

# Das effektive Trägheitsmoment im quantenmechanischen Dreikörperproblem

H. LETZ, H. RUDER und H. VOLZ

Institut für Theoretische Physik der Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen

(Z. Naturforsch. 25 a, 317—321 [1970]; eingegangen am 24. November 1969)

The method of "specific decoupling", as described in two earlier papers, is applied to special forms of wave functions of the 3-body-problem. The internal frame of reference, connected with a collective rotational motion of the system, is determined by solution of the basic differential equation. An exact expression for the effective moment of inertia is given and evaluated. The results confirm the validity of former variational calculations.

## 1. Einleitung

In zwei Arbeiten von RUDER und VOLZ<sup>1</sup> über „Die rotatorische Bewegung eines Systems von  $n$  Massenpunkten“ [im folgenden mit (I) bzw. (II) bezeichnet] wurde das Problem der Entkopplung von innerer und rotatorischer Bewegung untersucht. Es zeigte sich, daß dieses Problem durch Einführung eines geeigneten körpergebundenen Koordinatensystems über ein Extremalprinzip gelöst werden kann. Zur praktischen Behandlung der Variationsaufgabe boten sich dabei zwei Möglichkeiten an:

1. Untersuchung der zugehörigen Euler-Lagrangeschen Differentialgleichung,
2. Approximation durch geeignete Variationsansätze.

In den oben zitierten Arbeiten wurde im wesentlichen von 2. Gebrauch gemacht, um die effektiven Trägheitsmomente einfacher Punktkonfigurationen abzuschätzen.

In dieser Arbeit wird die Euler-Lagrangesche Differentialgleichung weiter untersucht und für spezielle Wellenfunktionen exakt gelöst. Die Ergebnisse werden dann mit denen verschiedener Variationsansätze verglichen.

## 2. Die Hamilton-Form des Dreikörperproblems

Die Hamilton-Form des Dreikörperproblems ist für ein in bestimmter Weise gewähltes körpergebundenes Koordinatensystem von RUDER<sup>2</sup> angegeben worden. Weiterhin wurde in (II) gezeigt, daß das in der Hamilton-Form auftretende Kopplungsglied  $H_k$  wesentlich von der Orientierung der in der Dreiecksebene liegenden körpergebundenen Achsen abhängt. Diese Orientierung wird durch den Winkel  $\chi$  beschrieben, der von der Verbindungslinie der Massen  $m_1$  und  $m_2$  zur körpergebundenen  $\xi$ -Achse gemessen wird. Den von  $\chi$  abhängigen Hamilton-Operator

$$H = H_1^* + H_k^* + H_2^*$$

findet man in (II/15).

Wegen der Abhängigkeit des Operators  $H_k^*$  von  $\chi$  kann die Forderung

$$H_k^* \Phi_0 = 0 \quad (1)$$

aufgestellt und als Bestimmungsgleichung für  $\chi$  betrachtet werden. Dabei ist  $\Phi_0$  die nur von den inneren Koordinaten abhängige Wellenfunktion für den rotationsfreien Grundzustand. In (II) wurde gezeigt, daß dies die Euler-Lagrangesche Differentialgleichung für die Extremalforderung

$$\langle H_2^* \rangle = \text{Minimum} \quad (2)$$

ist. Der aus dieser Gleichung zu bestimmende Winkel  $\chi$  liefert das zu der Wellenfunktion  $\Phi_0$  gehörige körpergebundene Bezugssystem, in dem die auf  $\Phi_0$  bezogene „spezifische Entkopplung“ vorliegt.

## 3. Behandlung der Euler-Lagrangeschen Differentialgleichung

Wir stellen uns die Aufgabe, Lösungen der Euler-Lagrangeschen Differentialgleichung (1) zu finden. Um die Gleichung in eine übersichtliche Form zu bringen, gehen wir noch einmal aus von der Extremalbedingung (2) für den Erwartungswert von  $H_2^*$ :

$$\delta \int \psi^* H_2^* \psi d\tau = 0.$$

<sup>1</sup> H. RUDER u. H. VOLZ, Z. Naturforsch. 23 a, 1419 [1968]; 24 a, 1171 [1969].

<sup>2</sup> H. RUDER, Z. Naturforsch. 23 a, 579 [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 Nutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

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

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

Dies ist für eine separierte Wellenfunktion der Form

$$\psi(\varrho, r, u, \alpha, \beta, \gamma) = \Phi_0(\varrho, r, u) \cdot f(\alpha, \beta, \gamma),$$

wie aus den Überlegungen in (II) hervorgeht, gleichbedeutend mit

$$\delta \int \left\{ \left( \frac{\partial \chi}{\partial \varrho} \right)^2 + \left( \frac{\partial \chi}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{1}{\varrho^2} + \frac{1}{r^2} \right) \left( \frac{\partial \chi}{\partial u} - \frac{r^2}{r^2 + \varrho^2} \right)^2 \right\} \Phi_0^2 d\tau = 0.$$

(Die reduzierten Massen  $\mu_1$  und  $\mu_2$  wurden dabei durch die Transformation  $\sqrt{\mu_1} \varrho \rightarrow \varrho$ ,  $\sqrt{\mu_2} r \rightarrow r$  in die Definition der Koordinaten  $\varrho$  und  $r$  einbezogen.)

Zur formalen Vereinfachung der mathematischen Ausdrücke wird an dieser Stelle im „cartesischen“ Raum der Koordinaten  $\varrho$ ,  $r$  und  $u$  ein Vektorfeld  $\mathfrak{A}$  eingeführt. Wir setzen

$$\mathfrak{A} = \begin{pmatrix} A_\varrho \\ A_r \\ A_u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_0^2 \frac{\partial \chi}{\partial \varrho} \varrho^2 r^2 \sin u \\ \Phi_0^2 \frac{\partial \chi}{\partial r} \varrho^2 r^2 \sin u \\ \left( \frac{1}{\varrho^2} + \frac{1}{r^2} \right) \left( \frac{\partial \chi}{\partial u} - \frac{r^2}{r^2 + \varrho^2} \right) \Phi_0^2 \varrho^2 r^2 \sin u \end{pmatrix} \quad (3)$$

und erhalten so für das Extremalprinzip

$$\delta \int \left\{ A_\varrho \frac{\partial \chi}{\partial \varrho} + A_r \frac{\partial \chi}{\partial r} + A_u \left( \frac{\partial \chi}{\partial u} - \frac{r^2}{r^2 + \varrho^2} \right) \right\} d\tau' = 0 \quad (4)$$

mit  $d\tau' = d\varrho \cdot dr \cdot du$ .

Zur Bestimmung des Extremums wird in üblicher Weise die gesuchte Funktion  $\chi$  in die Schar

$$\chi(\varrho, r, u) + \varepsilon \cdot \sigma(\varrho, r, u)$$

eingebettet und das Variationsverfahren durchgeführt. Die Gl. (4) geht dann über in

$$\int \mathfrak{A} \cdot \text{grad } \sigma d\tau' = 0.$$

Wir schreiben dafür unter Verwendung des Gaußschen Satzes

$$\int \text{div}(\mathfrak{A} \cdot \sigma) d\tau' - \int \sigma \text{div } \mathfrak{A} d\tau' = \oint \mathfrak{A} \cdot \sigma d0 - \int \sigma \text{div } \mathfrak{A} d\tau' = 0,$$

wobei die Abkürzungen

$$\text{grad } \sigma = \left( \frac{\partial \sigma}{\partial \varrho}, \frac{\partial \sigma}{\partial r}, \frac{\partial \sigma}{\partial u} \right), \text{div } \mathfrak{A} = \frac{\partial A_\varrho}{\partial \varrho} + \frac{\partial A_r}{\partial r} + \frac{\partial A_u}{\partial u}$$

verwendet wurden. Mit der üblichen Forderung, daß die sonst beliebig wählbare Variationsfunktion  $\sigma$  am Rand des Integrationsgebiets verschwindet, nimmt die frühere Euler-Lagrangesche Differentialgleichung (II/16)

$$H_k^* \Phi_0 = \left\{ \frac{1}{\Phi_0} \left[ \frac{1}{\varrho^2} \frac{\partial}{\partial \varrho} \left( \Phi_0^2 \varrho^2 \frac{\partial \chi}{\partial \varrho} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( \Phi_0^2 r^2 \frac{\partial \chi}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin u} \left( \frac{1}{r^2} + \frac{1}{\varrho^2} \right) \frac{\partial}{\partial u} \left( \Phi_0^2 \sin u \left( \frac{\partial \chi}{\partial u} - \frac{r^2}{r^2 + \varrho^2} \right) \right) \right] \right\} = 0$$

die Form

$$\text{div } \mathfrak{A} = 0 \quad (5)$$

an. Diese partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung in den Variablen  $\varrho$ ,  $r$  und  $u$  lässt sich durch die folgende Koordinatentransformation noch weiter vereinfachen. Wir wählen

$$\varrho = R \cos \frac{\psi}{2} \quad r = R \sin \frac{\psi}{2} \quad u = u$$

$$0 \leq R < \infty \quad 0 \leq \psi \leq \pi \quad 0 \leq u \leq \pi$$

und erhalten so aus (5) in den neuen Koordinaten

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial R} \left( R^5 \frac{\partial \chi}{\partial R} \Phi_0^2 \sin^2 \psi \sin u \right) \\ + 4R^3 \left\{ \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \Phi_0^2 \frac{\partial \chi}{\partial \psi} \sin^2 \psi \cdot \sin u \right) \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial u} \left( \Phi_0^2 \sin u \left( \frac{\partial \chi}{\partial u} - \sin^2 \frac{\psi}{2} \right) \right) \right\} = 0. \end{aligned}$$

Es erscheint zunächst recht schwierig, einen Ansatzpunkt zur Lösung dieser Differentialgleichung zu finden. Wenn wir jedoch die zugehörige Variationsforderung

$$\int \left\{ \left( \frac{\partial \chi}{\partial R} \right)^2 + \frac{4}{R^2} \left[ \left( \frac{\partial \chi}{\partial \psi} \right)^2 + \frac{1}{\sin^2 \psi} \left( \frac{\partial \chi}{\partial u} - \sin^2 \frac{\psi}{2} \right)^2 \right] \right\} \Phi_0^2 d\tau = \text{Min.}$$

mit

$$d\tau = \frac{1}{8} R^5 dR \sin^2 \psi du \sin u du$$

betrachten, in welcher die Ableitung  $\partial \chi / \partial R$  nur in Form eines quadratischen Gliedes auftritt, so wird der auch physikalisch plausible Ansatz

$$\frac{\partial \chi}{\partial R} = 0$$

nahegelegt. Ein solcher Ansatz bedeutet, daß  $\chi$  nur von der Gestalt und nicht von der absoluten Größe der Konfiguration abhängt. Wir rechnen also weiterhin nur mit

$$\chi = \chi(u, \psi).$$

Nach Einführung des ebenen Vektorfeldes

$$\mathfrak{A} = \begin{pmatrix} A_\psi \\ A_u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_0^2 \frac{\partial \chi}{\partial \psi} \sin^2 \psi \cdot \sin u \\ \Phi_0^2 \left( \frac{\partial \chi}{\partial u} - \sin^2 \frac{\psi}{2} \right) \sin u \end{pmatrix} = \Phi_0^2 \cdot \mathfrak{A}^*$$

im „cartesischen“ Raum der Koordinaten  $u$  und  $\psi$  lässt sich der nur von  $u$  und  $\psi$  abhängige Teil der Differentialgleichung formal wieder als Divergenz schreiben:

$$\text{div } \mathfrak{A} = 0. \quad (6)$$

Ausgehend von dieser Gleichung wird im nächsten Abschnitt ein Lösungsverfahren entwickelt.

#### 4. Ein spezielles Lösungsverfahren

Nach einer einfachen Umformung von (6) erhalten wir

$$\operatorname{div}(\Phi_0^2 \mathfrak{A}^*) = \Phi_0^2 \operatorname{div} \mathfrak{A}^* + \mathfrak{A}^* \operatorname{grad} \Phi_0^2 = 0. \quad (7)$$

Das spezielle Lösungsverfahren, welches wir im folgenden verwenden, zerfällt in zwei Schritte. Zuerst bestimmen wir eine Lösung von

$$\operatorname{div} \mathfrak{A}^* = 0. \quad (8)$$

Dann wird mit dieser Lösung über die Beziehung

$$\mathfrak{A}^* \operatorname{grad} \Phi_0^2 = 0 \quad (9)$$

die zugehörige Klasse der Wellenfunktionen der inneren Bewegung ermittelt.

Die Lösung von (8) läßt sich zurückführen auf die Bestimmung einer Funktion  $K(u, \psi)$ , da

$$\mathfrak{A}^* = \operatorname{rot} \mathfrak{R} \quad \text{mit} \quad \mathfrak{R} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ K \end{pmatrix}$$

und völlig beliebiger Funktion  $K$  die allgemeinste Darstellung der Lösungsgesamtheit der Differentialgleichung ist. Aus den Beziehungen

$$\frac{\partial K}{\partial u} = A_\psi^* = \frac{\partial \chi}{\partial \psi} \cdot \sin^2 \psi \cdot \sin u \quad (10)$$

$$\frac{\partial K}{\partial \psi} = -A_u^* = -\left(\frac{\partial \chi}{\partial u} - \sin^2 \frac{\psi}{2}\right) \cdot \sin u$$

ergeben sich zunächst die partiellen Ableitungen  $\partial \chi / \partial \psi$  und  $\partial \chi / \partial u$ . Um aus diesen die Funktion  $\chi$  berechnen zu können, muß die Integrabilitätsbedingung

$$\partial^2 \chi / \partial \psi \partial u = \partial^2 \chi / \partial u \partial \psi \quad (11)$$

im ganzen Bereich der Variablen  $u$  und  $\psi$  gelten. Diese Forderung stellt eine Bedingung für die zulässigen Funktionen  $K$  dar. Die Struktur der Differentialgleichung legt den Potenzreihenansatz

$$K = \sum_{\lambda=2}^{\infty} f_\lambda(u) \sin^\lambda \psi$$

nahe, der vermöge (11) auf zwei unendliche Systeme gekoppelter gewöhnlicher Differentialgleichungen zur Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten  $f_\lambda(u)$  führt.

$$\begin{aligned} f_2'' - \cot u f_2' + & 2 f_2 = 0 \\ f_4'' - \cot u f_4' + & 12 f_4 = 4 f_2 \end{aligned} \quad (\text{A})$$

$$\begin{aligned} f_{2v+2}'' - \cot u f_{2v+2}' + (2v+1)(2v+2) f_{2v+2} = & 4v^2 f_{2v} \\ \vdots & \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_3'' - \cot u f_3' + & 6 f_3 = \frac{1}{2} \sin u \\ f_5'' - \cot u f_5' + & 20 f_5 = 9 f_3 \end{aligned} \quad (\text{B})$$

$$\begin{aligned} f_{2v+3}'' - \cot u f_{2v+3}' + (2v+2)(2v+3) f_{2v+3} = & (2v+1)^2 f_{2v+1} \\ \vdots & \end{aligned}$$

$$v=0, 1, 2, \dots$$

Jede Gesamtlösung der beiden Teilsysteme ist nachträglich noch daraufhin zu untersuchen, ob für die über  $K$  bestimmte Funktion  $\chi$  die Bedingung (11) erfüllt ist.

Wir berechnen jetzt spezielle Lösungen der Differentialgleichungssysteme. Wegen der Homogenität der ersten Gleichung des Systems (A) besteht die Möglichkeit

$$f_2 = f_4 = \dots = f_{2v+2} = \dots = 0$$

zu setzen.

Für das Teilsystem (B) ist eine Lösung durch die Funktionenfolge

$$f_{2v+3} = a_{2v+3} (\sin u)^{2v+3}$$

mit der Rekursion

$$a_{2v+3} = \frac{2v+1}{2v+3} a_{2v+1}, \quad a_3 = \frac{1}{6}$$

gegeben. Damit folgt für  $K$ :

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=2}^{\infty} \frac{1}{2\lambda-1} (\sin u \cdot \sin \psi)^{2\lambda-1}. \quad (12)$$

Setzt man diesen Ausdruck in (10) ein, so läßt sich durch Integration die Funktion  $\chi$  ermitteln. Im vorliegenden Fall erhalten wir

$$\chi = \frac{1}{2} \operatorname{arc cot} \left[ \cot 2u + \frac{\cot^2 \frac{1}{2} \psi}{\sin 2u} \right] \quad (13)$$

mit den partiellen Ableitungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi}{\partial \psi} = & \frac{\sin 2u \sin \psi}{4(1-\sin^2 \psi \sin^2 u)}, \quad \frac{\partial \chi}{\partial u} = \sin^2 \frac{\psi}{2} \\ & - \frac{\sin^2 \psi \sin^2 u \cos \psi}{2(1-\sin^2 \psi \sin^2 u)}. \end{aligned}$$

Man sieht diesen Ausdrücken unmittelbar an, daß sie für  $u=\pi/2, \psi=\pi/2$  (Fall des symmetrischen Kreisels) singulär werden. Das bedeutet, daß unsere Forderung (11) durch die vorliegende Lösung nicht im ganzen Bereich der Variablen erfüllt ist. Wie schon in (II) gezeigt wurde, liefert das in (13) ermittelte  $\chi$  für das körpergebundene Koordinatensystem gerade die Hauptträgheitsachsen. Die vorliegende Betrachtung zeigt also wiederum, daß diese kein geeignetes körpergebundenes Bezugssystem darstellen. Die Unbrauchbarkeit dieser Lösung ist mathematisch durch die Divergenz der Reihe (12) für  $K$  an der Stelle  $u=\psi=\pi/2$  bedingt. Es gelingt nicht, die Lösungsgesamtheit von (B) durch Mitnahme einer homogenen Lösung der ersten Zeile so abzuändern, daß diese Divergenz verschwindet. Wir müssen deshalb nichttriviale Lösungen des Teilsystems (A) hinzunehmen. Diese gewinnen wir durch Potenzreihenansatz in  $\sin u$  mit geradzahligen

gem Exponenten. Zwischen den Koeffizienten ergeben sich dann gewisse Rekursionsbeziehungen, welche jedoch die Lösung noch nicht eindeutig festlegen. Durch geeignete Rekursionsanfänge erhält man die Funktionenfolge

$$f_{2v+2} = -\frac{1}{2} \frac{1}{2v+2} (\sin u)^{2v+2}, \quad (14)$$

welche eine spezielle Lösung von (A) ist. Dann wird unter Hinzunahme der bereits vorhandenen Lösung für (B)

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=2}^{\infty} (-1)^{\lambda-1} \frac{1}{\lambda} (\sin u \cdot \sin \psi)^{\lambda}. \quad (15)$$

Man erkennt an diesem Ausdruck die Zweckmäßigkeit der Funktionenfolge (14). Im Gegensatz zur Reihe (12), welche für  $u=\psi=\pi/2$  divergiert, ist diese alternierende Potenzreihe für alle  $u, \psi$  konvergent.

Aus (15) erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi}{\partial \psi} &= -\frac{\cos u}{2(1+\sin \psi \sin u)}, \quad \frac{\partial \chi}{\partial u} = \sin^2 \frac{\psi}{2} \\ &\quad + \frac{\cos \psi \sin \psi \sin u}{2(1+\sin \psi \sin u)} \end{aligned} \quad (16)$$

und nach Integration

$$\chi = \frac{u}{2} - \arctan \left[ \tan \left( \frac{u}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \cdot \tan \left( \frac{\pi}{4} - \frac{\psi}{2} \right) \right]. \quad (17)$$

Diese Lösung ist im ganzen Bereich der Variablen stetig differenzierbar und genügt somit der Forderung (11).

Wir müssen jetzt noch die Klasse der zugehörigen Wellenfunktionen ermitteln. Dies geschieht über die Beziehung (9). Mit der obigen Lösung für  $\chi$  bekommen wir hieraus eine partielle Differentialgleichung erster Ordnung als Bestimmungsgleichung für  $\Phi_0$ :

$$-\cos u \cdot \sin \psi \frac{\partial \Phi_0}{\partial \psi} + \cos \psi \cdot \sin u \frac{\partial \Phi_0}{\partial u} = 0.$$

Diese Gleichung hat die allgemeine Lösung

$$\Phi_0 = \Phi_0(R, \sin u \cdot \sin \psi). \quad (18)$$

Wir stellen also fest, daß für alle Wellenfunktionen dieses Typs innere und rotatorische Bewegung durch die in (17) ermittelte Funktion  $\chi$  spezifisch entkoppelt werden. Wellenfunktionen dieses Typs sind in (II) schon im Zusammenhang mit einer anderen Fragestellung diskutiert worden.

Da das in diesem Abschnitt beschriebene Lösungsverfahren zwangsläufig zur Bestimmung von  $\chi$  und der zugehörigen Klasse von Wellenfunktionen geführt hat, kann man schließen, daß diese Wellen-

funktionen die einzigen sind, für welche das Lösungsverfahren in dieser Form durchgeführt werden kann. Für irgendwelche Wellenfunktionen anderer Art kann die zu Beginn vorgenommene Aufspaltung der Differentialgleichung (7) in die beiden Teile (8) und (9) im allgemeinen nicht gemacht werden.

## 5. Das effektive Trägheitsmoment

Wir kehren nun zu unseren allgemeinen Überlegungen zurück. Das effektive Trägheitsmoment bezüglich der Flächennormalen wird mit Hilfe des entsprechenden Koeffizienten des Trägheitstensors aus  $H_2^*$  definiert:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} &= \int \left\{ \frac{1}{r^2 + \varrho^2} + B \right\} \Phi_0^2 \, d\tau \\ \text{mit} \quad B &= \left( \frac{\partial \chi}{\partial \varrho} \right)^2 + \left( \frac{\partial \chi}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{1}{r^2} + \frac{1}{\varrho^2} \right) \left( \frac{\partial \chi}{\partial u} - \frac{r^2}{r^2 + \varrho^2} \right)^2. \end{aligned}$$

Unter Verwendung des Vektorfeldes (3) läßt sich dieser Ausdruck in die folgende Form bringen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} &= \int \mathfrak{A} \operatorname{grad} \chi \, d\tau' + \int \frac{1}{\varrho^2} \left( 1 - \frac{\partial \chi}{\partial u} \right) \Phi_0^2 \, d\tau \\ &= \int \chi \mathfrak{A} \, dO - \int \chi \operatorname{div} \mathfrak{A} \, d\tau' + \int \frac{1}{\varrho^2} \left( 1 - \frac{\partial \chi}{\partial u} \right) \Phi_0^2 \, d\tau. \end{aligned}$$

Da für physikalisch sinnvolle Funktionen  $\chi$  am Rand des Integrationsgebiets  $\chi \mathfrak{A}$  verschwindet, haben wir im Fall der spezifischen Entkopplung wegen (5) schließlich

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} &= \int \frac{1}{\varrho^2} \left( 1 - \frac{\partial \chi}{\partial u} \right) \Phi_0^2 \, d\tau \\ &= \int \frac{1}{R^2 \cos^2 \frac{1}{2} \psi} \left( 1 - \frac{\partial \chi}{\partial u} \right) \Phi_0^2 \, \tilde{d}\tau. \end{aligned}$$

Für Wellenfunktionen der Form (16) ergibt sich mit  $\chi$  aus (15)

$$\frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} = \int \left\{ \frac{1}{R^2} \left[ 1 - \frac{\cos \psi \sin \psi \sin u}{2 \cos^2 \frac{1}{2} \psi (1 + \sin \psi \sin u)} \right] \right\} \Phi_0^2 \, \tilde{d}\tau.$$

Zur expliziten Ausrechnung verwenden wir speziell

$$\Phi_0^{(k)} = N_R N_{u, \psi} R^k$$

$$\cdot (\sin u \cdot \sin \psi)^{k/2} \exp \left\{ -\frac{\alpha}{2} (k+1) R^2 \right\}$$

( $k = 0, 1, 2, \dots$ ) mit den Normierungskonstanten

$$N_R = \sqrt{\frac{2[\alpha(k+1)]^{k+3}}{(k+3)}}, \quad N_{u, \psi} = \sqrt{\frac{k+2}{2\pi}}.$$

Für  $k \rightarrow \infty$  beschreibt diese Wellenfunktion wegen

$$\Phi_0^{(\infty)} = \delta \left( R - \sqrt{\frac{1}{\alpha}} \right) \cdot \delta \left( u - \frac{\pi}{2} \right) \cdot \delta \left( \psi - \frac{\pi}{2} \right)$$

einen starren symmetrischen Kreisel, d. h. im Fall gleicher Massen die Konfiguration eines gleichsei-

tigen Dreiecks. Mit abnehmenden Werten von  $k$  wird das Gebilde immer „weicher“, um für  $k \rightarrow 0$  die Dreiecksstruktur schließlich vollkommen zu verlieren.

Für das effektive Trägheitsmoment erhalten wir in Abhängigkeit von  $k$  den Ausdruck

$$\frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} = \alpha \frac{k+1}{k+2} \left\{ 1 + 2(k+2) \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{(s+k+2)(s+k+3)(s+k+4)} \right\},$$

der sich numerisch leicht auswerten läßt.

Wir haben damit das effektive Trägheitsmoment für ein quantenmechanisches Gebilde der betrachteten Form ermittelt. Der numerische Wert für  $\Theta_{\text{eff}}$  in Abhängigkeit von  $k$  ist in Abb. 1 durch Kurve A dargestellt. Als Einheit ist dabei der Mittelwert

$$\Theta = \langle (\varrho^2 + r^2) \rangle = \frac{1}{\alpha} \frac{k+3}{k+1}$$

verwendet worden, d. h. der übliche Ausdruck für das Trägheitsmoment. Man sieht, daß mit zunehmender Starrheit des Gebildes  $\Theta_{\text{eff}}$  sich dem als Einheit gewählten „normalen“ Mittelwert nähert.

Die vorliegenden exakten Ergebnisse erlauben uns auch eine Beurteilung der Leistungsfähigkeit von Variationsansätzen. Wir verwenden für die vor-

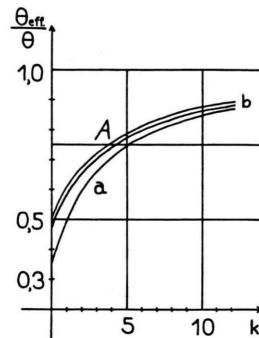


Abb. 1. Das effektive Trägheitsmoment eines Systems aus drei Massenpunkten für zunehmende Starrheit. Kurve A stellt die exakte Rechnung dar. Die Kurven a und b wurden mit Variationsansätzen gewonnen.

liegende Klasse von Wellenfunktionen die schon in (II) angegebenen Ansätze

$$\chi_a = C \cdot u, \quad \chi_b = \sin^2 \frac{\psi}{2} (u - u_0).$$

Für  $k=0$  bestätigen wir die in (II) angegebenen Zahlenwerte, für  $k \neq 0$  ergeben sich die Kurven a und b in Abb. 1. Man sieht, daß der Winkel  $\chi_b$ , welcher der in (I) eingeführten Schwerlinie entspricht, die exakten Ergebnisse bereits sehr gut wiedergibt.