

Anwendung der Eigenkanal-Theorie auf die Coulomb-Anregung von Atomkernen*

BERND GREINER

Institut für Theoretische Physik der Technischen Hochschule Darmstadt

(Z. Naturforsch. 25 a, 170—181 [1970]; eingegangen am 4. November 1969)

The eigenchannel method is applied to Coulomb excitation. The formalism is developed and the involved matrix elements are calculated analytically. Estimates for the density of internal states are given. This method should prove fruitful for the calculation of quantum mechanical corrections of the semi-classical treatment of Coulomb excitation.

1. Die Coulomb-Anregung

Wenn Kerne mit so geringer Energie E auf einen Target-Kern geschossen werden, daß sie den Coulomb-Wall nicht durchdringen können, wird man keine Wirkung der Kernkräfte erwarten. In diesem Fall wird nur die Coulomb-Wechselwirkung die Flugbahn des anfliegenden Atomkerns bestimmen. Klassisch ergibt sich daher die Hyperbelbahn der Rutherford-Streuung. Da sich der Target-Kern während des Ablenkprozesses in einem zeitlich veränderlichen Feld befindet, ist es möglich, daß er angeregt wird. Wir haben es dann mit einem inelastischen Streuprozeß zu tun. Diese Art der Anregung ist zur Untersuchung der energetisch niedrigen Zustände der Kerne geeignet¹⁻⁴.

Die Abb. 1 veranschaulicht den Ablauf des Streu-
prozesses bei der Coulomb-Anregung. Der Kern 1
mit Z_1 Protonen bewegt sich auf einer Hyperbelbahn

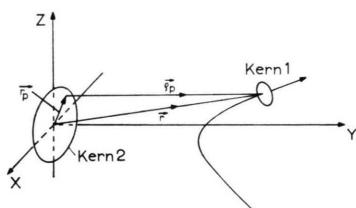


Abb. 1. Das gestreute Ion (Kern 1) beschreibt relativ zum Target-Kern (Kern 2) eine Hyperbelbahn.

$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$ in der x, y -Ebene an dem Target-Kern 2 mit Z_2 Protonen vorbei. Ein Proton am Ort \mathbf{r}_p spürt

$$H = H_{\text{Kern}_1}(r_1) + H_{\text{Kern}_2}(r_2) + \left(\frac{p^2}{2\mu} \right)_{\text{Relativ-} \atop \text{bewegung}} + \sum_{p_1=1}^{Z_1} \sum_{p_2=1}^{Z_2} \frac{e^2}{r_{p_1 p_2}}. \quad (2)$$

Sonderdruckanforderungen an Dipl.-Phys. B. GREINER, Institut für Theoretische Physik der Technischen Hochschule D-6100 Darmstadt, Hochschulstraße.

* Gekürzte Darmstädter Dissertation (D 17).

¹ G. BREIT, R. L. GLUCKSTERN u. J. E. RUSSEL, Phys. Rev. **105**, 1121 [1957]; **103**, 319 [1956].

dabei ein zeitlich veränderliches elektrisches Feld, das von $q_p = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_p|$ abhängt, falls wir den Kern 1 als punktförmig annehmen können. Findet eine Anregung des Kerns 2 statt, so muß kinetische Energie des Kerns 1 an Kern 2 abgegeben und die Flugbahn des Kerns 1 verändert werden. Dieser Umstand ist für die anzuwendende Rechenmethode von Bedeutung.

Ist die Bahnänderung unerheblich, d. h. ist die Anregungs-Energie des Kerns 2 sehr klein gegen die Einschuß-Energie des Kerns 1, so kann der Weg des stoßenden Kerns in ausreichender Näherung als klassische Hyperbelbahn beschrieben werden. Eine solche Beschreibung wird als halbklassische Behandlungsweise bezeichnet. Der Wirkungsquerschnitt für die Coulomb-Anregung läßt sich dann schreiben

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Anregung}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Rutherford}} \cdot P, \quad (1)$$

wobei P die Wahrscheinlichkeit ist, mit der ein in das Raumwinkel-Element $d\Omega$ abgelenktes Teilchen den Kern anregt. Um P in seiner Abhangigkeit vom Streuwinkel und vom Anregungszustand zu finden, betrachten wir den Hamilton-Operator des aus Kern 1 und Kern 2 bestehenden Systems. Der Beitrag der Kernkrafte zur Wechselwirkung wird nicht berucksichtigt, da der stoende Kern wegen des groen Coulomb-Walls nicht in die Reichweite der Kernkrafte gelangt. Wenn auch die inneren Freiheitsgrade des stoenden Kerns berucksichtigt werden, erhalt man

² L. C. BIEDENHARN u. P. I. BRUSSARD, Coulomb-Excitation, Clarendon Press, Oxford 1965.

³ J. DE BOER, R. G. STOCKSTAD, G. D. SYMONS u. A. WINTHER, Phys. Rev. Letters **14**, 564 [1965].

⁴ K. ALDER et al., Rev. Mod. Phys. **28**, 432 [1956].

Dabei bedeutet μ die reduzierte Masse, p den zur Relativ-Koordinate gehörigen Impuls;

$$\frac{1}{r_{p_1 p_2}} = \sum_{\lambda_1=0}^{\infty} \sum_{\lambda_2=0}^{\infty} \frac{(-)^{\lambda_2} r_{p_1}^{\lambda_1} r_{p_2}^{\lambda_2}}{r^{\lambda_1 + \lambda_2 + 1}} \sum_{\mu_1=-\lambda_1}^{\lambda_1} \sum_{\mu_2=-\lambda_2}^{\lambda_2} B_{\lambda_1 \lambda_2}^{\mu_1 \mu_2} Y_{\lambda_1 + \lambda_2, -\mu_1 - \mu_2}(\vartheta, \varphi) Y_{\lambda_1, \mu_1}(\vartheta_{p_1}, \varphi_{p_1}) Y_{\lambda_2, \mu_2}(\vartheta_{p_2}, \varphi_{p_2}) \quad (3)$$

$$\text{mit } B_{\lambda_1 \lambda_2}^{\mu_1 \mu_2} = \frac{(-)^{\mu_1 + \mu_2} (4\pi)^{3/2}}{\{(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)(2\lambda_1 + 2\lambda_2 + 1)\}^{1/2}} \left\{ \frac{(\lambda_1 + \lambda_2 + \mu_1 + \mu_2)! (\lambda_1 + \lambda_2 - \mu_1 - \mu_2)!}{(\lambda_1 + \mu_1)! (\lambda_1 - \mu_2)! (\lambda_2 + \mu_2)! (\lambda_2 - \mu_1)!} \right\}^{1/2} \quad (4)$$

ist der reziproke Abstand des Protons p_1 im Kern 1 zum Proton p_2 im Kern 2. Abbildung 2 zeigt die Geometrie, die der Entwicklung von $1/r_{p_1 p_2}$ zugrunde liegt⁵.

Da wir uns nur für die größten Anregungswahrscheinlichkeiten interessieren, berücksichtigen wir lediglich die Terme $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 0$, sowie $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 1$ bis ∞ und $\lambda_2 = 0, \lambda_1 = 1$ bis ∞ . Wir erhalten damit den Hamilton-Operator

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (5)$$

wobei

$$H_0 = H_{\text{Kern}_1}(r_1) + H_{\text{Kern}_2}(r_2) + (p^2/2\mu)_{\text{Relativ-}} + Z_1 Z_2 e^2/r_{\text{bewegung}} \quad (6)$$

und

$$H_{\text{int}} = 4\pi e^2 \sum_{\lambda_1=1}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \frac{(-)^{\mu} Y_{\lambda, -\mu}(\vartheta, \varphi)}{r^{\lambda+1}(2\lambda+1)} \left\{ \sum_{p_1=1}^{Z_1} Z_2 r_{p_2}^{\lambda} Y_{\lambda, \mu}(\vartheta_{p_1}, \varphi_{p_1}) + (-)^{\lambda} \sum_{p_2=1}^{Z_2} Z_1 r_{p_1}^{\lambda} Y_{\lambda, \mu}(\vartheta_{p_2}, \varphi_{p_2}) \right\}. \quad (7)$$

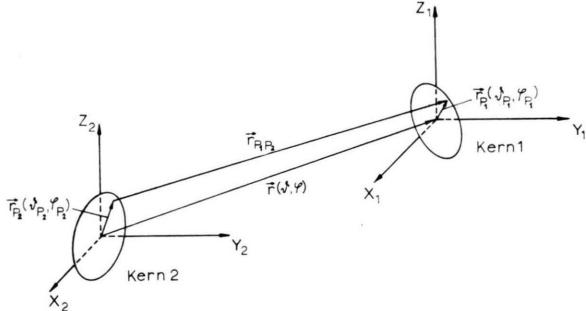


Abb. 2. Der Vektor $\mathbf{r}(\vartheta, \varphi)$ verbindet den Koordinaten-Ursprung des Systems 1 mit dem System 2, während $\mathbf{r}_{p_1 p_2}$ den Abstand eines Protons am Ort \mathbf{r}_{p_1} von einem solchen am Ort \mathbf{r}_{p_2} darstellt.

Für den Fall der uns am meisten interessierenden Quadrupol-Anregung ($\lambda = 2$) wollen wir die vernachlässigten Terme abschätzen. Wenn $Y_{4, \mu} = 1$ und $\sqrt{16\pi/5} \sum_{p_1=1}^{Z_1} r_{p_1}^2 Y_{2, \mu}(\vartheta_{p_1}, \varphi_{p_1})$ gleich dem Kern-Quadrupolmoment gesetzt wird, dann erhält man für das Verhältnis der beiden Wechselwirkungen $V^{\lambda_1=2, \lambda_2=2}$ und $V^{\lambda_1=0, \lambda_2=2}$

$$\frac{V^{\lambda_1=2, \lambda_2=2}_{\text{vernachlässigt}}}{V^{\lambda_1=0, \lambda_2=2}_{\text{berücksichtigt}}} \approx 2,6 \cdot \frac{Q_1}{r^2 Z_1}. \quad (8)$$

Für die Streuung zweier Urankerne mit dem Quadrupolmoment $Q = 10$ barn und dem Kernradius $R_0 = 8$ fm aneinander ergibt sich zum Beispiel für $r = 10 \cdot R_0 = 80$ fm

$$\frac{V^{\lambda_1=2, \lambda_2=2}_{\text{vernachlässigt}}}{V^{\lambda_1=0, \lambda_2=2}_{\text{berücksichtigt}}} \approx 4,43 \cdot 10^{-3}. \quad (9)$$

⁵ B. C. CARLSON u. G. S. RUSHBROOK, Proc. Cambridge Phil. Soc. **46**, 626 [1950].

Demnach haben wir die Wechselwirkungs-Anteile $\lambda_1 > 0, \lambda_2 = 1$ bis ∞ und $\lambda_2 > 0, \lambda_1 = 1$ bis ∞ zu Recht vernachlässigt. Für höhere Multipole ist das nicht ganz konsistent, weil zum Beispiel die Terme $\lambda_1 = \lambda_2 = 2$ von derselben Größenordnung wie $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 4$ sind, aber gegenüber diesen nicht berücksichtigt werden. Die Berücksichtigung dieser Glieder macht keine Schwierigkeiten, jedoch ist der mathematische Formalismus dann undurchsichtiger.

Mit der Abkürzung

$$M_1(E \lambda, \mu) = \sum_{p_1=1}^{Z_1} r_{p_1}^{\lambda} Y_{\lambda, \mu}(\vartheta_{p_1}, \varphi_{p_1}) \quad (10)$$

ergibt sich

$$H_{\text{int}} = 4\pi e^2 \sum_{\lambda=1}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \frac{(-)^{\mu}}{(2\lambda+1)} \frac{Y_{\lambda, -\mu}(\vartheta, \varphi)}{r^{\lambda+1}} \cdot \{Z_2 M_1(E \lambda, \mu) + (-)^{\lambda} Z_1 M_2(E \lambda, \mu)\}. \quad (11)$$

Der Anteil H_0 [Gl. (6)] des gesamten Hamilton-Operators H führt im Falle der halbklassischen Behandlung zu dem Rutherford-Streuquerschnitt. Der Operator H_{int} berücksichtigt die Struktur der beiden aneinander streuenden Atomkerne. Wenn diese Wechselwirkung klein ist, kann man sie als zeitabhängige Störung betrachten, die den Übergang der Kerne in angeregte Zustände bewirkt.

Aus der Theorie der zeitabhängigen Störungsrechnung erhält man für die Übergangs-Amplitude in erster Ordnung der Störungsrechnung

$$b_{if} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle f | H_{\text{int}} | i \rangle \exp\{i\omega_{if} t\} dt. \quad (12)$$

Dabei sind die Anfangs- und Endzustände $|i\rangle$ und $|f\rangle$ der beiden Atomkerne charakterisiert durch die entsprechenden Drehimpulse und ihre Einstellungen I, M .

Bei unpolarisiertem Einfallsstrahl und unpolarisierten Target-Kernen ist über die Spin-Einstellungen der Anfangszustände zu mitteln und über die der Endzustände zu summieren. Man erhält damit für den differentiellen Wirkungsquerschnitt in erster Ordnung der Störungsrechnung bei der halbklassischen Behandlung der Coulomb-Streuung

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Rutherford}} \cdot \frac{1}{(2I_{1i}+1)(2I_{2i}+1)} \sum_{M_{1i}, M_{2i}, M_{1f}, M_{2f}} |b_{if}|^2. \quad (13)$$

Wenn ein Ion auf einen Target-Atomkern geschossen wird und die Einschuss-Energie von der Größenordnung der Anregungs-Energien der Kerne ist, so wird im Falle einer Anregung die Flugbahn des Ions merklich verändert. Die halbklassische Näherung ist dann nicht mehr anwendbar, weil die Flugbahn des Ions nicht durch eine Hyperbelbahn ersetzt werden kann; sie muß mittels Coulomb-Wellenfunktionen beschrieben werden^{6,7}. Anfangs- und Endzustände sind jetzt auch für die Bahnbewegung verschieden.

Die Coulomb-Wellenfunktionen

$$u(r, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos \vartheta)$$

sind Lösungen der aus dem Hamilton-Operator H_0 resultierenden Schrödinger-Gleichung. Für den Radial-Anteil $R_l(r)$ gilt die Gleichung

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_l}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{2\eta k}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l = 0. \quad (14)$$

Dabei ist k die Wellenzahl und

$$\eta = (Z_1 Z_2 e^2) / (\hbar v) \quad (15)$$

der sogen. Coulomb-Parameter, der der Relativgeschwindigkeit v der Atomkerne umgekehrt proportional ist.

Die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit erfolgt mittels zeitunabhängiger Störungsrechnung (gewöhnlich in erster Ordnung). Werden die Kerne von den Anfangszuständen mit den Spin I_{1i}, I_{2i} in Endzustände mit I_{1f}, I_{2f} angeregt und sind die Kerne des einfallenden Strahls sowie des Targets nicht polarisiert, so erhalten wir den differentiellen Wirkungsquerschnitt, indem wir über die Anfangszustände mitteln und über die Endzustände summieren:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{(2\pi\hbar^2)^2} \frac{v_f}{v_i} \frac{1}{(2I_{1i}+1)(2I_{2i}+1)} \sum_{M_{1i}, M_{2i}, M_{1f}, M_{2f}} |\langle f | H_{\text{int}} | i \rangle|^2. \quad (16)$$

Die dazu gehörenden Wellenfunktionen lauten:

$$\begin{aligned} |i\rangle &= \sum_{l,m} 4\pi (-)^m i^l \frac{\exp\{i\delta_l(\eta_i)\}}{k_i r} Y_{l,-m}(\vartheta_{ki}, \varphi_{ki}) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) F_l(k_i r) |I_{1i} M_{1i}\rangle |I_{2i} M_{2i}\rangle, \\ |f\rangle &= \sum_{l,m} 4\pi (-)^m i^l \frac{\exp\{-i\delta_l(\eta_f)\}}{k_f r} Y_{l,-m}(\vartheta_{kf}, \varphi_{kf}) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) F_l(k_f r) |I_{1f} M_{1f}\rangle |I_{2f} M_{2f}\rangle, \end{aligned} \quad (17)$$

wobei

$$F_l(k r) = e^{-\pi\eta/2} \frac{|\Gamma(l+1+i\eta)|}{2\Gamma(2l+2)} (2k r)^{l+1} e^{ikr} {}_1F_1(l+1-i\eta, 2l+2; 2ikr) \quad (18)$$

und die Streuphase der Partialwelle mit dem Drehimpuls l

$$\delta_l = \arccos \Gamma(l+1+i\eta) \quad (19)$$

ist.

Den beiden dargestellten Verfahren zur Behandlung der Coulomb-Anregung liegt die zeitabhängige bzw. die zeitunabhängige Störungsrechnung zugrunde. Mit zunehmender Einschuss-Energie wird die Wechselwirkung H_{int} immer größer und kann

nicht mehr mit ausreichender Genauigkeit störungstheoretisch behandelt werden.

Wir suchen deshalb ein Verfahren, das die Diagonalisierung der Wechselwirkung H_{int} erlaubt und möglichst für einen großen Bereich des Coulomb-Parameters η anwendbar ist.

Hier bietet sich die Eigenkanal-Theorie an, deren Anwendbarkeit auf dieses Problem in den nächsten Abschnitten untersucht werden soll.

⁶ L. I. SCHIFF, Quantum Mechanics, McGraw-Hill Book Co., New York 1955.

⁷ M. A. PRESTON, Physics of the Nucleus, Addison-Wesley Publishing Co., London 1962.

2. Die Eigenkanal-Theorie

Die Eigenkanal-Theorie ist zur Behandlung von Kernreaktionen von DANOS und W. GREINER entwickelt worden⁸. Ausgebaut und vervollständigt wurde sie von WAHSWEILER, W. GREINER und Mitarbeitern⁹. In Arbeiten von TOEPFFER und W. GREINER wurde sie zur Behandlung der Elektronenstreuung benutzt¹⁰.

Bei Streuproblemen wird das asymptotische Verhalten der Eigenfunktionen des Gesamt-Hamilton-Operators gesucht. Wenn wir zum Beispiel die Coulomb-Streuung betrachten und annehmen, daß beide Atomkerne, der Kern des anfliegenden Projektils (Kern 1) und der Targetkern (Kern 2) angeregt werden können, erhalten wir

$$H = H_0 + H_{\text{int}},$$

wobei H_0 und H_{int} durch die Gln. (6) und (7) gegeben sind. Die allgemeinste Lösung, die Streufunktion, hat asymptotisch die Form

$$\psi = \sum_c (A_c I_c + B_c O_c) \varphi_c. \quad (20)$$

Die Amplituden der einlaufenden Wellen $I_c(r)$ und der auslaufenden Wellen $O_c(r)$ denken wir uns so gewählt, daß die einzelnen Summanden in (20) mit der asymptotischen Entwicklung der Eigenfunktionen von H_0 übereinstimmen, also

$$I_c = O_c^* = \exp \left\{ -i \left(k_c r - \frac{l \pi}{2} - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v_c} \ln 2 k_c r \right) \right\}. \quad (21)$$

Die Funktionen φ_c werden als Kanal-Wellenfunktionen bezeichnet. Sie setzen sich aus den Kern-Wellenfunktionen der beiden Atomkerne und dem Winkel-Anteil der Wellenfunktionen der Relativ-Bewegung zusammen. Ein *physikalischer Kanal* c ist charakterisiert durch die Quantenzustände der beiden Kerne 1 und 2, sowie durch Energie und Drehimpuls der Bahn-Wellenfunktion.

Die kanalkoppelnde Wechselwirkung H_{int} würde dafür sorgen, daß als Folge einer einlaufenden Welle in einem bestimmten physikalischen Kanal unter Umständen auslaufende Wellen in allen physikalischen Kanälen auftreten. Die Zahl der physikalischen Kanäle ist unendlich groß. In der Praxis wird

⁸ M. DANOS u. W. GREINER, Phys. Rev. **146**, 708 [1966].

⁹ H. G. WAHSWEILER, W. GREINER u. M. DANOS, Phys. Rev. **170**, 893 [1968]. — L. C. BIEDENHARN, M. DANOS, P. P. DELSANTO, W. GREINER u. H. G. WAHSWEILER, The Eigen-channel Method and Related Theories of Nuclear Reaction, Rev. Mod. Phys., im Druck.

sie jedoch auf eine numerisch zu bewältigende Anzahl begrenzt, indem die Entwicklung nach Drehimpulsen abgebrochen wird und nur Kernniveaus mit wesentlicher Anregungswahrscheinlichkeit berücksichtigt werden. Es gibt offene und geschlossene Kanäle. Geschlossene Kanäle entsprechen gebundenen Zuständen der Relativbewegung. Offene Kanäle dagegen beschreiben Kontinuums-Zustände. Da es im Fall der Coulomb-Anregung keine gebundenen Zustände des Gesamtsystems gibt (selbst quasi-molekulare Strukturen¹¹, die durch Kernkräfte bedingt werden, bedeuten keine im strengen Sinn geschlossenen Kanäle), haben wir es hier lediglich mit offenen Kanälen zu tun.

3. Diagonalisierung der S-Matrix

Wir betrachten in Gl. (20) asymptotische Lösungen, in deren Gültigkeitsbereich die Multipol-Wechselwirkung zwischen Projektilkern 1 und Targetkern 2 vernachlässigbar ist. Die Wechselwirkung kommt in der S-Matrix zum Ausdruck, die die Amplituden A_c der einlaufenden Wellen in die der auslaufenden Wellen transformiert:

$$B_c = - \sum_{c'} S_{cc'} A_{c'}. \quad (22)$$

Die S-Matrix-Elemente $S_{cc'}$ verknüpfen also die offenen physikalischen Kanäle c und c' . Die Größe der S-Matrix ist durch die Zahl der offenen physikalischen Kanäle bestimmt. Bei vorgegebener Gesamt-Energie, gegebenem Gesamt-Drehimpuls und gegebener Parität ist die Zahl der Kanäle immer endlich. Die S-Matrix ist unitär, das heißt, es gilt

$$S S^+ = 1 \quad \text{oder} \quad \sum_b S_{ab}^+ S_{ba} = \sum_b |S_{ba}|^2 = 1. \quad (23)$$

Die Unitaritätsbedingung für die S-Matrix ist der Aussage äquivalent, daß die Summe aller Übergangs-Wahrscheinlichkeiten gleich 1 ist.

Wir wollen nun die S-Matrix durch die Forderung $B_c = \text{const. } A_c$ auf die diagonale Form bringen. Unterscheiden wir die Diagonal-Elemente durch den hochgestellten Index v und schreiben wir die zugehörigen Kanal-Amplituden als $A_c = V_c^v$ und die Eigenwert-Konstanten $\text{const.} = -\varepsilon^v$, dann gilt

$$\sum_{c'} S_{cc'} V_{c'}^v = \varepsilon^v V_c^v. \quad (24)$$

¹⁰ C. TOEPFFER u. W. GREINER, Ann. Phys. New York **47**, 285 [1968].

¹¹ W. SCHEID u. W. GREINER, Z. Phys. **226**, 364 [1969].

Die Spalten-Vektoren

$$V^\nu = \begin{pmatrix} V_1^\nu \\ V_2^\nu \\ \vdots \\ V_n^\nu \end{pmatrix} \quad (25)$$

sind die Eigenvektoren, die dazugehörigen Kanal-Kombinationen sind die *Eigenkanäle* der *S*-Matrix. Da für eine gegebene Energie die Zahl n der Zeilen und Spalten der *S*-Matrix gleich der Zahl der offenen Kanäle ist, erhält man so viele Eigenkanäle wie offene Kanäle. In der diagonalen Darstellung der *S*-Matrix erhalten wir mit Gl. (23)

$$S S^+ = \begin{pmatrix} |\varepsilon^1|^2 & 0 & \cdots \\ 0 & |\varepsilon^2|^2 & \cdot \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = 1. \quad (26)$$

Weil wegen der Unitarität $|\varepsilon^\nu| = 1$ ist, muß ε^ν die Form

$$\varepsilon^\nu = \exp\{2i\delta^\nu\} \quad (27)$$

haben. Die Phase δ^ν wird als *Eigenphase* der *S*-Matrix bezeichnet.

4. Die Eigenkanal-Wellenfunktion

Nun wollen wir die Bedeutung der Eigenkanäle und der dazugehörigen Wellenfunktionen erläutern. Die Diagonalisierung von *S* scheitert zunächst an der fehlenden Kenntnis der zu *H* gehörigen $S_{cc'}$. Wir wissen vorerst nur, daß $S_{cc'}$ für H_0 diagonal mit den Streuphasen als Eigenphasen ist, daß also die physikalischen Kanäle Eigenkanäle sind.

Wir machen nun folgendes Gedanken-Experiment: Es seien die Amplituden A_c der einlaufenden Wellen gleich den Komponenten V_c^ν des ν -ten Eigenkanals (25), das heißt, $A_c = V_c^\nu$. Dann ergibt sich für (20) mit Hilfe von (22), (23) und (27) asymptotisch

$$\psi^\nu = \sum_c V_c^\nu (I_c - \exp\{2i\delta^\nu\} O_c) \varphi_c. \quad (28)$$

Dies ist die asymptotische Form der Schrödingerwelle des ν -ten Eigenkanals (Eigenkanal in der r -Darstellung) und wird daher als Eigenkanal-Wellenfunktion bezeichnet. Mit (21) und (28) folgt

$$\begin{aligned} \psi^\nu &= \sum_c \psi_c^\nu = \sum_c -2i V_c^\nu \exp\{i\delta^\nu\} \varphi_c \\ &\quad \cdot \sin\left(k_c r - \frac{l\pi}{2} - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v_c} \ln 2 k_c r + \delta^\nu\right). \end{aligned} \quad (29)$$

Wir sehen, daß die Eigenkanal-Wellenfunktion eine Überlagerung von stehenden Wellen in allen physi-

kalischen Kanälen mit der *gemeinsamen Phasenverschiebung* δ^ν gegenüber der ungestreuten Welle ist. Dieses Resultat ist der Ausgangspunkt für die Berechnung der Eigenphasen und Eigenkanäle. Wir suchen nämlich solche Eigenfunktionen des Gesamt-Hamilton-Operators (5), welche die asymptotische Form (29) haben. Die gemeinsamen Phasen δ^ν , für die solche Lösungen existieren, sind die Eigenphasen. Die dazugehörigen Amplituden der einzelnen physikalischen Kanäle in (29) sind die Eigenkanal-Komponenten V_c^ν .

5. Entwicklung der Eigenkanal-Wellenfunktionen nach abzählbaren Funktionen

Die ungestörten Wellenfunktionen U_{nc} von H_0 , nach denen wir die Eigenkanal-Wellenfunktionen von *H* entwickeln wollen, sind in der Energie kontinuierlich. Um sie abzählbar zu machen, denken wir uns den Raum durch ein Kugel mit $r=a$ unterteilt. Wir wählen einerseits a so groß, daß wir für den Außenraum $r>a$ die Störung durch H_{int} vernachlässigen dürfen. Andererseits darf a nicht zu groß sein, da sonst die Energie-Zustände im Innenraum sehr dicht liegen und deshalb sehr viele Eigenfunktionen U_{nc} berücksichtigt werden müssen.

Würden wir als Randbedingung bei $r=a$ zum Beispiel verlangen $U_{nc}=0$, dann wäre das Funktionensystem der U_{nc} zwar vollständig, aber bei der Entwicklung einer Funktion mit einer bei $r=a$ beliebigen Randbedingung könnten Gibbsche Konvergenzschwierigkeiten auftreten. Um diese zu vermeiden, verlangen wir als Randbedingung für jeden Kanal c , daß die logarithmischen Ableitungen der U_{nc} bei $r=a$ mit der von ψ_c aus Gl. (29) übereinstimmt. Die k_c in (29) werden aus der vorgegebenen Einschluß-Energie berechnet. Da für verschiedene c die Orthogonalität der Funktionen U_{nc} durch die Kanal-Wellenfunktionen φ_c gewährleistet ist, ist das so gewonnene Funktionen-System für $r< a$ orthogonal und vollständig.

Wir suchen Lösungen, die für $r< a$ den Gesamt-Hamilton-Operator (5) diagonal machen. Deshalb muß *H* mit den U_{nc} diagonalisiert werden. Da der Gesamt-Drehimpuls *J* und die Parität des Systems erhalten bleiben, benötigen wir zur Diagonalisierung lediglich U_{nc} mit bestimmter Parität und bestimmtem Gesamt-Drehimpuls *J*.

Das Ergebnis der Diagonalisierung ist ein Satz von Energie-Eigenwerten \hat{E}^ν . Stimmt einer dieser

Eigenwerte \hat{E}^v mit der vorgegebenen Einschuss-Energie E überein, so ist die in (29) auftretende und zunächst willkürlich angenommene Phase δ^v eine Eigenphase des Systems. Variiert man δ von Null bis π , so tritt die Übereinstimmung zwischen \hat{E}^v und E gerade so oft ein, wie offene physikalische Kanäle vorhanden sind. Die bei der Diagonalisierung anfallenden Eigenfunktionen

$$\psi^v = \sum_{nc} A_{nc} U_{nc} \quad (30)$$

bestimmen aus der Forderung des stetigen Anschlusses die Eigenvektoren V^v der S -Matrix aus der Gleichung

$$\begin{aligned} -2 V_c^v i \exp\{i \delta^v\} \varphi_c \sin \\ \cdot \left(k_c a - \frac{l \pi}{2} - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} \ln 2 k_c a + \delta^v \right) \quad (31) \\ = \sum_n A_{nc} U_{nc}(a). \end{aligned}$$

Eine größere Zahl von verfügbaren Konstanten ist nicht erforderlich, da die logarithmische Ableitung auf beiden Seiten der Anschlußstelle schon übereinstimmt.

Wenn die Eigenphasen δ^v und die Eigenvektoren V^v ermittelt sind, erhalten wir aus (24) und (27) durch Inversion die gesamte S -Matrix für eine bestimmte Gesamt-Energie bei vorgegebenem Drehimpuls und vorgegebener Parität:

$$S_{cc'} = \sum_v V_c^v \exp\{2 i \delta^v\} V_{c'}^v. \quad (32)$$

Mit der S -Matrix kann der Wirkungsquerschnitt bestimmt werden. Dazu bringen wir die Streufunktion ψ aus (20) im asymptotischen Bereich auf die Form einer einlaufenden ebenen Welle plus einer auslaufenden Kugelwelle. Damit lassen sich die Koeffizienten A_c bestimmen, denn mit (20) und (22) folgt

$$\psi = \sum_c A_c [(I_c - O_c) \varphi_c - \sum_{c'} (S_{cc'} - \delta_{cc'}) O_{c'} \varphi_{c'}]. \quad (33)$$

Der Wirkungsquerschnitt ist wie bei der elastischen Streuung durch die Streu-Amplitude der auslaufenden Kugelwelle gegeben

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{cc'} = |A_c (S_{cc'} - \delta_{cc'}) Y_{l'm'}|^2. \quad (34)$$

6. Anwendung der Eigenkanal-Theorie auf die Coulomb-Anregung

Für die Streufunktion im Bereich $r > a$, also im Außenbereich, erhalten wir ausführlich geschrieben

$$\begin{aligned} \psi = \sum_{l, \alpha_1, \alpha_2, S, \mu} & \left\{ \frac{\sqrt{2l+1} i^l \pi}{k_{\alpha_1, \alpha_2}} Y_{l,0} \left[\frac{\exp\{-i(k_{\alpha_1, \alpha_2} r - \eta \ln 2 k_{\alpha_1, \alpha_2} r - l \pi/2)\}}{i r \sqrt{v_{\alpha_1, \alpha_2}}} \right. \right. \\ & - \frac{\exp\{i(k_{\alpha_1, \alpha_2} r - \eta \ln 2 k_{\alpha_1, \alpha_2} r - l \pi/2)\}}{i r \sqrt{v_{\alpha_1, \alpha_2}}} \left. \right] \psi_{\alpha_1, \alpha_2, S, \mu} \\ & - \sum_{\alpha_1', \alpha_2', l', m', S', \mu'} \frac{\sqrt{2l+1} i^l \pi}{k_{\alpha_1, \alpha_2}} Y_{l',m'} \frac{\exp\{i(k_{\alpha_1', \alpha_2'} r - \eta' \ln 2 k_{\alpha_1', \alpha_2'} r - l \pi/2)\}}{i r \sqrt{v_{\alpha_1', \alpha_2'}}} \\ & \cdot (S_{\alpha_1', \alpha_2', S', \mu'; \alpha_1, \alpha_2, S, \mu, l, 0} - \delta_{\alpha_1', \alpha_2', S', \mu', l', m'; \alpha_1, \alpha_2, S, \mu, l, 0}) \psi_{\alpha_1, \alpha_2, S, \mu} \left. \right\}. \end{aligned} \quad (35)$$

Dabei beschreiben α_1, α_2 die Quantenzustände des Projektils bzw. des Targetkerns, l, m den Bahndrehimpuls und S, μ den Kanalspin.

Die Wellenfunktion $\psi_{\alpha_1, \alpha_2, S, \mu}$ setzt sich aus den einzelnen Wellenfunktionen des streuenden und gestreuten Atomkerns zusammen

$$\psi_{\alpha_1, \alpha_2, S, \mu} = \sum_{\mu_1, \mu_2} \psi_{\text{Kern}_1, J_1, \mu_1} \psi_{\text{Kern}_2, J_2, \mu_2} (J_1 J_2 S | \mu_1 \mu_2 \mu). \quad (36)$$

In der Schreibweise von Gl. (33) erhalten wir für die ein- und auslaufende Welle

$$I_c = O_c^* = \frac{\exp\{-i(k_{\alpha_1, \alpha_2} r - \eta_{\alpha_1, \alpha_2} \ln 2 k_{\alpha_1, \alpha_2} r - l \pi/2)\}}{\sqrt{v_{\alpha_1, \alpha_2}}}, \quad (37)$$

für die Funktion

$$\varphi_c = \sum_{\mu, m} \frac{1}{r} \psi_{\alpha_1, \alpha_2, S, \mu} Y_{l, m} (S l J | \mu m M) \quad (38)$$

und für die Koeffizienten

$$A_c = \sqrt{2l+1} i^{l-1} \sqrt{\pi} / k_{\alpha_1, \alpha_2}. \quad (39)$$

Damit erhalten wir für die Eigenkanal-Wellenfunktion (29)

$$\begin{aligned} \psi^r = & -2i \exp\{i\delta^r\} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, S, \mu, l, m} \frac{V_{\alpha_1, \alpha_2, S, \mu}^r}{r \cdot \sqrt{v_{\alpha_1, \alpha_2}}} \sin(k_{\alpha_1, \alpha_2} r - \eta_{\alpha_1, \alpha_2} \ln 2 k_{\alpha_1, \alpha_2} r - l \pi/2 + \delta^r) \\ & \cdot \sum_{\mu_1, \mu_2} \psi_{\text{Kern}_1, J_1, \mu_1} \psi_{\text{Kern}_2, J_2, \mu_2} (J_1 J_2 S | \mu_1 \mu_2 \mu) (S l J | \mu m M) Y_{l, m}. \end{aligned} \quad (40)$$

Den differentiellen Wirkungsquerschnitt für den Übergang vom Anfangszustand $|\alpha_1, \alpha_2, S, \mu\rangle$ zum Endzustand $|\alpha_1', \alpha_2', S', \mu'\rangle$ mit Gl. (34) zu

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}_{\alpha_1, \alpha_2, S, \mu; \alpha_1', \alpha_2', S', \mu'} = & \frac{\lambda_{\alpha_1, \alpha_2}^2}{4\pi} \left| \sum_{l', m', l, 0} \sqrt{2l+1} Y_{l', m'}(\vartheta, \varphi) \right. \\ & \cdot \left. (S_{\alpha_1', \alpha_2', S', \mu', l', m'; \alpha_1, \alpha_2, S, \mu, l, 0} - \delta_{\alpha_1', \alpha_2', S', \mu', l', m'; \alpha_1, \alpha_2, S, \mu, l, 0}) \right|^2. \end{aligned} \quad (41)$$

In dieser Gleichung wird die S -Matrix in Kanalspin-Darstellung benutzt. Wir erhalten jedoch durch Diagonalisierung der Wechselwirkung H_{int} im Innenbereich ($r < a$) die S -Matrix zum Gesamtdrehimpuls J . Es besteht die Beziehung

$$S_{\alpha_1', \alpha_2', S', \mu', l', m'; \alpha_1, \alpha_2, S, \mu, l, m} = \sum_{J, M} (S l J | \mu m M) \cdot S_{\alpha_1', \alpha_2', S', \mu', l', m'; \alpha_1, \alpha_2, S, \mu, l, m}^J. \quad (42)$$

Bei unpolarisiertem Einfallstrahl und unpolarisiertem Target erhalten wir, wenn der Kanalspin S unbedachtet bleibt,

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\alpha_1, \alpha_2; \alpha_1', \alpha_2'} = & \frac{\lambda_{\alpha_1, \alpha_2}^2 / 4\pi}{(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)} \left| \sum_{l, l', S, S', 0, m', \mu, \mu'} \sqrt{2l+1} Y_{l', m'}(\vartheta, \varphi) \right. \\ & \cdot \left. \left(\sum_{J, M} (S l J | \mu 0 M) (S' l' J | \mu' m' M) \cdot S_{\alpha_1, \alpha_2, S, \mu, l, 0; \alpha_1', \alpha_2', S', \mu', l', m'}^J - \delta_{\alpha_1', \alpha_2', S', \mu', l', m'; \alpha_1, \alpha_2, S, \mu, l, 0} \right) \right|^2. \end{aligned} \quad (43)$$

Für die Wellenfunktionen U_{nc} im Innenraum ($r < a$) werden Lösungen des Hamilton-Operators H_0 , und zwar die im Koordinaten-Ursprung regulären Coulomb-Funktionen benutzt. Wenn die radiale Quantenzahl n die Funktionen abzählt, erhalten wir

$$\begin{aligned} U_{n, \alpha_1, \alpha_2, l, m} = & \exp\{-\eta_{n, \alpha_1, \alpha_2} \pi/2\} (-)^m \frac{1}{2l+1} \frac{\Gamma(l+1+i\eta_{n, \alpha_1, \alpha_2})}{(2l)!} (2i k_{n, \alpha_1, \alpha_2} r)^l \exp\{i k_{n, \alpha_1, \alpha_2} r\} Y_{l, m}(\vartheta, \varphi) \\ & \cdot {}_1F_1'(l+1+i\eta_{n, \alpha_1, \alpha_2}, 2l+2; -2i k_{n, \alpha_1, \alpha_2} r) \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu} (J_1 J_2 S | \mu_1 \mu_2 \mu) (S l J | \mu m M) \psi_{\text{Kern}_1} \psi_{\text{Kern}_2}. \end{aligned} \quad (44)$$

Für den asymptotischen Bereich ergibt sich

$$\begin{aligned} U_{n, \alpha_1, \alpha_2, l, m} \underset{r \rightarrow \infty}{=} & (-)^m i^l \exp\{i\delta_l\} \frac{1}{k_{n, \alpha_1, \alpha_2} r} \sin\left(k_{n, \alpha_1, \alpha_2} r - \frac{l\pi}{2} - \eta_{n, \alpha_1, \alpha_2} \ln 2 k_{n, \alpha_1, \alpha_2} r + \delta_l\right) \\ & \cdot \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu} (J_1 J_2 S | \mu_1 \mu_2 \mu) (S l J | \mu m M) \psi_{\text{Kern}_1} \psi_{\text{Kern}_2} Y_{l, m}(\vartheta, \varphi). \end{aligned} \quad (45)$$

Diese Darstellung können wir verwenden, wenn die Bedingung $k r \gg \eta$ und l erfüllt ist¹².

Die Eigenkanal-Wellenfunktion ψ^r wird im Innenraum ($r < a$) nach Wellenfunktionen U_{nc} des Hamilton-Operators H_0 entwickelt [Gl. (32)]. Die zu diesen U_{nc} gehörenden Wellenzahlen k_{nc} erhalten wir durch die Forderung, daß die logarithmische Ableitung für jeden Kanal auf beiden Seiten übereinstimmt. Wenn die Schnittstelle $r = a$ bereits im asymptotischen Bereich liegt, erhalten wir

$$\begin{aligned} & \cot(k_{\alpha_1, \alpha_2} a - \eta_{\alpha_1, \alpha_2} \ln 2 k_{\alpha_1, \alpha_2} a - l \pi/2 + \delta^r) (k_{\alpha_1, \alpha_2} - \eta_{\alpha_1, \alpha_2}/a) \\ & = \cot\left[k_{n, \alpha_1, \alpha_2} a - \frac{Z_1 Z_2 e^2 \mu}{\hbar^2 k_{n, \alpha_1, \alpha_2}} \ln 2 k_{n, \alpha_1, \alpha_2} a - \frac{l\pi}{2} + \text{arc } \Gamma\left(l+1 + \frac{i Z_1 Z_2 e^2 \mu}{\hbar^2 k_{n, \alpha_1, \alpha_2}}\right)\right] \left(k_{n, \alpha_1, \alpha_2} = \frac{Z_1 Z_2 e^2 \mu}{a \hbar^2 k_{n, \alpha_1, \alpha_2}} \right). \end{aligned} \quad (46)$$

Aus dieser transzendenten Gleichung können wir die Wellenzahlen $k_{n, \alpha_1, \alpha_2}$ für jeden Wert von δ^r bestimmen.

¹² Applied Mathematics, Series 17, NBS, Coulomb Wave Functions, Vol. I, 1952.

7. Die Radial-Matrixelemente

Im Innenbereich muß der Gesamt-Hamilton-Operator mit den U_{nc} diagonalisiert werden. Dabei treten Radial-Matrixelemente der Form

$$M_{l_i, l_f}^{-\lambda-1} = \frac{1}{k_i k_f} \int_{R_0}^a \frac{F_{l_f}(k_f r) \cdot F_{l_i}(k_i r)}{r^{\lambda+1}} dr \quad (47)$$

auf. Wir interessieren uns nur für den Fall $\lambda=2$, daß heißt für die Quadrupol-Wechselwirkung, weil diese in der Kernphysik bei weitem alle anderen Multipolaritäten überwiegt. $F_l(k r)$ ist die Abkürzung für

$$F_l(k r) = e^{-\pi\eta/2} \frac{|\Gamma(l+1+i\eta)|}{2\Gamma(2l+2)} (2k r)^{l+1} \cdot e^{ikr} {}_1F_1'(l+1-i\eta, 2l+2; 2ikr) \quad (48)$$

und R_0 ist der Kernradius.

Die untere Integrationsgrenze können wir nach Null verschieben, da die Coulomb-Wellenfunktionen im Kernbereich sehr klein sind und dort einen unwesentlichen Beitrag liefern. Um die obere Grenze

$$M_{l+\lambda, l}^{-\lambda-1} = e^{\pi\xi/2} \left| \frac{\Gamma(l+1+i\eta_f)}{\Gamma(l+1+\lambda+i\eta_i)} \right| \left(\frac{\eta_i}{\eta_f} \right)^l (2k_i)^{\lambda-2} \left\{ \frac{|\Gamma(\lambda+i\xi)|^2}{(2\lambda-1)!} \cdot F_2(-2\lambda+1, l+1-i\eta_f, l+1+i\eta_f; -\lambda+1-i\xi, -\lambda+1+i\xi; \xi/2\eta_f, \xi/2\eta_f) + 2 \operatorname{Re} \left[\left(e^{i\pi} \frac{\xi}{2\eta_f} \right)^{\lambda+i\xi} \frac{\Gamma(l+\lambda+1-i\eta_i) \Gamma(-\lambda-i\xi)}{\Gamma(l+1-i\eta_f)} \cdot F_2(-\lambda+1+i\xi, l+\lambda+1-i\eta_i, l+1+i\eta_f; -\lambda+1-i\xi, -\lambda+1+i\xi; \xi/2\eta_f, \xi/2\eta_f) \right] \right\} \right\} \quad (52a)$$

und

$$M_{l, l+\lambda}^{-\lambda-1}(\eta_i, \eta_f) = M_{l+\lambda, l}^{-\lambda-1}(\eta_f, \eta_i) = e^{-\pi\xi} M_{l+\lambda, l}^{-\lambda-1}(-\eta_f, -\eta_i), \quad (52b)$$

wobei $\xi = \eta_f - \eta_i$ und $\eta = Z_1 Z_2 e^2 / (\hbar v)$ ist.

Die Konvergenz der Entwicklung nach Drehimpulsen ist nicht sehr gut^{13, 14}. Der maximale Beitrag kommt im Falle von Quadrupol-Übergängen von Drehimpulsen $l \approx \eta$. Für $l > \eta$ nehmen die Beiträge mit $e^{-\xi l}$ ab. Für kleine Werte von ξ sind deshalb Matrixelemente zwischen F -Funktionen hoher Drehimpulse nötig. Zur Bestimmung dieser Matrixelemente werden Rekursionsformeln benutzt. Von den Quadrupol-Matrixelementen interessieren wegen der Erhaltung der Parität und des Drehimpulses nur zwei Arten, und zwar die mit $l_i - l_f = \pm 2$ und die mit $l_i = l_f$. Die beiden Arten sind verknüpft durch die Gleichung

$$y M_{l,l}^{-3} = y_1 M_{l+2,l}^{-3} + y_2 M_{-1,l+1}^{-3} + y_3 M_{l+2,l}^{-3} + y_4 M_{l+1,l-1}^{-3} \quad (53a)$$

mit

$$y = \frac{1}{3} l(l+1)(\eta_f^2 - \eta_i^2), \quad y_1 = -\eta_i^2 |l+1+i\eta_f| |l+2+i\eta_f|, \\ y_2 = \eta_i \eta_f \frac{2l+3}{2l+1} |l+i\eta_i| |l+1+i\eta_f|, \quad y_3 = \eta_f^2 |l+1+i\eta_i| |l+2+i\eta_i|, \\ y_4 = -\eta_i \eta_f \frac{2l+3}{2l+1} |l+i\eta_f| |l+1+i\eta_i|. \quad (53b)$$

¹³ L. C. BIEDENHARN, M. GOLDSTERN, J. L. McHALE u. R. M. THALER, Phys. Rev. **101**, 662 [1956].

¹⁴ L. C. BIEDENHARN, J. L. McHALE u. R. M. THALER, Phys. Rev. **100**, 376 [1955].

des Integrals nach unendlich verschieben zu können, muß der Beitrag des Integrals zwischen den Grenzen $r=a$ und $r \rightarrow \infty$ vernachlässigbar sein. Im asymptotischen Bereich nimmt Gl. (48) die Form

$$F_l(k r) \approx \sin(k r + \pi l/2 - \eta \ln k r + \delta_l) \quad (49)$$

an. Der abzuschätzende Beitrag ist dann für den Fall $l_i = l_f$ von der Größe

$$\int_a^\infty \frac{dr}{2r^3} = \frac{1}{4a^2}. \quad (50)$$

Wenn die Aufteilung in Außen- und Innenraum durch eine Kugel mit dem Radius $r=a=15R_0$ bewerkstelligt wird, machen wir einen Fehler von etwa 0,5%, das heißt, die obere Grenze des Integrals kann nach unendlich verschoben werden.

$$M_{l_i, l_f}^{-\lambda-1} = \frac{1}{k_i k_f} \int_0^\infty \frac{F_{l_i}(k_i r) \cdot F_{l_f}(k_f r)}{r^{\lambda+1}} dr. \quad (51)$$

Die Lösung dieses Integrals für den Fall $|l_i - l_f| = \lambda$ lautet⁴

Für Matrixelemente mit $l_i - l_f = \pm \lambda$ existiert folgende Beziehung

$$y_1 M_{l+\lambda-3, l-3}^{-\lambda-1} + y_2 M_{l+\lambda-2, l-2}^{-\lambda-1} + y_3 M_{l+\lambda-1, l-1}^{-\lambda-1} + y_4 M_{l+\lambda, l}^{-\lambda-1} = 0 \quad (54a)$$

mit

$$\begin{aligned} y_1 &= 2 \eta_i \eta_f |l-2+i\eta_i| |l-1+i\eta_f| |l+\lambda-2+i\eta_i|, \\ y_2 &= -|l-1+i\eta_f| [l^2(2\eta_i^2+4\eta_f^2) + l(4(\lambda-2)(\eta_i^2+\eta_f^2) + \eta_i^2-\eta_f^2) \\ &\quad + (\lambda-2)((2\lambda-3)\eta_i^2-3\eta_f^2) + 6\eta_i^2\eta_f^2], \\ y_3 &= (\eta_f/\eta_i) |l+\lambda-1+i\eta_i| [l^2(4\eta_i^2+2\eta_f^2) + l(4(\lambda-2)\eta_i^2 \\ &\quad + \eta_i^2-\eta_f^2) - 2(\lambda-2)\eta_i^2+6\eta_i^2\eta_f^2], \\ y_4 &= -2\eta_f^2 |l+\lambda-1+i\eta_i| |l+\lambda+i\eta_i| |l+i\eta_f|. \end{aligned} \quad (54b)$$

Um alle Quadrupol-Matrixelemente zu berechnen, brauchen wir lediglich die Matrixelemente M_{02} , M_{13} , M_{24} , M_{31} , M_{42} mit Gl. (52a) zu berechnen. Alle anderen Matrixelemente können dann mit den Gl. (53) und (54) ermittelt werden.

8. Die Winkel- und Spinanteile der Matrixelemente

Die zu diagonalisierende Wechselwirkung ist durch Gl. (11) gegeben und hier in der Form

$$H_{\text{int}} = 4\pi e^2 \sum_{\lambda} \frac{(-)^{\lambda}}{\sqrt{2\lambda+1}} [\hat{c}^{\lambda}(r) (c^{\lambda}(r_1) + (-)^{\lambda} c^{\lambda}(r_2))]^{[0]} \quad \text{dargestellt,}$$

mit $c_{\mu}^{\lambda}(r) = \frac{1}{r^{\lambda+1}} Y_{\lambda, \mu}(\vartheta, \varphi)$, $c_{\mu}^{\lambda}(r_1) = Z_2 M_1(E \lambda, \mu)$, $c_{\mu}^{\lambda}(r_2) = Z_1 M_2(E \lambda, \mu)$.

Wenn wir die Wellenfunktion (44) durch die Abkürzung $(J_1 J_2 | S l J)$ beschreiben, erhalten wir die reduzierten Matrixelemente zu¹⁵

$$\begin{aligned} (J_1' J_2' | S' l' J') \frac{4\pi e^2}{\sqrt{2\lambda+1}} [\hat{c}^{\lambda}(r) (c^{\lambda}(r_1) + (-)^{\lambda} c^{\lambda}(r_2))]^{[0]} &\parallel J_1 J_2 | S l J \\ &= \frac{(-)^{S+J+\lambda} \sqrt{4\pi e^2}}{(2J+1) \sqrt{2\lambda+1} \sqrt{2J'+1}} \{l' S' \lambda\} \{l' S' \lambda\} (M_1 + M_2) \end{aligned}$$

mit $M_1 = \sqrt{2J_1+1} \sqrt{2J_2+1} (-)^{J_1'+S+\lambda+J_2} \{J_1' S' \lambda\} \delta_{J_1 J_2'} (J_1' \parallel c^{\lambda}(r_1) \parallel J_1)$,
 $M_2 = \sqrt{2J_1+1} \sqrt{2J_2+1} (-)^{J_1+J_2+S'} \{J_2' S' \lambda\} \delta_{J_1 J_2'} (J_2' \parallel c^{\lambda}(r_2) \parallel J_2)$.

Dabei sind $(J_1' \parallel c^{\lambda}(r_1) \parallel J_1)$ und $(J_2' \parallel c^{\lambda}(r_2) \parallel J_2)$ die reduzierten Kern-Matrixelemente, die mit einem Kernmodell bestimmt werden.

9. Streuung gleicher Kerne aneinander

Für den Fall, daß gleiche Atomkerne aneinander gestreut werden, müssen die Wellenfunktionen im Innerraum für identische Bosonen symmetrisiert und für identische Fermionen antisymmetrisiert werden. Bei Vertauschung der beiden Kerne 1 und 2 geht

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad \text{in} \quad Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

über. Damit erhalten wir für die Wellenfunktionen

$$\begin{aligned} U_{n, \alpha_1, \alpha_2, l, m} &= (-)^m i^l \exp\{i \delta_{n, \alpha_1, \alpha_2, l}\} Y_{l, m}(\vartheta, \varphi) \frac{1}{k_{n, \alpha_1, \alpha_2}} F_l(k_{n, \alpha_1, \alpha_2} r) \\ &\cdot \sum_{\mu_1, \mu_2} (J_1 J_2 S | \mu_1 \mu_2 \mu) (S l J | \mu m M) \frac{(\psi_{J_1}(r_1) \psi_{J_2}(r_2) \pm (-)^{l+J_1+J_2+S} \psi_{J_2}(r_2) \psi_{J_1}(r_1))}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

¹⁵ M. ROTENBERG, R. BIVINS, N. METROPOLIS u. J. WOOTEN, The 3- j and 6- j Symbols, Crosby Lockwood & Son, London 1959.

Bei Bosonen gilt das positive Vorzeichen; das negative gilt bei Fermionen.

In der Regel betrachten wir die Streuung zweier Kerne, die am Anfang im Grundzustand sind. Wenn der Grundzustands-Spin zum Beispiel $J=0$ ist, haben wir zwei identische Bosonen und müssen die Wellenfunktionen dieses Eingangs-Kanals symmetrisieren. Da der Hamilton-Operator diese Symmetrie nicht zerstört, müssen auch alle Ausgangs-Kanäle symmetrisch in den beiden Kernen sein. Wir erhalten also nur Matrixelemente zwischen Wellenfunktionen mit geradem Drehimpuls l . Dadurch wird die Zahl der zu berechnenden Matrixelemente kleiner und die Berechnung solcher Probleme vereinfacht.

10. Abschätzung der Zustandsdichte im Innenraum

Als Beispiel wählen wir den extremen Fall, daß Urankerne auf ein Urantarget geschossen werden. Wir betrachten zunächst den Verlauf des Potentials, und zwar den Monopol-Anteil und, da uns nur Quadrupol-Anregungen interessieren, den Quadrupol-Anteil.

Wir erhalten mit dem Kernradius $R_0 = 1,2 A^{1/3}$ fm ≈ 8 fm und $Z_1 = Z_2 = 92$ für die Monopol-Wechselwirkung am Kernrand

$$V_M = \frac{Z_1^2 e^2}{4 \pi \epsilon_0 8 \text{ fm}} \approx 1,52 \cdot 10^3 \text{ MeV.}$$

Zur Abschätzung der Quadrupol-Wechselwirkung wird aus Gl. (11) der Anteil mit $\lambda = 2$, $\sum_{\mu} Y_{2,\mu} = 1$ und $Z_1 = Z_2 = 92$ benutzt.

$$V_Q \approx \frac{e^2}{5 \epsilon_0 R_0^3} \{ Z_1 M_2(\text{E2}, \mu) + Z_2 M_1(\text{E2}, \mu) \}.$$

Nach Gl. (10) ist

$$M(\text{E2}, \mu) = \sum_{p=1}^Z r_p^2 Y_{2,\mu}(\vartheta_p, \varphi_p).$$

Dieser Ausdruck ist das Quadrupolmoment $Q \cdot \sqrt{5/16 \pi}$ des Kerns. Für unsere Abschätzung soll $Q = 10$ barn betragen. Wir erhalten am Kernrand

$$V_Q = \frac{e^2}{5 \epsilon_0 R_0^3} (Z_1 Q_2 + Z_2 Q_1) \approx 2 \cdot 202 \text{ MeV.}$$

In Abb. 3 ist der Verlauf der Monopol- und der Quadrupol-Wechselwirkung dargestellt. Die dargestellte Quadrupol-Wechselwirkung ist die eines einzigen Urankerns mit einer Punktladung $Z = 92$ im

Abstand r . Sie verringert sich von 202 MeV bei $r = R_0$ auf 0,202 MeV bei $r = 10 R_0$ und auf 0,025 MeV bei $r = 20 R_0$.

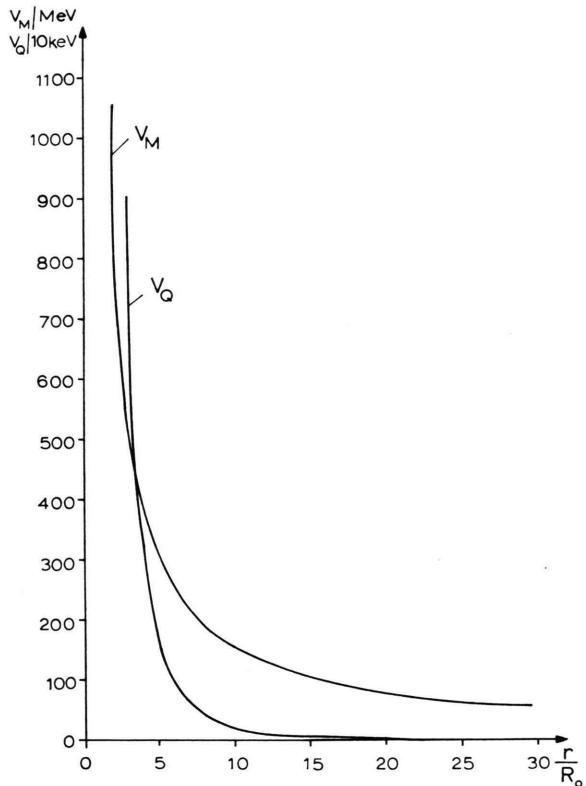


Abb. 3. Quadrupol- und Monopol-Wechselwirkung bei Beschuß eines Urantargets mit Urankernen als Funktion des Abstandes. Annahmen: Kernradius $R_0 = 8$ fm, Quadrupolmoment $Q = 10$ barn.

Die für die Eigenkanal-Theorie notwendige Aufteilung des Raumes muß demnach etwa zwischen dem zehnfachen und zwanzigfachen Kernradius vorgenommen werden, je nachdem wie hoch die Einschuß-Energie ist. Praktisch wird dies durch Vergleich der Ergebnisse bei zwei verschieden gewählten Abschneideradien a_1 und a_2 nachgeprüft. Die Quadrupol-Wechselwirkung ist dann ausreichend berücksichtigt (und damit der Abschneideradius richtig gewählt), wenn die Resultate bei Vergrößerung von a nicht wesentlich geändert werden. Wir wählen $a = 15 R_0$ *. Für andere Systeme, etwa Erbium – Sauerstoff, kann die Aufteilung bei kleinerem Ab-

* Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Kern angeregt wird, bevor sich die beiden Kerne auf den Abstand a genähert haben, beträgt, wie die asymptotische Abschätzung des Integrals (12) zeigt, im Maximalfall ($\vartheta = 180^\circ$) etwa 2%.

stand vorgenommen werden, weil dort die Quadrupol-Wechselwirkung kleiner und die Energie der anregbaren Kernniveaus größer ist.

Für die numerische Behandlung ist die Zustandsdichte im Innenraum von Bedeutung, da die Größe der zu diagonalisierenden Matrizen davon abhängt. Zur Abschätzung der Zustandsdichte ersetzen wir

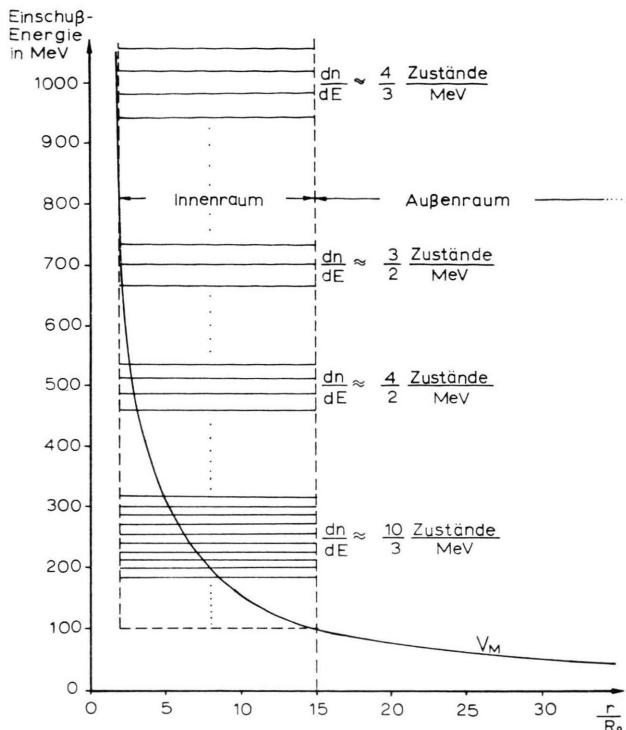


Abb. 4. Graphische Darstellung einer Abschätzung für die Zustandsdichte im Innenraum bei Einschub-Energien von 250, 500, 700 und 1000 MeV. Die Niveau-Abstände sind gegenüber dem Ordinaten-Maßstab fünfzigfach vergrößert. Annahmen: Kastenbreite $R_a = 13 R_0 = 104$ fm, $\mu = 120$; damit liegt $dn/dE \approx 40,2/(VE V/\text{MeV})$.

das Potential im Innenraum durch ein Kastenpotential mit unendlich hohen Wänden. Dann gilt die Beziehung

$$E = \hbar^2 \pi^2 n^2 / (2 \mu R_a),$$

wobei E die Energie, μ die reduzierte Masse, R_a die Kastenbreite und n die Nummer des Zustandes ist. Mit $\mu = 120$ und $R_a = 10 R_0 = 80$ fm ergibt sich für die Zustandsdichte

$$dn/dE \approx 5,34 \cdot 10^{-4} \text{ MeV} \cdot n.$$

Bei einer Einschub-Energie von 250 MeV erhalten wir

$$dn/dE \approx 2,5/\text{MeV}.$$

Für das System $\text{Er}^{166} - \text{O}^{16}$ wird für $Q = 8$ barn und $r_0 = 6$ fm: $dn/dE \approx 1,72$ MeV, das heißt, hier wird die Zustandsdichte und damit die Größe der zu diagonalisierenden Matrizen kleiner. Die Zahl der bei der Diagonalisierung zu berücksichtigenden Zustände (Beschneidung des Hilbert-Raums) hängt sowohl vom Abschneideradius a , von der Stärke der Quadrupol-Wechselwirkung als auch von den Anregungs-Energien der Kerne ab.

Zusammenfassung

Der halbklassischen und der rein quantenmechanischen Behandlungsweise der Coulomb-Anregung liegt die Störungsrechnung zugrunde. Ihre Anwendbarkeit ist deshalb auf Wechselwirkungen beschränkt, die klein gegen die Energien der anzuregenden Kernniveaus sind.

Im Falle hoher Einschub-Energien treten jedoch Wechselwirkungs-Energien auf, die von gleicher Größenordnung und größer als die Energien der anzuregenden Kernniveaus sind. Ein Verfahren, das die Diagonalisierung erlaubt und die Mitwirkung mehrerer anregbarer Kernniveaus nicht nur als kleine Störung berücksichtigt, ist die Eigenkanal-Theorie. Diese Theorie ist dargestellt und im einzelnen erläutert. Die Formeln für die Wellenfunktionen in Außen- und Innenbereich sowie für den Wirkungsquerschnitt und die für die Diagonalisierung notwendigen Matrixelemente und Rekursionsformeln wurden angegeben. Für den Fall, daß gleiche Atomkerne aneinander gestreut werden, sind die symmetrierten bzw. antisymmetrierten Wellenfunktionen des Innenbereichs ermittelt worden. Eine grobe Abschätzung der Dichte der Zustände im Innenbereich wurde durchgeführt.

Die Arbeit zeigt, daß es möglich ist, die Coulomb-Anregung im Rahmen der Eigenkanal-Theorie zu behandeln. Der numerische Aufwand ist entsprechend der Kompliziertheit des Problems erheblich. Es sollte jedoch gelingen, die relativ großen Quadrupol-Wechselwirkungen zwischen streuenden Kernen und die entsprechende Anregung mehrerer Kernniveaus, insbesondere für die Streuung leichter Ionen an Kernen, zu behandeln. Dadurch wäre es möglich, den Einfluß quantenmechanischer Effekte, die in der halbklassischen Theorie unberücksichtigt bleiben, quantitativ zu erfassen. Da die Messungen bei einer festen Energie E durchgeführt werden, brauchen wir

nicht die *S*-Matrix als Funktion der Energie, sondern nur bei fester, durch das Experiment vorgegebener Energie zu berechnen. Lediglich bei Streuproblemen mit großem Coulomb-Parameter η wird die Auswertung durch die zu diagonalisierenden umfangreichen Matrizen erschwert.

Die detaillierte Durchführung der vorgelegten Theorie am Beispiel der Coulomb-Anregung der Rotationsniveaus deformierter Kerne ist in Vorbereitung.

Meinem verehrten Lehrer, Herrn Professor Dr. O. SCHERZER, danke ich für sein Interesse, das er diesem Problem entgegenbrachte und für wertvolle Anregungen und Ratschläge bei der Fertigstellung dieser Arbeit. Die Problemstellung der Arbeit ergab sich aus Diskussionen mit meinem Bruder, Professor Dr. W. GREINER, wofür ich ihm danken möchte. Dank gebührt auch den Herren Dr. C. TOEPFFER, Dr. W. SCHEID und K. SCHÄFER für Diskussionen und Hinweise.

Correlation Function Approach to Short-Range Order in the Ising-Model

RAINER J. JELITTO

Institut für Theoretische Physik der Universität Kiel

(Z. Naturforsch. **25 a**, 181—188 [1970]; received 2 December 1969)

By pushing forward the decoupling from the three- to the four-point correlation function short-range order is systematically introduced into the description of the statistical behaviour of the Ising-model. Application of a procedure which is a natural generalization of that invented by Bogoljubov and Tjablikov for the Heisenberg-model, leads to an overall-approximation for the magnetization and the nearest-neighbour correlation which may be compared with the Ising-model variant of Oguchi's two-spin-cluster molecular field theory. The results of both approximations are very similar both for low and high temperatures, but for the transition point the new approach yields values which lie considerably lower and therefore are more reliable than those following from Oguchi's theory. Moreover, the comparison with a slight modification of the theory which is also presented in this paper, illuminates the physical mechanism which is responsible for the formation of correlations within the order of approximation, considered.

1. Introduction

Beyond any doubt the technique of quantum-statistical Green's functions and correlation functions is one of the most powerful tools in the modern theory of interacting *N*-particle systems in general and in the theory of magnetism in particular.

Applied to the Heisenberg ferromagnet already its simplest version which consists of a decoupling approximation in the three-point function as given by BOGOLJUBOV and Tjablikov^{1, 2}, leads to a description of the temperature dependence of the magnetization, in which the correct low temperature behaviour of this quantity is incorporated as well as a phase transition. After some slight modifications in the decoupling procedure this approximation

yields the best overall-description of the Heisenberg-model existing up to this day.

On the other hand it clearly suffers from the fact of being essentially a single particle theory, in which statistical correlations of the *z*-components of spins at different lattice sites are neglected in the same way as they are in the Weiss molecular field approximation. Clearly, this is due to the fact that the decoupling is performed in the three-point function. But unfortunately great mathematical difficulties arise, if one tries to push this decoupling forward to a higher order of these functions and thus to take into account correlation effects in spin-clusters as this was done by OGUCHI³ or P. R. WEISS⁴ within the frame of molecular field theories.

For the Ising-model the chain of Green's functions may be explicitly summed up because of the

Sonderdruckanforderungen an Dr. R. J. JELITTO, Institut für Theoretische Physik und Sternwarte der Universität Kiel, D-2300 Kiel, Olshausenstraße, Haus C 4/1.

¹ N. N. BOGOLJUBOV and S. V. Tjablikov, Sov. Phys. — Dokl. Acad. Nauk USSR **4**, 604 [1959].

² S. V. Tjablikov, Ukrain. Mat. Zhur. **11**, 287 [1959].

³ T. OGUCHI, Progr. Theor. Phys. (Kyoto) **13**, 148 [1955].

⁴ P. R. WEISS, Phys. Rev. **74**, 1493 [1948].