnen, die sich in charakteristischer Weise unterscheiden.

Die erste Wellenfunktion

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= \text{const} \cdot \exp\left[-\frac{\alpha}{2}(r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2)\right] \quad (28) \\ &= \text{const} \cdot \exp\left[-(3\alpha/2m)(\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2)\right]\end{aligned}$$

stellt einen Zustand dar, in welchem sich die 3 Teilchen möglichst nahe beieinander aufhalten.

Die zweite Wellenfunktion

$$\begin{aligned}\Phi_2 &= \text{const} \cdot r_{12}^2 r_{23}^2 r_{31}^2 \\ &\quad \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\alpha(r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2)\right] \\ &= \text{const} \cdot \frac{2}{m^3} \mu_1 \varrho^2 \left[\left(\frac{1}{2}\mu_1 \varrho^2 + \frac{3}{2}\mu_2 r^2\right) \right. \\ &\quad \left. - 3\mu_1 \varrho^2 \mu_2 r^2 \cos^2 u\right] \quad (29) \\ &\quad \cdot \exp\left[-(3\alpha/2m)(\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2)\right]\end{aligned}$$

ist so gebaut, daß die gegenseitigen Abstände der 3 Teilchen um einen einheitlichen Mittelwert herum schwanken, so daß im Mittel ein gleichseitiges Dreieck entsteht. Wir können ein solches Gebilde als die Darstellung eines C^{12} -Kerns im α -Teilchenmodell ansehen.

Die Durchführung der Variationsrechnung für die beiden Ansätze A und B liefert die in Tab. 1 zusammengestellten Ergebnisse. Die Werte der sich ergebenden effektiven Trägheitsmomente sind angegeben in Einheiten des jeweiligen „Normalwertes“, nämlich des Erwartungswertes $\langle \mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2 \rangle$ für die betreffende Wellenfunktion.

	Effekt nullter Ordnung $\left\langle \frac{1}{\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2} \right\rangle^{-1}$	Ansatz A $\left\langle \frac{1}{\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2} + B \right\rangle^{-1}$	Ansatz B
Φ_1	0,67	0,33	0,49
Φ_2	0,89	0,63	0,74

Tab. 1. Effektive Trägheitsmomente für die Wellenfunktionen Φ_1 und Φ_2 in Einheiten von $\langle \mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2 \rangle$.

Die erste Spalte, die den Effekt nullter Ordnung angibt, zeigt, daß das Verhältnis von $\Theta_{\text{eff}}/\langle \Theta \rangle$ näher gegen Eins rückt, wenn das System durch die Wellenfunktion strukturell stärker festgelegt wird. Die beiden Zahlen stellen überdies jeweils eine obere Grenze dar für alle Ergebnisse, die wir aus einer genaueren Rechnung (folgende Spalten) erhalten können. Andererseits ist es unsere Aufgabe, bei einer solchen genaueren Rechnung $\langle B \rangle$ möglichst klein, also das effektive Trägheitsmoment möglichst groß zu machen, es also der oberen Grenze möglichst an-

zunähern. Die beiden hinteren Spalten zeigen, daß der Ansatz B hierbei wesentlich günstiger ist als der Ansatz A. Das ist nicht verwunderlich, da in die Konstante C des ersten Ansatzes die Abstände der Teilchen vom Zentrum nur über einen Mittelungsprozeß eingehen, während sie im zweiten Ansatz noch voll berücksichtigt werden, und zwar so, daß sich die χ -Richtung bei Variation von u wie die „Schwerlinie“ unseres Systems (vgl. Teil I) verhält.

9. Die Hauptträgheitsachsen

Bei dem Versuch, eine Entkopplung zu erreichen, können wir nach unseren bisherigen Überlegungen verschiedene Wege gehen. Wir können entweder, wie es im vorigen Abschnitt geschehen ist, eine Wellenfunktion vorgeben und dann den zugehörigen Winkel χ aus (19) bzw. (20) bestimmen.

Im Prinzip kann man auch umgekehrt so vorgehen, daß man in die Euler-Lagrange-Gleichung (20) eine bestimmte Funktion χ einsetzt und die Gleichung dann als eine Bestimmungsgleichung für die Wellenfunktion Φ_0 des rotationsfreien Ausgangszustands auffaßt. Wenn das Ergebnis einen Sinn haben soll, so muß in diesem Fall die ermittelte Wellenfunktion eine normierbare Funktion und Lösung zu einem sinnvollen H_1^* sein. Es liegt nahe, in dieser Weise die in der Literatur oft verwendeten Hauptträgheitsachsen zu testen. Diese ergeben sich aus dem Ansatz

$$\chi = \frac{1}{2} \arccot(\cot 2u + \mu_1 \varrho^2 / (\mu_2 r^2 \sin 2u)). \quad (30)$$

Man stellt zunächst fest, daß der Anteil H_a^* des Kopplungsgliedes für diesen Ansatz verschwindet. Man kann weiter feststellen, daß die verbleibende Euler-Lagrange-Gleichung für jede Funktion

$$\Phi_0 = \Phi_0(\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2, \varrho r \sin u), \quad (31)$$

also für jede Funktion, die einerseits von der gewichteten Quadratsumme der beiden Abstände, andererseits von der durch sie aufgespannten Fläche abhängt, erfüllt ist. Es sieht also so aus, als hätte man damit eine ganze Schar von physikalisch sinnvollen Wellenfunktionen zur Verfügung.

Wenn man jedoch daran geht, für eine solche Wellenfunktion das zugehörige Trägheitsmoment zu berechnen, so sieht man, daß man für Θ_{eff} immer den Wert Null erhält, solange man nicht in der Wellenfunktion das Auftreten des symmetrischen Falles ($u = \pi/2$, $\mu_1 \varrho^2 = \mu_2 r^2$) durch einen Faktor der

Form

$[(\mu_1 \varrho^2 + \mu_2 r^2)^2 - 4 \mu_1 \mu_2 \varrho^2 r^2 \sin^2 u]^\delta, \delta > 0$ (32) verhindert. Diese bei der symmetrischen Konfiguration auftretende Divergenz von $\langle \hat{\Theta}^{-1} \rangle$ entspricht der in der Literatur oft zu findenden Aussage, daß das Trägheitsmoment eines symmetrischen Gebildes bezüglich der Figurenachse Null sei.

Andererseits haben wir im 1. Beispiel des vorigen Abschnitts eine Modellwellenfunktion betrachtet, die von dem hier betrachteten Typ (31) ist, die jedoch einen solchen symmetrierausschließenden Faktor keineswegs enthält, und haben gefunden, daß das Trägheitsmoment bezüglich der Flächennormale einen endlichen Wert hat, den wir zwischen 2 Grenzen einschließen konnten.

Der hier vorliegende Widerspruch zwischen der physikalischen Anschauung einerseits, die auf ein endliches Trägheitsmoment schließen läßt, und dem formal-mathematischen Ergebnis, welches für das Trägheitsmoment den Wert Null liefert, löst sich auf durch die Erkenntnis, daß das in (30) eingeführte, die Hauptträgheitsachsen beschreibende χ eine Funktion ist, die an der Stelle $u = \pi/2$ und $\mu_1 \varrho^2 = \mu_2 r^2$ (symmetrischer Fall) unstetig ist und singuläre partielle Ableitungen aufweist. Damit wird die Äquivalenz zwischen dem Variationsprinzip (19) und der Euler-Lagrange-Gleichung (20) hinfällig und die aus der letzteren formal-mathematisch gezogenen Schlüsse werden gegenstandslos.

Physikalisch beruht das Versagen der Hauptträgheitsachsen als Bezugssystem auf folgendem: In Abschn. 5 haben wir festgestellt, daß eine Wellenfunktion der allgemeinen Form $\psi(q_1, \alpha \beta \gamma)$ in ihrer physikalischen Bedeutung erst dann festgelegt ist, wenn angegeben wird, auf welches körpergebundene Achsenkreuz sich die Eulerschen Winkel beziehen. Diese Angabe muß eindeutig sein, da sie den Zusammenhang zwischen den Koordinaten und der Lage der Massenpunkte im Raum liefert. Wir müssen daher verlangen, daß χ eine eindeutige und stetige Funktion der q_1 ist. Diese Forderung ist jedoch für die in (30) definierte Funktion χ , welche die Hauptträgheitsachsen liefert, nicht erfüllt.

Die mit der Verwendung von Hauptträgheitsachsen unvermeidlich auftretende Unbestimmtheit ist auch anschaulich unmittelbar zu erkennen. Wir betrachten dazu Abb. 2, in welcher das reduzierte Dreikörperproblem in der Nähe des symmetrischen Falles ($\mu_1 \varrho^2 = \mu_2 r^2, u = \pi/2$) schematisch dargestellt ist. Wenn wir den in b) dargestellten symme-

trischen Fall von a) aus annähern, also so, daß wir bei festgehaltenem Winkel $u = \pi/2$ einen der beiden Radien verändern, so liegen bei diesem Vorgehen die Hauptträgheitsachsen (gestrichelt) stets in Richtung der beiden Radien, eine Aussage, die wir natürlich dann auch im symmetrischen Grenzfall b) beibehalten werden. Wenn wir andererseits den Fall c), also $\mu_1 \varrho^2 = \mu_2 r^2$, zunächst für beliebiges u , betrachten, so liegen die Hauptträgheitsachsen in Richtung der beiden Winkelhalbierenden, auch dann, wenn wir mit u gegen $\pi/2$ gehen.

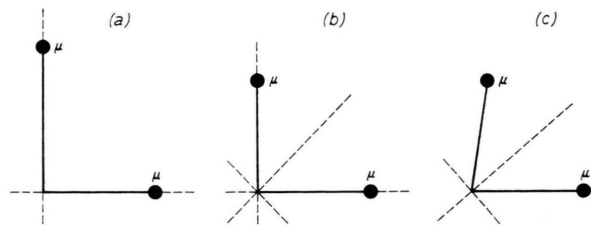


Abb. 2. Die Unbestimmtheit der Hauptträgheitsachsen im symmetrischen Grenzfall.

Man erkennt aus dem je nach dem Grenzübergang verschiedenen Ergebnis, daß es nicht möglich ist, die Lage der Hauptträgheitsachsen im symmetrischen Grenzfall als eindeutige und stetige Funktion der inneren Variablen zu definieren. Ihr Zusammenhang mit der inneren Konfiguration wird in diesem Fall unbestimmt. Andererseits besitzt das von uns betrachtete System jedoch auch im symmetrischen Fall eine durchaus wohldefinierte Struktur, auf die wir den Winkel χ eindeutig beziehen können. Die hier sich zeigende, grundsätzliche Schwierigkeit bei der Verwendung von Hauptträgheitsachsen ist natürlich auch bei Systemen mit mehr Teilchen in gleicher Weise vorhanden. Sie ist von ganz anderer Natur als diejenige, die bei gewissen Ausartungen der inneren Struktur bei allen Koordinaten – auch bei den unsrigen – geometrisch notwendig auftritt, nämlich dann, wenn das Gebilde zu einem Punkt oder zu einer Geraden entartet (ϱ und/oder $r = 0$; $u = 0$ oder π). Diese Unbestimmtheit ist deshalb ohne Bedeutung, weil für diese Fälle das zugehörige Phasenraumvolumenelement verschwindet.

10. Die ξ - ζ -Anteile der Rotationsenergie

Nach den Überlegungen von Abschn. 9 wird durch Angabe des Winkels χ ein Bezugssystem festgelegt, welches im allgemeinen nicht mit den Hauptträgheitsachsen der Punktkonfiguration in der ξ - ζ -Ebene zu-

sammenfällt. Der ξ - ζ -Anteil der Rotationsenergie enthält dementsprechend auch gemischte Produkte der betreffenden Drehimpulskomponenten. Gemäß unserem Verfahren haben wir zunächst die Koeffizienten dieser quadratischen Form über die innere Wellenfunktion zu mitteln. Dieser Mittelungsvorgang, der uns bei Betrachtung der η -Achse zunächst zu dem „Effekt nullter Ordnung“ führte, wirkt sich bei den beiden, jetzt zu betrachtenden Achsen in doppelter Weise aus. Zunächst müssen wir wieder feststellen, daß die Mittelung über die Elemente des reziproken Tensors erfolgt. Die entstehenden Mittelwerte sind also auch in diesem Falle verschieden von den Reziprokwerten der normalen Mittelwerte. Dies gilt sowohl für die Diagonal- wie auch für die Nichtdiagonalelemente. Es entstehen hierbei gewisse, von ϱ , r und u unabhängige, also konstante Koeffizienten. Es steht nichts im Wege, nunmehr durch eine zusätzliche, von den inneren Variablen unabhängige, konstante Verdrehung auf Hauptachsen überzugehen. Diese „effektiven“ Hauptachsen – und dies ist der zweite, charakteristische Effekt, der uns hier begegnet – sind nun aber durchaus verschieden von denen, die man erhält, wenn man den durch direkte Mittelung erhaltenen Trägheitstensor auf Hauptachsen bringt.

Ein Rückblick auf das Variationsproblem (19) und die Gestalt von H_2 in (15) zeigt, daß wir es bei der Lösung unseres Problems immer nur mit den partiellen Ableitungen der Größe χ zu tun haben. Insofern blieb die Größe χ bisher im Grunde immer bis auf eine additive Konstante unbestimmt. Unsere jetzige Überlegung ermöglicht es, diese Konstante so festzulegen, daß die χ -Richtung in die Richtung einer der beiden Hauptachsen unseres „effektiven“ Trägheitsmomentes übergeht.

Bei all diesen Überlegungen haben wir stillschweigend vorausgesetzt, daß die auftretenden Mittelwerte endlich bleiben. Ein Blick auf (21) zeigt uns nun, daß die zu mittelnden Ausdrücke alle mit dem Faktor $(\mu_1 \varrho^2 \mu_2 r^2 \sin^2 u)^{-1}$ behaftet sind. Vom Volumenelement der Integration her steht uns der Faktor $\varrho^2 r^2 \sin u$ zur Verfügung. Damit die Mittelwerte existieren, müssen wir voraussetzen, daß die Wellenfunktion in den Grenzpunkten $u = 0$ bzw. π sich wie eine positive Potenz von $\sin u$ verhält. Das bedeutet, daß der Fall, in dem unser System der drei Massen zu einer Geraden entartet, ausgeschlossen wird. Wäre dies nicht der Fall, so müßte das bei einer Rotation hinzutretende H_2 als unendlich große Störung be-

trachtet werden, welche die Wellenfunktion sofort in entsprechendem Sinne deformiert, was jedoch unseren Grundvoraussetzungen widerspricht.

Wir können den vorhergehenden Überlegungen noch eine weitere, grundsätzliche Erkenntnis entnehmen. Durch die Bestimmung des Winkels χ ist für unser Gebilde ein inneres Bezugssystem gefunden worden, welches für den Fall des rotationsfreien Zustandes die Rolle des „ruhenden“ Bezugssystems übernimmt. Dieses Bezugssystem muß, da in der Wellenfunktion keine äußeren Variablen vorkommen, notwendig von innen her definiert werden, wie es in unserem Falle geschieht. Man kann nun leicht einsehen, daß die Ergebnisse von Mittelungsprozessen, wie wir sie dauernd durchzuführen haben, wesentlich davon abhängen, welches Bezugssystem dabei als ruhend betrachtet wird. Wir überlegen dies an Hand der Abb. 3, in welcher die beiden Massenpunkte schematisch wieder das reduzierte Dreikörpersystem darstellen sollen. Wir wollen annehmen, daß die Wellenfunktion keine u -Abhängigkeit aufweist, und daß die beiden gezeichneten Radien einigermassen feste Beträge haben.

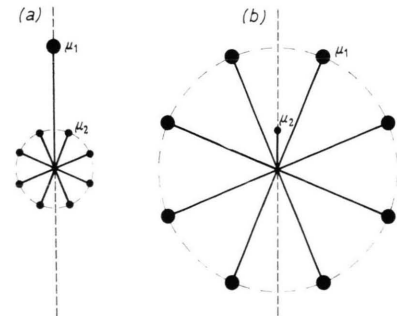


Abb. 3. Mittelung bei verschiedenen Bezugssystemen.

Führen wir die Mittelung so aus, daß wir neben der Flächennormale die Richtung 1 ($\chi = 0$) festhalten (Fall a), so ergibt sich bei der Mittelung ein Gebilde, welches in Richtung 1 stark verlängert erscheint. Halten wir andererseits die Richtung 2 als Bezugsrichtung fest ($\chi = u$), so ergibt sich (Fall b) ein Gebilde mit nur schwach ausgeprägter Vorzugsrichtung und eine nahezu ringförmige Massenverteilung. Da diese gemittelten Verteilungen in das effektive Trägheitsmoment des Gebildes eingehen, werden die bei einer Rotation des Gebildes auftretenden Energiestufen in beiden Fällen wesentlich verschieden sein. Man ersieht daraus nochmals die fundamentale Bedeutung des durch den Winkel χ definierten Bezugssystems.

11. Grundzüge der Störungsrechnung für Rotationszustände

Schon in früheren Abschnitten haben wir gelegentlich darauf hingewiesen, daß wir die Rotation eines Systems in gewissem Sinne als Störung eines nichtrotierenden Ausgangszustandes betrachten können. Dem entsprach die Forderung, daß die Abstände der Energiestufen der inneren Bewegung groß sein sollten gegenüber den durch die Rotation hinzukommenden Zusatzenergien. Mit den folgenden Überlegungen soll gezeigt werden, wie sich diese Vorstellung quantitativ begründen läßt. Dies läßt sich nach den Erfahrungen, die wir in den vorhergehenden Abschnitten gewinnen konnten, weitgehend so durchführen, daß die Aussagen auch für Systeme mit beliebig vielen Teilchen gültig bleiben.

Um die verschiedenen Ordnungen der Störungsrechnung deutlicher hervortreten zu lassen, schreiben wir den Hamilton-Operator hier in der Form

$$H = H_1^* + \lambda H_k^* + \lambda^2 H_2^*, \quad (33)$$

wobei wir bemerken müssen, daß der Störparameter λ anders als in der üblichen Störungsrechnung wegen der Quantelung des Drehimpulses eine Folge diskreter Werte durchläuft.

Zunächst führen wir „ungestörte“ Lösungsfunktionen Φ_v^0 ein, die zu dem Operator $H_1^*(p_1, q_1)$ gehören:

$$H_1^* \Phi_v^0 = E_v^0 \Phi_v^0. \quad (34)$$

Wenn wir diese zum Ansatzpunkt einer Störungsrechnung machen wollen, so müssen wir daran denken, daß die zu ermittelnden Wellenfunktionen Ψ von dem erweiterten Variablensystem der q_1 und q_2 abhängen. Wegen der Drehinvarianz des gesamten Hamilton-Operators hat der allgemeinste Ansatz für Ψ bei vorgegebenen Quantenzahlen l und m die Form

$$\Psi = \sum_{n=-l}^{+l} \Phi_n(q_1) D_{mn}^l(q_2), \quad (35)$$

wobei hinzugefügt werden muß, daß die Bedeutung einer solchen Wellenfunktion erst dann festgelegt ist, wenn gesagt wird, wie das innere Bezugssystem, zu welchem hin die Eulerschen Winkel q_2 gemessen werden, in die Konfiguration der q_1 hineindefiniert wird. Wenn wir die Funktionen $\Phi_n(q_1)$ nach den Funktionen $\Phi_v^0(q_1)$ entwickeln, wird

$$\Psi = \sum_{n=-l}^{+l} \left(\sum_v c_{nv} \Phi_v^0 \right) D_{mn}^l(q_2) = \sum_v \Phi_v^0 \left(\sum_n c_{nv} D_{mn}^l(q_2) \right). \quad (36)$$

Jedes Glied der Reihe über v hat die Eigenschaft, Lösung von (34) zu sein und gleichzeitig die volle Variablenesamtheit der q_1 und q_2 zu enthalten. Unsere Aufgabe besteht darin, die Koeffizienten c_{nv} zu bestimmen. Wir gehen dazu vor wie in der üblichen Schrödingerschen Störungstheorie, wobei wir den zu Ψ gehörigen Energiewert und das zugehörige Koeffizientensystem nach λ entwickeln:

$$E = E^0 + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots, \\ c_{nv} = c_{nv}^0 + \lambda c_{nv}^{(1)} + \lambda^2 c_{nv}^{(2)} + \dots \quad (37)$$

Wenn wir den vor Einschalten der Störung vorhandenen Ausgangszustand mit dem Index $v=0$ bezeichnen, können wir statt (36) auch schreiben

$$\Psi_0 = \Phi_0^0 \sum_n c_{n0}^0 D_{mn}^l + \lambda \sum_{v=1} \Phi_v^0 \sum_n c_{nv}^{(1)} D_{mn}^l \\ + \lambda^2 \sum_{v=0} \Phi_v^0 \sum_n c_{nv}^{(2)} D_{mn}^l + \dots \quad (38)$$

Im drehungsfreien Fall reduziert sich dieser Ausdruck auf das erste Glied, welches im Raum der q_1 eine einfache, nichtentartete Lösung darstellt. Beim Einschalten der Störung tritt der Variablenbereich der q_2 hinzu, und zwar — bei festgehaltenen l und m — in Form der $2l+1$ linear unabhängigen Funktionen D_{mn}^l . Im Raum der q_1, q_2 bedeutet das für das System der Ausgangsfunktionen eine $(2l+1)$ -fache Entartung. Da l gleichzeitig unser Störparameter ist, so bedeutet das, daß der Entartungsgrad des Ausgangssystems vom Störparameter abhängt. Die Entartung verschwindet, wenn der Störparameter den Wert Null annimmt.

Mit den Ansätzen (37) und (38) führt man nun das Schrödingersche Störungsverfahren durch: man setzt die betreffenden Ansätze in die Schrödinger-Gleichung ein und ordnet nach Potenzen des Störparameters. Dabei heben sich die auf beiden Seiten auftretenden Glieder nullter Ordnung unabhängig von der Wahl der Koeffizienten c_{n0}^0 gegenseitig weg. In erster Ordnung ergibt sich die Energiestörung $E^{(1)}$ als der Erwartungswert von H_k^* . Der Operator H_k^* ist seiner Definition entsprechend linear in den Drehimpulskomponenten. Beim Dreikörperproblem haben wir in (17) gezeigt, daß der Erwartungswert von H_k^* , gebildet über die innere Wellenfunktion, verschwindet. Aus den daran angeknüpften Überlegungen geht hervor, daß das gleiche auch für Systeme mit mehr Teilchen gelten wird. Das heißt also, daß allgemein die mit dem Eintreten der Rotation verbundene Zusatzenergie in erster Näherung verschwindet. In die Bestimmung der $c_{nv}^{(1)}$ gehen wie üblich die Matrixelemente von H_k^* zwischen dem

Ausgangszustand und der Gesamtheit der übrigen Zustände ein. Diese Matrixelemente verschwinden dann, wenn der Teil des Operators H_k^* , der auf die inneren Koordinaten wirkt, bei Anwendung auf Φ_0^0 den Wert Null liefert. Dies gelang im Falle des Dreikörperproblems durch Bestimmung eines geeigneten Winkels χ und läßt sich auch, wie im folgenden Abschnitt noch etwas näher dargelegt werden soll, für Systeme mit mehr Teilchen durch Bestimmung eines geeigneten körpergebundenen Bezugssystems erreichen. Das bedeutet, daß bei Wahl dieses Bezugssystems die Koeffizienten $c_{nv}^{(1)}$ sämtlich verschwinden, daß sich also an der „erweiterten“ Ausgangswellenfunktion

$$\Psi_0^0 = \Phi_0^0 \sum_n c_{n0}^0 D_{nn}^l \quad (39)$$

in dieser Näherung nichts ändert. An dieser Stelle erkennen wir auch die Berechtigung der immer wieder benützten Voraussetzung, daß wir die Gesamtwellenfunktion für unsere Zwecke in Produktform ansetzen können. Mit diesen Ergebnissen vereinfacht sich die Störungsrechnung 2. Ordnung, da diese sich nur aus den Beiträgen der Glieder ergibt, die schon in den Ansätzen (36) bis (38) den Faktor λ^2 enthalten. Sie nimmt also den Charakter einer Störungsrechnung 1. Ordnung mit dem Störparameter λ^2 an, wobei wir es mit einem Ausgangsfunktionensystem zu tun haben, welches $(2l+1)$ -fach entartet ist. Wir bekommen also die Störenergien 2. Ordnung gleichzeitig mit den Koeffizienten der Linearkombinationen nullter Ordnung aus einer Säkulardeterminante, deren Elemente die Matrixelemente von H_2^* mit den Wellenfunktionen nullter Ordnung sind.

Um die Bedeutung dieses Vorgehens klarer zu machen, zerlegen wir dasselbe gedanklich in zwei Schritte. Wir führen zunächst die Integration nur über die inneren Koordinaten, also über die – allen Ausgangsfunktionen gemeinsame – innere Wellenfunktion Φ_0^0 durch. Dann wird H_2^* eine quadratische Form der Drehimpulskomponenten mit *konstanten* Koeffizienten, nämlich den mit Φ_0^0 gemittelten Elementen des reziproken Trägheitstensors $\hat{\Theta}^{-1}$. Dieser Hamilton-Operator beschreibt aber nichts anderes als den allgemeinen, asymmetrischen Kreisel. Der 2. Schritt der Diagonalisierung dieses Operators führt zu den bekannten Eigenwerten des Kreiselproblems, die nunmehr als Störenergien 2. Ordnung zu der Energie des nichtrotierenden Ausgangszustandes hinzutreten. Selbstverständlich hindert uns nichts daran, in dem über Φ_0^0 gemittelten Hamilton-Ope-

rator H_2^* durch eine geeignete Drehung die gemischten Glieder in den Drehimpulskomponenten zu beseitigen und damit in dem System ein Achsenkreuz zu definieren, welches die effektiven Hauptträgheitsachsen des Systems darstellt.

12. Die rotatorischen Eigenschaften eines Vielteilchensystems

Bei unseren bisherigen Betrachtungen zum Dreikörperproblem war der entscheidende Schritt, daß dem Gebilde ein Bezugssystem eingeordnet werden konnte, welches einerseits der jeweiligen Punktkonfiguration eindeutig zugeordnet, welches andererseits aber in ganz bestimmter Weise auch auf die innere Wellenfunktion des Systems abgestimmt ist. Die Lage dieses Bezugssystems wurde hierbei festgelegt bezüglich eines Ausgangssystems, welches zunächst durch die 3 vorhandenen Massenpunkte in geometrisch einfacher Weise definiert wurde.

Auch für Systeme mit mehr Teilchen läßt sich die Hamilton-Form sowie die allgemeine Lösungstheorie in ganz analoger Form aufbauen⁵, wobei irgendwelche 3 zunächst herausgegriffene Massenpunkte zur Bestimmung eines Ausgangssystems dienen können. Einer expliziten Durchrechnung steht allerdings der viel höhere Komplikationsgrad solcher Systeme entgegen.

Es erscheint deshalb nützlich, die am Dreikörperproblem gewonnenen Ergebnisse daraufhin zu untersuchen, welche Besonderheiten das Dreikörperproblem einerseits aufweist, und wieweit andererseits die gewonnenen Aussagen und Ergebnisse auch für Systeme mit mehr Teilchen Gültigkeit behalten.

Eine Besonderheit des Dreikörperproblems besteht sicherlich darin, daß wir in der Flächennormale des Gebildes bereits eine Achse vor uns haben, die als eine der Achsen des zu ermittelnden Bezugssystems bestehen bleibt. Es bedurfte deshalb nur noch einer Drehung um diese Achse, um zu einer „spezifischen Entkopplung“ im Sinne von Abschn. 5 zu kommen.

In einem System mit mehr Teilchen gibt es i. allg. eine solche primär vorhandene Richtung nicht mehr. Hier hat man also von dem speziellen Ausgangssystem aus im allgemeinen eine echte räumliche Drehung durchzuführen, um zu dem gesuchten körpergebundenen Bezugssystem zu gelangen.

⁵ W. BÜTTNER u. H. RUDER, Z. Naturforsch. **24 a**, 1163 [1969].

Eine solche Drehung kann wiederum durch 3 noch zu bestimmende „innere“ Eulersche Winkel dargestellt werden, die ihrerseits als Funktionen der inneren Koordinaten anzusetzen sind. Die wellenmechanische Beschreibung des Systems erfolgt dann schließlich dadurch, daß die Lage dieses Bezugssystems durch 3 „äußere“ Eulersche Winkel in das raumfeste Koordinatensystem eingeordnet wird. Die gesuchten „inneren“ Eulerschen Winkel treten wiederum in der Wellenfunktion nicht auf. Sie erscheinen jedoch auch in einem Vielkörpersystem als Bestandteile der Hamilton-Form. Der Vorzug des Dreikörperproblems, daß die Kopplung zwischen innerer und äußerer Bewegung nur über eine einzige Koordinatenrichtung – unsere η -Achse – erfolgt, wird beim allgemeinen Problem natürlich verlorengehen. Die Hamilton-Form wird jetzt in allen 3 Koordinatenrichtungen Kopplungsglieder, d. h. Glieder aufweisen, die linear in den Drehimpulskomponenten sind. Als Ausdruck der Tatsache, daß die Energie von der Drehrichtung unabhängig ist, wird die Aussage bestehen bleiben, daß der Erwartungswert dieser Kopplungsglieder, gebildet über irgendeine Testwellenfunktion, verschwindet.

Betrachtet man in diesem Zusammenhang wiederum eine bis zu Gliedern der Ordnung L^2 exakte Lösungsfunktion des Problems, in welcher jedoch die äußeren Variablen zunächst auf ein beliebiges inneres Achsenkreuz bezogen sein mögen, so ist das „richtige“ innere Bezugssystem wieder dadurch ausgezeichnet, daß die darauf bezogene Lösungsfunktion die Gesamtenergie minimal macht. Da diese dann gleichzeitig der exakte Energiewert ist, so wird eine von dieser Wellenfunktion ausgehende Störungsrechnung mit dem entsprechenden Störglied H_k^* auch in der nächsten Näherung keine zusätzliche Störungsenergie liefern. Das bedeutet wieder, daß alle Matricelemente des Kopplungsgliedes, die mit einem Index auf diese Ausgangsfunktion bezogen sind, verschwinden, daß also auch hier die Beziehung besteht, die unserer Gl. (20), nämlich $H_k^* \Phi_0 = 0$ entspricht.

Die Extremaleigenschaft von $\langle H_2^* \rangle$ ist also auch hier gleichbedeutend mit dem Bestehen einer solchen Euler-Lagrange-Gleichung. Da wir jetzt aber jeden der 3 inneren Eulerschen Winkel unabhängig variieren können, wird die obige Gleichung zerfallen in 3 derartige Gleichungen zur Bestimmung der 3 Win-

kelfunktionen. Wiederum wird der Zusammenhang Extremalprinzip für $\langle H_2^* \rangle \longleftrightarrow$ Euler-Lagrange-Gleichungen

eine Beziehung zwischen den betreffenden Operatoren, unabhängig von der speziellen Testfunktion, darstellen. Es wird also auch jetzt eine spezielle Testfunktion bei Durchführung des Variationsverfahrens mit der Erreichung des Extremalwerts automatisch die Erfüllung der Euler-Lagrange-Gleichungen liefern, also das, was wir als „spezifische Entkopplung“ bezeichnet haben.

Der nächste Schritt ist die Bildung des Erwartungswertes $\langle H_2^* \rangle$ über die innere Wellenfunktion. Als wesentlichen Effekt, der auch bei Vielteilchensystemen bestehen bleibt, haben wir wieder den Effekt nullter Ordnung, also die Mittelung über Reziprokwerte. Der klassische Ausdruck für ein solches Element ist beispielsweise $(\sum \mu_i \sigma_i^2)^{-1}$, wo die σ_i die senkrechten Abstände der Massenpunkte von der betrachteten Drehachse bedeuten. Die Konvergenz der Erwartungswerte fordert auch hier, daß die Wellenfunktion durch ihre innere Struktur verhindert, daß sich alle Teilchen gleichzeitig auf ein und demselben Radiusvektor befinden. Im übrigen kann man sich durch eine Überlegung, die derjenigen in Abschn. 7 analog ist, davon überzeugen, daß dieser Effekt nullter Ordnung bei Vielteilchensystemen mit wachsender Teilchenzahl immer schwächer ins Gewicht fällt, solange die einzelnen Teilchen nicht besondere Korrelationen zeigen. Dafür treten aber zu diesen Erwartungswerten in steigendem Maße die Beiträge, die im Falle des Dreikörperproblems durch die Größe B gekennzeichnet sind, jetzt allerdings für alle 3 Koordinatenachsen.

Auch jetzt kann man nach Durchführung des Mittelungsprozesses die Größe $\langle H_2^* \rangle$ diagonalisieren und aus dem Ergebnis die effektiven Trägheitsmomente ablesen. Das zugehörige Trägheitsellipsoid wird sich wieder nach Größe und Orientierung seiner Hauptachsen von demjenigen unterscheiden, welches man durch Mittelbildung über die Elemente des „normalen“ Trägheitstensors erhält. Im übrigen werden bei unserem Vorgehen auch Gebilde, die einem symmetrischen Kreisel entsprechen, für die Symmetrieachse endliche Trägheitsmomente zeigen, solange die oben erwähnte Strukturforderung erfüllt ist.

Anhang I.

Das Entkopplungsverfahren für die translatorische Bewegung von n Massenpunkten, eindimensional

Das in den vorhergehenden Abschnitten dargestellte Entkopplungsverfahren läßt sich in ganz analoger Weise auch auf die translatorische Bewegung anwenden. Da sich die wesentlichen Gesichtspunkte unseres Vorgehens dabei in durchsichtigerer Form wiederfinden, geben wir im folgenden die wichtigsten gedanklichen Schritte für den Fall von n Massenpunkten wieder.

Wir betrachten n Massenpunkte m_1, m_2, \dots, m_n , die sich auf der x -Achse bewegen und die wir durch die Koordinaten x_1, x_2, \dots, x_n beschreiben. Es sollen nur innere Kräfte wirken. Die Hamilton-Form ist

$$H = \sum_i \frac{1}{2m_i} p_i^2 + V(\dots, x_j - x_k, \dots).$$

Als ersten Schritt führen wir ein mit dem System verbundenes Bezugssystem ein, welches wir an den Massenpunkt 1 anheften. Die Koordinate x_1 vermittelt dann den Zusammenhang zwischen dem raumfesten und dem körpergebundenen Bezugssystem, sie nimmt also den Charakter der äußeren Koordinate α an. In dem körpergebundenen System benötigen wir dann zur Festlegung der Konfiguration noch $n-1$ weitere „innere“ Koordinaten q_i ($i=2, \dots, n$), die wir in verschiedener Weise einführen können. Die folgenden Rechnungen werden am einfachsten, wenn wir setzen

$$q_i = x_i - \sum_{j=1}^{i-1} m_j x_j / \sum_{j=1}^{i-1} m_j.$$

Dieser Ansatz bedeutet, daß wir jeden Massenpunkt auf den Massenmittelpunkt aller vorhergehenden beziehen, und entspricht dem Übergang zum „reduzierten“ System.

Die Einführung dieser Variablen führt zu einer Hamilton-Form, die sich wieder in 3 Teile H_1 , H_k und H_2 zerlegen läßt. H_1 enthält nur innere Koordinaten und Impulse, H_k die gemischten Produkte der Form $p_{vi} \cdot p_\alpha$. H_2 besteht aus dem einzigen Glied $(1/2m_1) \cdot p_\alpha^2$. Würde man hier kurzerhand das Kopplungsglied H_k außer acht lassen, so müßte man der kollektiven Bewegung die effektive Masse m_1 zuschreiben. Das zeigt schon, daß es in diesem Stadium der Rechnung unsinnig wäre, H_k zu vernachlässigen.

Wenn wir die Bewegung sinnvoll in einen inneren und einen kollektiven Anteil zerlegen wollen, müssen wir dafür sorgen, daß die Wirkung von H_k auf den Bewegungsablauf so weit wie möglich ausgeschaltet wird. Wir wissen, wie wir dazu vorgehen müssen: wir führen ein neues, körpergebundenes Bezugssystem ein, welches gegenüber dem bisherigen um eine noch zu bestimmende Funktion $\chi(q_2, q_3, \dots, q_n)$ verschoben ist. Die inneren Koordinaten werden bei dieser Transformation beibehalten. Unsere Transformation hat also die Form

$$\alpha' = \alpha + \chi(q_2, \dots, q_n), \quad q_i' = q_i.$$

Mit Hilfe der zugehörigen Erzeugenden haben wir die dazu kanonisch konjugierten Impulse auszurechnen. Wir finden

$$p_\alpha = p'_\alpha, \quad p_{q_i} = p'_{q_i} + \frac{\partial \chi}{\partial q_i} \cdot p'_\alpha.$$

Man ersieht aus diesen Beziehungen, daß bei Einführung der rechten Seiten in die Hamilton-Form der Anteil H_1 in seiner Form ungeändert bleibt, daß er aber gewisse Teile nach H_k^* und nach H_k^* abgibt, wobei das letztere auch noch Anteile aus H_k übernimmt. Hierbei tritt zum ersten Mal ein Unterschied zwischen der klassischen und der quantenmechanischen Behandlung auf. Dieser beruht darauf, daß der Übergang $p'_{q_i} \rightarrow (\hbar/i) \partial/\partial q_i'$ grundsätzlich in linearen Ausdrücken vorzunehmen ist². In quadratischen Ausdrücken muß dann auf die Reihenfolge der Größen bzw. Operatoren geachtet werden.

Die Durchrechnung ergibt als Faktor von $p_\alpha'^2$ klassische wie quantenmechanisch den Ausdruck

$$\frac{1}{2} \left\{ \frac{n}{\sum_{i=1}^n m_i} + \sum_{i=2}^n \left(\frac{i-1}{\sum_{j=1}^{i-1} m_j} + \frac{1}{m_i} \right) \left(\frac{\partial \chi}{\partial q_i} - \frac{m_i}{\sum_{j=1}^i m_j} \right)^2 \right\}. \quad (a)$$

Dagegen erhalten wir an Stelle des klassischen Ausdrucks

$$p_{q_i}^2 = p_{q_i}'^2 + 2 \frac{\partial \chi}{\partial q_i} p_{q_i}' p'_\alpha + \left(\frac{\partial \chi}{\partial q_i} \right)^2 p_\alpha'^2$$

quantenmechanisch den Operator

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q_i'^2} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q_i'^2} - 2\hbar^2 \frac{\partial \chi}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial q_i'} \frac{\partial}{\partial \alpha'} - \hbar^2 \left(\frac{\partial \chi}{\partial q_i} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \alpha'^2} - \hbar^2 \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_i'^2} \frac{\partial}{\partial \alpha'}.$$

Das an letzter Stelle auftretende, in $\partial/\partial \alpha'$ lineare Glied nehmen wir ausdrücklich in H_k^* mit auf. Es entspricht dem Anteil H_a^* aus Abschn. 4.

Wenn wir im wellenmechanischen Fall wiederum den Erwartungswert von H_2^* für eine in inneren und äußeren Koordinaten separierte Wellenfunktion bilden, erkennen wir, daß die Forderung der „spezifischen Entkopplung“ $H_k^* \Phi_0 = 0$ wiederum identisch ist mit der Euler-Lagrange-Gleichung für das Extremalproblem $\delta \langle H_2^* \rangle = 0$ bei Variation von χ .

In dem vorliegenden Fall ist der zu variierende Anteil von H_2^* gemäß (a) eine Summe von Quadraten. Ein Extremum, sogar unabhängig von der inneren Wellenfunktion, liegt dann vor, wenn jedes der Summenglieder für sich verschwindet. Diese Forderung liefert ein System von partiellen Differentialgleichungen, welches sich — im Gegensatz zum rotatorischen Fall — widerspruchsfrei integrieren läßt. Wir erhalten sofort

$$\chi = \sum_{i=2}^n \left(m_i \varrho_i / \sum_{j=1}^i m_j \right).$$

Damit ist das gesuchte Bezugssystem endgültig festgelegt. Es ergibt sich für den neuen Bezugspunkt, wie nicht anders zu erwarten war,

$$\alpha' = \sum_{i=1}^n m_i x_i / \sum_{i=1}^n m_i,$$

also der Massenmittelpunkt unseres Systems.

In dem vorliegenden Fall sieht man überdies folgendes: für das hier ermittelte χ fallen einerseits im Kopplungsglied die gemischten Produkte $p'_\alpha p_{\beta i}$ weg, da ihre Faktoren verschwinden, andererseits fallen auch die quantenmechanischen Zusatzglieder weg, da χ eine lineare Funktion der Koordinaten ist. Die Gleichung $H_k^* \Phi_0 = 0$ wird also in diesem Fall dadurch erfüllt, daß H_k^* identisch verschwindet. Wir haben hier also vollständige Entkopplung — unabhängig von der Wellenfunktion — erzielt, und die Ergebnisse sind dementsprechend sofort auf den klassischen Fall übertragbar. Als effektive Masse der Kollektivbewegung ergibt sich

$$\sum_{i=1}^n m_i,$$

also die tatsächliche Gesamtmasse, wie wir es bei vollständiger Entkopplung nach Teil I zu erwarten haben. Wir stellen noch fest, daß jede andere Wahl des Bezugspunktes zu einer kleineren effektiven Masse der Kollektivbewegung führt.

Anhang II.

Das effektive Trägheitsmoment einer schwingenden Hantel nach der klassischen Mechanik

Wir betrachten 2 elastisch verbundene Massenpunkte mit einem Gleichgewichtsabstand ϱ_0 . Das zugehörige reduzierte System ist dann ein einzelner Massenpunkt, der elastisch mit einem Gleichgewichtsabstand ϱ_0 an ein Zentrum gebunden ist. Wir stellen uns die Frage, wie dieses System auf die Einwirkung eines Drehmomentes M reagiert. Dazu gehen wir aus von den Bewegungsgleichungen des Gebildes in der Form

$$\mu(\ddot{\varrho} - \varrho \dot{\varphi}^2) = -k(\varrho - \varrho_0); \quad \frac{d}{dt}(\mu \varrho^2 \dot{\varphi}) = M.$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir annehmen, daß das angelegte Drehmoment über die Dauer seiner Wirksamkeit hinweg zeitlich konstant ist. Aus der zweiten Gleichung folgt dann sofort

$$L = \mu \varrho^2 \dot{\varphi} = M \cdot t.$$

Das effektive Trägheitsmoment werden wir genau wie bei der quantenmechanischen Behandlung aus der Beziehung $E_{\text{rot}} = L^2/2 \Theta_{\text{eff}}$ entnehmen, wo E_{rot} die hinzutretende Rotationsenergie bedeutet. Da wir die Rotation als eine kleine Störung betrachten wollen, fragen wir insbesondere nach dem Grenzwert von Θ_{eff} , der sich aus dieser Beziehung für kleine $M \cdot t = L$ ergibt. Für die zusätzliche Rotationsenergie erhalten wir

$$E_{\text{rot}} = \int_0^t K ds = \int_0^t M d\varphi = M \int_0^t \dot{\varphi} dt' = M^2 \int_0^t (t'/\mu \varrho^2) dt'.$$

Es wird also

$$\frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} = \frac{2 E_{\text{rot}}}{L^2} = \frac{2}{t^2} \int_0^t \left(\frac{t'}{\mu \varrho^2} \right) dt'.$$

Wenn wir uns vorstellen, daß das Drehmoment nur während einer Zeit wirkt, die klein ist gegen die Schwingungsdauer der radialen Bewegung, so können wir in dem Integral für Θ_{eff} den Faktor $1/\mu \varrho^2$ über das Integrationsintervall hinweg als konstant ansehen und aus dem Integral herausziehen. Man erhält dann sofort $\Theta_{\text{eff}} = \mu \varrho^2$, wo für ϱ der im Zeitpunkt der Wirkung von M vorliegende Abstand einzusetzen ist. Wird der Versuch genügend oft wiederholt, so ergibt sich als statistischer Mittelwert des Trägheitsmomentes natürlich $\mu \varrho^2$, wobei es genügt, die Mittelbildung über eine einzige Periode der Schwingung zu erstrecken. Wir erhalten hier also ein

anderes Resultat als bei quantenmechanischer Betrachtung, bei welcher wir das effektive Trägheitsmoment durch Mittelung über $1/\varrho^2$ gewinnen mußten.

Es wäre jedoch verkehrt, in diesem Ergebnis einen grundsätzlichen Unterschied zwischen klassischer und quantenmechanischer Betrachtung zu sehen. Um das zu erkennen, haben wir nur zu bemerken, daß das quantenmechanische Vorgehen nicht demjenigen in der obigen Versuchsreihe entspricht. Quantenmechanisch hatten wir vorausgesetzt, daß die Energiestufen der inneren Bewegung große Abstände aufweisen gegenüber der durch die Rotation hinzutretenden Störenergie, so daß der innere Zustand durch die Rotation nicht wesentlich gestört wird. Eine solche Annahme entspricht auf der klassischen Seite einem Vorgehen, bei welchem der zunächst rotationsfreie Zustand durch eine adiabatische Einwirkung in Drehung versetzt wird. Das würde also bedeuten, daß wir ein sehr kleines, kon-

stantes Drehmoment über Zeiten hinweg wirken lassen, die groß sind gegen die radiale Schwingungsdauer des Systems, und zwar so, daß das Produkt $M \cdot t$ immer noch klein bleibt. In diesem Fall liefert die Integration für $1/\Theta_{\text{eff}}$, wie man sich leicht – etwa durch partielle Integration – überzeugt, nichts anderes als den Zeitmittelwert von $1/\mu \varrho^2$, wobei es auch hier genügt, den Zeitmittelwert über eine einzige Schwingungsdauer zu erstrecken.

Man erkennt also, daß bei entsprechender klassischer Behandlung das effektive Trägheitsmoment in analoger Weise zu gewinnen ist wie in der Quantenmechanik, wobei nur an Stelle des Erwartungswertes der zeitliche Mittelwert zu nehmen ist. Auch in diesem Fall wird natürlich Θ_{eff} stets kleiner als der Mittelwert $\overline{\mu \varrho^2}$. Die Überlegungen unseres Abschnitts 7 über das Verhältnis der beiden Größen lassen sich auf klassische Gebilde in ganz analoger Weise übertragen.

Direct Photodisintegration of ${}^9\text{Be}$ in the Low and Sub-Giant Resonance Energy Region

TERJE AURDAL

Institut für Theoretische Physik der Universität Tübingen

(Z. Naturforsch. **24 a**, 1188–1195 [1969] ; received 16 April 1969)

Photodisintegration cross sections for the reaction ${}^9\text{Be}(\gamma, n){}^8\text{Be}$ with photonenergies varied from threshold to about 17 MeV are calculated. As nuclear model is assumed a single particle shell model where the valence neutron outside the ${}^8\text{Be}$ core is feeling a spherical field. The core state is assumed to be a mixture of the ground (0^+) and the first excited (2^+) state of the ${}^8\text{Be}$ nucleus. The total cross sections are splitted up according to the different contributing reaction channels. The radial wave functions in initial as well as final states are of the Saxon-Woods type.

Photodisintegration of ${}^9\text{Be}$ has during the last years been object to detailed research both experimentally^{1–4} as well as theoretically^{5–8}. In the region from threshold up to about 6 MeV the experimental (γ, n) cross section curve shows three pronounced maxima. The first slightly over the thresh-

old energy, the second at about 3 MeV and the third at about 4.6 MeV. There is also a weak but observable maximum at 2.4 MeV. The neutron angular distribution from the threshold- and the 4.6 MeV-peak appear to be isotropic, while the 3 MeV excitation maximum gives anisotropic distribution.

Reprint request to T. Aurdal, Institut für Theoretische Physik der Universität Tübingen, D-7400 Tübingen, Gartenstraße 47.

¹ B. L. BERMAN, R. L. VAN HEMERT, and C. D. BOWMAN, Phys. Rev. **163**, 958 [1967].

² B. HAMERMESH and C. KIMBALL, Phys. Rev. **90**, 1063 [1953]. — W. JOHN and J. M. PROSSER, Phys. Rev. **127**, 231 [1962].

³ R. NATHANS and J. HALPERN, Phys. Rev. **92**, 940 [1953]. — R. D. EDGE, Nucl. Phys. **2**, 485 [1956/57]. — S. COSTA, L. PASQUALINI, G. PIRAGINO, and L. ROASIO, Nuovo Cimento **42 B**, 306 [1966].

⁴ M. J. JAKOBSON, Phys. Rev. **123**, 229 [1961].

⁵ E. GUTH and C. J. MULLIN, Phys. Rev. **74**, 833 [1948]; **76**, 234 [1949].

⁶ N. C. FRANCIS, D. T. GOLDMAN, and E. GUTH, Phys. Rev. **120**, 2175 [1960].

⁷ J. S. BLAIR, Phys. Rev. **123**, 2151 [1961].

⁸ S. BOFFI, J. SAWICKI, and E. SCACCIATELLI, Nuovo Cimento **52 B**, 210, 244 [1967].