

Zur exakten Behandlung von kollektiven Rotationen

Teil A: Theorie

HANNS RUDER

Institut für Theoretische Physik der Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen

(Z. Naturforsch. **28a**, 206–215 [1973]; eingegangen am 18. Oktober 1972)

Meinem verehrten Lehrer, Herrn Professor Dr. H. Volz, zu seinem 60. Geburtstag gewidmet

On the Exact Treatment of Collective Rotations
Part A: Theory

Basic in the treatment of collective rotations is the definition of a body-fixed coordinate system. A kinematical method is derived to obtain the Hamiltonian of a n-body problem for a given definition of the body-fixed system. From this exact Hamiltonian, a consequent perturbation expansion in terms of the total angular momentum leads to two exact expressions: one for the collective rotational energy which has to be added to the groundstate energy in this order of perturbation and a second one for the effective inertia tensor in the groundstate. The discussion of these results leads to two criteria how to define the best body-fixed coordinate system, namely a differential equation and a variational principle. The equivalence of both is shown.

Einleitung und Problemstellung

In zwei vorangegangenen Arbeiten^{1,2}, die im weiteren mit I und II zitiert werden, wurden für ein System von n Massenpunkten die Bedingungen für das Auftreten von kollektiven Rotationen untersucht. Dabei diente das Drei-Körper-Problem als Übungsobjekt. Es besitzt einerseits schon so viele Freiheitsgrade, daß man wesentliche Punkte daran diskutieren kann, die Hamilton-Form ist aber andererseits noch so einfach, daß die mathematische Behandlung übersichtlich bleibt. (Mit Hamilton-Form bezeichnen wir wie in I und II zusammenfassend den Hamilton-Operator sowie die Hamilton-Funktion unseres Systems, wo es uns auf eine Unterscheidung nicht ankommt). Die am Drei-Körper-Problem gewonnenen Erkenntnisse konnten dann qualitativ auf das n -Körper-Problem übertragen werden, ohne daß dabei die Gestalt der Hamilton-Form explizit bekannt war.

Der entscheidende Punkt war die Definition eines körpergebundenen Koordinatensystems ξ, η, ζ , dessen Lage relativ zum raumfesten Koordinatensystem X, Y, Z wie üblich mit den Euler'schen Winkeln α, β, γ beschrieben wird. Durch die Einführung der Eulerschen Winkel und der dazu kanonisch konjugierten Impulse zerfällt die Hamilton-Form, wie in I und II im Detail diskutiert wurde, in drei Bestandteile: $H = H_1 + H_k + H_2$. Dabei beschreibt H_1 die innere Bewegung des Systems; H_2 hat die Gestalt einer kollektiven Rotationsenergie

Sonderdruckanforderungen an das Institut für Theoretische Physik der Universität Erlangen-Nürnberg, D-8520 Erlangen, Glückstr. 6.

und H_k die einer Kopplung zwischen der inneren Bewegung und der kollektiven Rotation.

Die Definition des körpergebundenen Koordinatensystems beeinflußt nun in ganz charakteristischer Weise den Kopplungsterm H_k und den kollektiven Anteil H_2 . Der innere Anteil H_1 dagegen bleibt vollkommen unverändert. In I wurde allgemein gezeigt, daß, mit Ausnahme einiger Spezialfälle, kein körpergebundenes Koordinatensystem existiert, in dem der Kopplungsterm identisch verschwindet. Man kann aber im quantenmechanischen Fall, wie in II ausgeführt wurde, ein körpergebundenes Koordinatensystem finden, in dem der Kopplungsterm H_k in seiner Wirkung auf die spezielle Wellenfunktion Φ_0 des drehimpulsfreien Ausgangszustands verschwindet. Damit ist die Wirkung des Kopplungsterms für diese spezielle Ausgangswellenfunktion Φ_0 optimal beseitigt, eine Situation, die wir spezifische Entkopplung nennen: $H_k \Phi_0 = 0$. Die explizite Bestimmung dieses körpergebundenen Koordinatensystems bei bekannter Ausgangswellenfunktion Φ_0 läuft über die jetzt als Differentialgleichung für die gesuchten Euler'schen Winkel aufgefaßte Gleichung $H_k \Phi_0 = 0$. Allerdings bereitet die exakte Lösung dieses Problems bereits bei drei Teilchen erhebliche mathematische Schwierigkeiten. Sie dürfte im Falle von vielen Teilchen undurchführbar werden.

In II wurde die Äquivalenz dieser Differentialgleichung mit einem Variationsproblem gezeigt. Bei diesem Variationsproblem handelt es sich um den mit der drehimpulsfreien Ausgangswellenfunktion Φ_0 gebildeten Erwartungswert des kollektiven Anteils H_2 , das heißt, um die Rotationsenergie, die man ohne Berücksichtigung



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

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

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

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

des Kopplungsterms H_k erhalten würde. Diese muß bei der richtigen Wahl des körpergebundenen Koordinatensystems minimal werden, eine physikalisch unmittelbar anschauliche Forderung. Ein solches Variationsprinzip ist für Näherungsmethoden besser zugänglich. Man wird daher bei Problemen, bei denen eine exakte Behandlung aussichtslos erscheint, den durch das Variationsintegral über den kollektiven Anteil gegebenen Weg wählen. Man kann so, zumindest näherungsweise, dasjenige körpergebundene Koordinatensystem bestimmen, bei dem innere Bewegung und kollektive Rotation optimal entkoppelt sind. Die Bestimmung dieses „richtigen“ körpergebundenen Koordinatensystems liefert automatisch den Trägheitstensor der mit der Wellenfunktion Φ_0 beschriebenen Konfiguration des Systems.

Einen ganz anderen Zugang zu diesem Problem findet man mit Hilfe der Störungstheorie. Man betrachtet die den Gesamtdrehimpuls enthaltenden Glieder des Hamilton-Operators H_k und H_2 als Störterme. Dann kann man im Rahmen einer Störungsrechnung zweiter Ordnung nach dem Gesamtdrehimpuls L zeigen, daß man denjenigen Trägheitstensor bekommt, den die Konfiguration im Limes $L \rightarrow 0$ besitzt. Dieser Tensor würde also im Limes unendlich langsamer Rotation auftreten. In der Quantenmechanik ist der Drehimpuls gequantelt. Demzufolge hat bereits der niedrigste Anregungszustand der kollektiven Rotation bei gegebenem Trägheitsmoment eine endliche Energie. Diese Energie im Verhältnis zum nächsten Eigenwert von H_1 entscheidet, ob in diesem System überhaupt kollektive Rotationsbanden auftreten können. Rotationsbanden sind nur möglich, wenn die Rotationsenergien wesentlich kleiner sind als die Differenzen der Energieeigenwerte von H_1 . Man kann dann den kollektiven Anteil als kleine Störung von H_1 betrachten, und nur dann hat es einen Sinn, von einer Rotationsbande zu sprechen, die sich auf einem nahezu unveränderten Ausgangszustand der inneren Konfiguration aufbaut.

Es soll hier aber noch einmal betont werden, daß die Methode der spezifischen Entkopplung stets ein körpergebundenes Koordinatensystem liefert, in dem die Wirkung des Kopplungsterms H_1 auf die spezielle Ausgangswellenfunktion Φ_0 verschwindet. Diese Eigenschaft ist unabhängig davon, ob Rotationsbanden auftreten oder nicht. Ebenso unabhängig davon sind die durch dieses Koordinatensystem und die Wellenfunktion Φ_0 bestimmten Trägheitsmomente der n -Teilchen-Konfiguration. Diese Trägheitsmomente würden sich in dem nur formal möglichen Limes $L \rightarrow 0$ ergeben. Inwieweit man diese Werte aus Rotationsbanden experimentell bestimmen kann, hängt von den oben diskutierten Energiebedingungen ab. Daß in der Natur diese Energiebedingungen in vielen Fällen ausgezeichnet erfüllt sind, zeigen

die in der Molekül- und Kernphysik mit großer Genauigkeit auftretenden Rotationsbanden.

Wir wollen nun das in I und II am Drei-Körper-Problem durchgeführte und für das Viel-Körper-Problem angedeutete Verfahren für n Teilchen explizit behandeln. Im Abschnitt A wird die Theorie weiterentwickelt, im Abschnitt B werden einige der vielen Anwendungsmöglichkeiten durchgerechnet und die verschiedenen Ansätze kritisch auf ihre Brauchbarkeit untersucht.

1. Der Hamilton-Operator des n -Teilchen-Systems

Wir betrachten n Massenpunkte m_i , zwischen denen nur innere Kräfte wirken sollen, in einem raumfesten Koordinatensystem X, Y, Z . Da dann der Gesamtgeschwerpunkt nur eine gleichförmige Translation machen kann, die uns als kollektive Bewegung nicht interessiert, nehmen wir o. B. d. A. an, daß er ruht, und legen ihn in den Ursprung des raumfesten Koordinatensystems. Der Übergang von den $3n$ Koordinaten zu den 3 Schwerpunktkoordinaten und den $3n-3$ Relativkoordinaten ist besonders einfach, wenn man das sogenannte reduzierte System einführt, das aus $n-1$ reduzierten Massen μ_i besteht, und wenn man für die Relativkoordinaten die Jacobi-Koordinaten wählt. Die verschiedenen Möglichkeiten, die es dafür gibt, wurden in einer Arbeit von BÜTTNER und RUDER³ diskutiert. Wir wählen hier die in Abb. 1 dargestellte Reduktionsart.

Die potentielle Energie ist in H_1 enthalten. Sie bewirkt den inneren Zusammenhang des Systems. Wenn wir annehmen, daß sich die drehimpulsfreie Grundzustandskonfiguration bei einer kollektiven Rotation nicht wesentlich verändert, müssen wir bei der Untersuchung solcher kollektiver Rotationen hauptsächlich den Operator der kinetischen Energie betrachten.

Die kinetische Energie des Systems relativ zum Schwerpunkt T_{rel} ist gleich der kinetischen Energie der Massen μ_i im reduzierten System. Die reduzierten Massen μ_i hängen bei dieser speziellen Reduktion mit den wirklichen Massen m_i zusammen in der Form

$$\mu_i = m_{i+1} \left(\sum_{j=1}^i m_j \right) / \left(\sum_{j=1}^{i+1} m_j \right). \quad (1)$$

Für den Fall, daß alle Massen $m_i = m$ sind, wird daraus

$$\mu_i = m_i (i/(i+1)). \quad (2)$$

Bezeichnen wir die zu den Koordinaten ϱ_i kanonisch konjugierten Impulse mit p_i , dann wird

$$T_{\text{rel}} = \sum_{i=1}^{n-1} (p_i)^2 / (2 \mu_i). \quad (3)$$

Beschreibt man die Lage der einzelnen reduzierten Massen μ_i vom raumfesten Koordinatensystem aus mit den üblichen Polarkoordinaten und ersetzt noch die zu

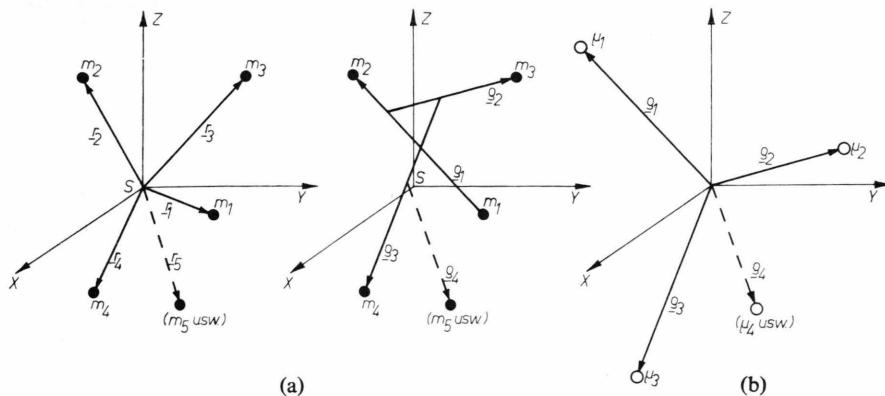


Abb. 1. Die Einführung der Relativkoordinaten (a) und der Übergang zum reduzierten System (b).

den Polarwinkeln kanonisch konjugierten Impulse durch die Komponenten der entsprechenden Drehimpulse der Massen μ_i , so erhält man für jedes $(p_i)^2$ den bekannten Ausdruck

$$(p_i)^2 = p_{\varrho i}^2 + L_i^2/\varrho_i^2.$$

Der Ausdruck für T_{rel} schreibt sich damit

$$T_{\text{rel}} = \sum_{i=1}^{n-1} (p_{\varrho i}^2/(2\mu_i) + L_i^2/(2\mu_i\varrho_i^2)). \quad (4)$$

Will man nun einen kollektiven Rotationsanteil explizit bekommen, dann muß man, analog zur kollektiven Translation des Schwerpunktes, anstelle der 3n-3 Relativkoordinaten 3 kollektive oder äußere Koordinaten q_2 und 3n-6 innere Koordinaten q_1 einführen. Die 3 äußeren Koordinaten beschreiben die Orientierung der Punkt konfiguration im Raum, die 3n-6 inneren Koordinaten die innere Struktur des Systems. Für die 3 äußeren Koordinaten wählt man zweckmäßigerweise Eulersche Winkel, die die Lage eines körpergebundenen Koordinatensystems relativ zum raumfesten X-Y-Z-System angeben. Diese Eulerschen Winkel sollen die Koordinaten werden, welche die kollektiven Rotationen des Systems beschreiben. Die Definition des körpergebundenen Koordinatensystems ist daher absolut entscheidend. Von der mathematischen Formulierung dieses Gedankens sind wir aber noch weit entfernt. Wir haben noch nicht einmal die inneren Koordinaten q_1 definiert. Dieses Problem ist erheblich einfacher. Man löst es am übersichtlichsten durch die Einführung eines körpergebundenen Hilfssystems ξ', η', ζ' . Für die Definition seiner Lage relativ zu den Massenpunkten ist es am bequemsten, wenn man dazu möglichst wenige Massen verwendet. Es genügen 3 wirkliche bzw. 2 reduzierte Massen (Die Anfangspunkte vom raumfesten und von den körpergebundenen Koordinatensystemen fallen natürlich immer zusammen, denn sie liegen im Gesamtschwerpunkt.)

Im einzelnen kann man etwa so vorgehen: Man legt die ξ' -Achse in die ϱ_1 -Richtung und die ξ' -Achse in die von den Vektoren ϱ_1 und ϱ_2 aufgespannte Ebene. Die η' -Achse wird dann die Flächennormale dieser Ebene. In diesem Hilfssystem, das mit den Eulerschen Winkel α', β', γ' bezüglich des raumfesten Systems beschrieben wird, können wir nun die genaue Definition der 3n-6 inneren Koordinaten q_1 angeben. Wir wählen einfach für die reduzierten Massen μ_i die normalen Polarkoordinaten im $\xi'-\eta'-\zeta'$ -System, also

$$\begin{aligned} \mu_1(\varrho_1, 0, 0), \mu_2(\varrho_2, v_2, 0), \mu_3(\varrho_3, v_3, \delta_3), \dots, \\ \mu_{n-1}(\varrho_{n-1}, v_{n-1}, \delta_{n-1}). \end{aligned} \quad (5)$$

Die Einführung dieses Hilfssystems ermöglicht aber nicht nur die genaue Definition der inneren Koordinaten, sondern dient auch als Ausgangspunkt für die Suche nach dem endgültigen körpergebundenen Koordinatensystem. Die Lage dieses Systems relativ zu den Massenpunkten ist durch die Bedingung der spezifischen Entkopplung gegeben. Es liegt daher in einer ganz bestimmten, uns jedoch noch unbekannten Weise in der Punkt konfiguration. Seine Verdrehung gegenüber unserem Hilfssystem hängt nur von den inneren Koordinaten ab. Die Eulerschen Winkel zwischen den beiden Systemen nennen wir φ, ϑ, χ . Sie sind nur Funktionen von den inneren Koordinaten.

Die Eulerschen Winkel α, β, γ zwischen dem raumfesten und dem $\xi-\eta-\zeta$ -System sind unsere endgültigen kollektiven Koordinaten. Zusammen mit den 3n-6 inneren Koordinaten aus (5) beschreiben sie die Lage der n-1 reduzierten Massen. Der Kopplungsterm H_k und der kollektive Anteil H_2 enthalten die partiellen Ableitungen von φ, ϑ, χ nach allen inneren Koordinaten. Es ergeben sich hieraus bei bekannter Grundzustandswellenfunktion die Differentialgleichungen bzw. das dazu äquivalente Variationsproblem zur Bestimmung der Funktionen φ, ϑ, χ . Mit der Lösung dieser Aufgabe haben wir das für die Beschreibung von kollektiven Rotationen

richtige körpergebundene Koordinatensystem gefunden. Die zu den Eulerschen Winkeln α, β, γ kanonisch konjugierten Impulse $p_\alpha, p_\beta, p_\gamma$ lassen sich durch die Komponenten des Gesamtdrehimpulses des Systems ausdrücken.

Die Bestimmung des Hamilton-Operators als Funktion der partiellen Ableitungen von φ, ϑ, χ nach den inneren Koordinaten wird bei Systemen mit mehr als 3 Teilchen mathematisch sehr aufwendig, wenn man sie auf dem Wege über eine Koordinaten-Transformation ausführt. Der Hamilton-Operator lässt sich viel eleganter mit Hilfe von infinitesimalen Verrückungen gewinnen. Die partiellen Ableitungen von φ, ϑ, χ sagen ja gerade aus, um wieviel sich die Lage des körpergebundenen Koordinatensystems ξ, η, ζ ändert, wenn man eine Masse μ_1 infinitesimal verschiebt. Bevor wir diese Überlegungen für unseren allgemeinen recht komplizierten Fall verwerten, soll das Prinzip an einem sehr einfachen und übersichtlichen Beispiel genauer erläutert werden.

Eindimensionales Modell

Wir betrachten ein eindimensionales System von 2 Massenpunkten ohne äußere Kräfte, wie es in Abb. 2 dargestellt ist. Die Bezeichnungen sind ganz analog zu den bisherigen gewählt.

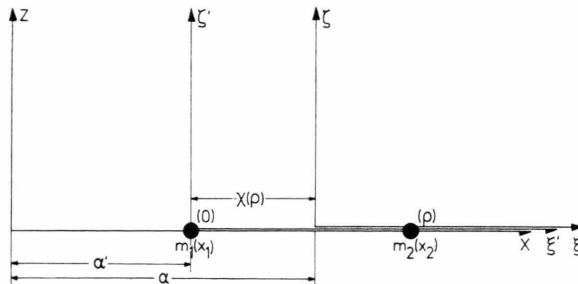


Abb. 2. Eindimensionales Beispiel zur Erläuterung der Umrechnungsmethode der Hamilton-Form.

x_1 und x_2 sind die Koordinaten der beiden Massen m_1 und m_2 im raumfesten X - Z -System, 0 und ϱ ihre Koordinaten im körpergebundenen Hilfssystem ξ' , ζ' . Der Abstand $\varrho = x_2 - x_1$ wird die innere Koordinate und α' , als Verbindung des X - Z - mit dem ξ' - ζ' -System, die vorläufige kollektive Koordinate. Das endgültige körpergebundene System ξ, ζ ist mit dem ξ' - ζ' -System durch die zunächst noch unbekannte Funktion $\chi(\varrho)$ der inneren Koordinate verknüpft. Es wird relativ zum X - Z -System durch die Koordinate $\alpha = \alpha' + \chi(\varrho)$ beschrieben. Wir wollen nun die Hamilton-Form in den Koordinaten ϱ, α nicht mit einer Koordinatentransformation aus

$$H(x_1, x_2, p_1, p_2) = (1/2 m_1) p_1^2 + (1/2 m_2) p_2^2 + V(x_2 - x_1) \quad (6)$$

berechnen, sondern mit Hilfe von infinitesimalen Verrückungen. Eine infinitesimale Verrückung von m_1 um δx_1 bewirkt erstens eine Veränderung von ϱ um $\delta \varrho = -\delta x_1$ und zweitens eine Veränderung des körpergebundenen ξ - ζ -Systems um $\delta \alpha = b_1(\varrho) \delta x_1$, wobei die Funktion $b_1(\varrho)$ von der Definition des ξ - ζ -Systems abhängt. Der kanonische Impuls p_1 wird daher (vgl. NÄPFEL, RUDER, VOLZ⁴):

$$p_1 = -p_\varrho + b_1(\varrho) p_\alpha$$

und analog wegen $\delta \varrho = \delta x_2$

$$p_2 = +p_\varrho + b_2(\varrho) p_\alpha. \quad (7)$$

Dabei ist p_ϱ der „innere“ Impuls (vom ξ - ζ -System aus gesehen) und p_α der kollektive Gesamtimpuls, da eine infinitesimale Verrückung des Systems als Ganzes nur α ändert. Setzt man die Beziehungen (7) in die Hamilton-Form (6) ein, so erhält man

$$\begin{aligned} H(\varrho, \alpha, p_\varrho, p_\alpha) = & ([1/2 m_1] + [1/2 m_2]) p_\varrho^2 \\ & + (-[b_1/m_1] + [b_2/m_2]) p_\varrho p_\alpha + ([b_1^2/2 m_1] \\ & + [b_2^2/2 m_2]) p_\alpha^2. \end{aligned}$$

Die Koeffizienten $b_1(\varrho) = \delta \alpha / \delta x_1$ bzw. $b_2(\varrho) = \delta \alpha / \delta x_2$ können bei gegebener Definition des ξ - ζ -Systems sofort mit rein kinematischen Betrachtungen bestimmt werden. Auch ihr Zusammenhang mit $\chi(\varrho)$ ergibt sich direkt aus der Zeichnung. Man erhält für eine infinitesimale Verrückung von m_1 um δx_1

$$\begin{aligned} \delta \alpha &= \delta x_1 + (\partial \chi(\varrho) / \partial \varrho) \delta \varrho = (1 - [\partial \chi / \partial \varrho]) \delta x_1; \\ b_1 &= 1 - (\partial \chi / \partial \varrho) \end{aligned} \quad (8)$$

und für eine infinitesimale Verrückung von m_2 um δx_2

$$\delta \alpha = (\partial \chi / \partial \varrho) \delta \varrho = (\partial \chi / \partial \varrho) \delta x_2; \quad b_2 = (\partial \chi / \partial \varrho). \quad (8)$$

Damit hat man die Hamilton-Form als Funktion von ϱ, p_ϱ und α, p_α gewonnen.

Setzt man (8) noch in (7) ein und addiert die beiden Gleichungen, so erhält man $p_1 + p_2 = p_\alpha$, woraus man wiederum ersieht, daß p_α für jede beliebige Funktion $\chi(\varrho)$ der Gesamtimpuls ist. In unserem Beispiel liefert die Methode der spezifischen Entkopplung natürlich den normalen Schwerpunkt für den Ursprung des ξ - ζ -Systems. Dies wurde in II, Anhang 1 für n Massenpunkte explizit vorgeführt. Soweit dieses einfache Beispiel.

Wir wenden uns jetzt wieder unserem allgemeinen Problem zu, dessen kinetische Energie in (4) gegeben ist. Wir nehmen an, daß das endgültige körpergebundene Koordinatensystem ξ, η, ζ in eindeutiger Weise mit der Punktkonfiguration verknüpft ist. Als innere Koordinaten behalten wir die unter (5) angegebenen bei. Wir betrachten die einzelnen Operatoren in dem Ausdruck (4) für die kinetische Energie, der von der Definition des körpergebundenen Koordinatensystems unabhängig ist:

$p_{\varrho i}$ ist der zu ϱ_i kanonisch konjugierte Impuls, seine genaue Gestalt für einen gegebenen Satz von Koordinaten erhält man, indem man die Koordinatenänderungen bestimmt, die bei einer infinitesimalen Verrückung von ϱ_i auftreten. Diese Koordinatenänderungen wirken auf zwei verschiedene Arten, genau wie in unserem eindimensionalen Beispiel. Einmal ändert sich die innere Koordinate ϱ_i , zum zweiten ändert aber auch das körpergebundene ξ - η - ζ -System relativ zum raumfesten X - Y - Z -System seine Lage, da es mit der sich ändernden Konfiguration verknüpft ist. Die Änderung einer inneren Koordinate bewirkt also automatisch eine Änderung der Eulerschen Winkel. Da es sich dabei um eine infinitesimale Drehung des ξ - η - ζ -Systems handelt, kann sie durch die körpergebundenen Komponenten des Gesamtdrehimpulses L_ξ , L_η , L_ζ mit passend gewählten Koeffizienten beschrieben werden. Der kanonische Impuls $p_{\varrho i}$ schreibt sich damit in den Koordinaten α , β , γ und q_1

$$p_{\varrho i} = p'_{\varrho i} + b_{i\xi} L_\xi + b_{i\eta} L_\eta + b_{i\zeta} L_\zeta. \quad (9a)$$

Dabei ist $p'_{\varrho i}$ der Impuls bzw. quantenmechanisch der Operator, der sich aus einer infinitesimalen Veränderung der inneren Koordinate ϱ_i allein bestimmt, also quantenmechanisch $\hbar/i \cdot \partial/\partial \varrho_i$. Anschaulich ist $p'_{\varrho i}$ der vom körpergebundenen ξ - η - ζ -System aus gemessene „innere“ Radialimpuls, der hier eben nicht identisch ist mit dem zu ϱ_i kanonisch konjugierten Impuls $p_{\varrho i}$. Die Operatoren L_ξ , L_η , L_ζ enthalten nur die Eulerschen Winkel α , β , γ und partielle Ableitungen nach diesen. Ihre funktionale Form ist allein durch die Definition von α , β , γ festgelegt. Die Koeffizienten $b_{i\xi}, b_{i\eta}, b_{i\zeta}$ hängen nur von den inneren Koordinaten q_1 ab. Sie geben an, um welchen infinitesimalen Winkel $\delta\Phi_\xi$ (bzw. $\delta\Phi_\eta$, $\delta\Phi_\zeta$) sich das körpergebundene ξ - η - ζ -System um die ξ - (bzw. η - und ζ -)Achse auf Grund seiner Definition verdreht, wenn sich ϱ_i um $\delta\varrho_i$ ändert, also

$$b_{i\xi} = \delta\Phi_\xi/\delta\varrho_i, \quad b_{i\eta} = \delta\Phi_\eta/\delta\varrho_i, \quad b_{i\zeta} = \delta\Phi_\zeta/\delta\varrho_i. \quad (10)$$

(Man kann die $b_{i\xi}, b_{i\eta}, b_{i\zeta}$ natürlich auch nach der üblichen Methode mit Hilfe einer Koordinatentransformation bestimmen: Die $b_{i\xi}, b_{i\eta}, b_{i\zeta}$ hängen mit den Eulerschen Winkeln φ , ϑ , χ (die das ξ' - η' - ζ' -System mit dem ξ - η - ζ -System verbinden) und deren partiellen Ableitungen nach den inneren Koordinaten zusammen. Nach längerer, aber elementarer Rechnung erhält man:

$$\begin{aligned} p_{\varrho i} = p'_{\varrho i} &+ (-\sin \vartheta \cos \chi [\partial\varphi/\partial\varrho_i] + \sin \chi [\partial\vartheta/\partial\varrho_i]) L_\xi \\ &+ (\sin \vartheta \sin \chi [\partial\varphi/\partial\varrho_i] + \cos \chi [\partial\vartheta/\partial\varrho_i]) L_\eta \\ &+ (\cos \vartheta [\partial\varphi/\partial\varrho_i] + [\partial\chi/\partial\varrho_i]) L_\zeta. \end{aligned} \quad (9b)$$

Man muß also bei der Methode, die zu (9b) führt, die Funktionen φ , ϑ , χ erst aus der Definition des ξ - η - ζ -Systems bestimmen und dann deren gesamte partielle Ableitungen nach allen inneren Koordinaten ausrechnen, um die $b_{i\xi}, b_{i\eta}, b_{i\zeta}$ zu bekommen. Bei der Methode, die

zur Gl. (9a) führt, dagegen ergeben sich die $b_{i\xi}, b_{i\eta}, b_{i\zeta}$ direkt aus einfachen kinematischen Betrachtungen. (Wie vorteilhaft das im einzelnen ist, wird sich später bei der Anwendung im Teil B noch sehr viel deutlicher zeigen.)

Unabhängig von der Definition des körpergebundenen Koordinatensystems lassen sich für die $b_{i\xi}, b_{i\eta}, b_{i\zeta}$ Bedingungsgleichungen ableiten. Die Lage des ξ - η - ζ -Systems kann nämlich nicht von der absoluten Größe der Teilchenabstände abhängen. Daher müssen bei einer infinitesimalen Verrückung, die das System um $\delta\epsilon$ ähnlich vergrößert oder verkleinert, die Faktoren bei L_ξ , L_η , L_ζ Null sein. Eine solche infinitesimale Veränderung wird durch $\sum_i \varrho_i \cdot \delta\epsilon \cdot p_{\varrho i}$ beschrieben. Die $b_{i\xi}, b_{i\eta}, b_{i\zeta}$ müssen also die Beziehungen

$$\sum_{i=1}^{n-1} \varrho_i b_{i\xi} = 0, \quad \sum_{i=1}^{n-1} \varrho_i b_{i\eta} = 0, \quad \sum_{i=1}^{n-1} \varrho_i b_{i\zeta} = 0 \quad (11)$$

erfüllen.

Als nächstes bestimmen wir, vollkommen analog zu den obigen Betrachtungen, die auf die ξ - η - ζ -Achsen bezogenen Komponenten des gesamten im raumfesten System gemessenen Drehimpulses der einzelnen reduzierten Massen. Dazu gehen wir wieder davon aus, daß beispielsweise die Komponente $L_{i\xi}$ sich aus einer infinitesimalen Drehung der Masse μ_i um die im Moment als fest gedachte ξ -Achse um den Winkel $\delta\Phi_{i\xi}$ ermitteln läßt. Eine solche Drehung bewirkt wieder zweierlei. Einmal wird μ_i relativ zum ξ - η - ζ -System um $\delta\Phi_{i\xi}$ verdreht, wobei sich nur innere Koordinaten ändern und woraus ein „innerer“ Drehimpuls $L'_{i\xi}$ folgt. Zum zweiten verdreht sich dabei auch das ξ - η - ζ -System selbst, was man durch die 3 infinitesimalen Drehungen $\delta\Phi_\xi$, $\delta\Phi_\eta$, $\delta\Phi_\zeta$ um die entsprechenden Achsen beschreibt. Es wird also

$$L_{i\xi} = L'_{i\xi} + a_{i\xi\xi} L_\xi + a_{i\xi\eta} L_\eta + a_{i\xi\zeta} L_\zeta \quad (12)$$

entsprechend für $L_{i\eta}$ und $L_{i\zeta}$.

$L'_{i\xi}$ (bzw. $L'_{i\eta}$) sind die körpergebundenen Komponenten desjenigen Drehimpulses, den man für μ_i vom körpergebundenen ξ - η - ζ -System aus beobachtet. Die genaue Gestalt von $L'_{i\xi}$ usw. ergibt sich aus der Änderung der inneren Koordinaten bei der entsprechenden infinitesimalen Drehung. Für unsere inneren Koordinaten erhalten wir für die zunächst noch auf die ξ - η - ζ -Achsen bezogenen Komponenten des „inneren“ Drehimpulses $L'_{i\xi'}$, $L'_{i\eta'}$, $L'_{i\zeta'}$:

$$\begin{aligned} L'_{i\xi'} &= -\sum_{i=2}^{n-1} L'_{i\xi}, \quad L'_{i\eta'} = -\sum_{i=2}^{n-1} L'_{i\eta}, \quad L'_{i\zeta'} = 0; \\ L'_{2\xi'} &= \cot v_2 \sum_{i=3}^{n-1} L'_{i\xi}, \quad L'_{2\eta'} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial v_2}, \\ L'_{2\zeta'} &= -\sum_{i=3}^{n-1} L'_{i\zeta}; \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} L'_{i\xi'} &= -\sin \delta_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial v_i} - \cos \delta_i \cot v_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \delta_i} \\ L'_{in'} &= \cos \delta_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial v_i} - \sin \delta_i \cot v_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \delta_i} \\ L'_{i\xi'} &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \delta_i}, \quad i = 3, \dots, n-1 \end{aligned} \quad (13)$$

In (12) treten die auf die ξ - η - ζ -Achsen bezogenen Komponenten auf. Wir erhalten sie aus den in (13) angegebenen Komponenten mit Hilfe der bekannten Drehmatrix, die hier die Eulerschen Winkel φ , ϑ , χ enthält.

$a_{i\xi\xi}$ usw. ist das Verhältnis der Verdrehung des ξ - η - ζ -Systems zur Verdrehung des i -ten Teilchens, also:

$$\begin{aligned} a_{i\xi\xi} &= \frac{\delta \Phi \xi}{\delta \Phi_i \xi}, \quad a_{i\xi\eta} = \frac{\delta \Phi \eta}{\delta \Phi_i \xi}, \quad a_{i\xi\zeta} = \frac{\delta \Phi \zeta}{\delta \Phi_i \xi}, \\ a_{in\xi} &= \frac{\delta \Phi \xi}{\delta \Phi_i \eta}, \quad a_{in\eta} = \frac{\delta \Phi \eta}{\delta \Phi_i \eta}, \quad a_{in\zeta} = \frac{\delta \Phi \zeta}{\delta \Phi_i \eta}, \\ a_{i\xi\zeta} &= \frac{\delta \Phi \xi}{\delta \Phi_i \zeta}, \quad a_{i\xi\eta} = \frac{\delta \Phi \eta}{\delta \Phi_i \zeta}, \quad a_{i\xi\zeta} = \frac{\delta \Phi \zeta}{\delta \Phi_i \zeta}. \end{aligned} \quad (14)$$

Diese Quotienten können wieder rein kinematisch aus der Definition des ξ - η - ζ -Systems bestimmt werden.

Man stellt sofort fest, daß gilt

$$\sum_{i=1}^{n-1} L'_{i\xi'} = 0, \quad \sum_{i=1}^{n-1} L'_{in'} = 0, \quad \sum_{i=1}^{n-1} L'_{i\xi'} = 0,$$

und damit natürlich auch

$$\sum_{i=1}^{n-1} L'_{i\xi} = 0, \quad \sum_{i=1}^{n-1} L'_{in} = 0, \quad \sum_{i=1}^{n-1} L'_{i\xi} = 0,$$

wie es sein muß, da bei einer infinitesimalen Verdrehung aller Teilchen gemeinsam sich keine innere Koordinate ändert. Anschaulich heißt das, daß der drehimpulsfreie Ausgangszustand bei kollektiver Rotation, vom ξ - η - ζ -System aus betrachtet, weiterhin den „inneren“ Gesamt-drehimpuls Null besitzt. Wegen (15) erhalten wir durch Aufsummation von $L_{i\xi}$ (bzw. L_{in} und $L_{i\xi}$) aus den Gln. (12) über i wieder Bedingungen, die für jede Definition des ξ - η - ζ -Systems gelten müssen:

$$\sum_{i=1}^{n-1} a_{i\xi\xi} = 1, \quad \sum_{i=1}^{n-1} a_{i\xi\eta} = 0, \quad \sum_{i=1}^{n-1} a_{i\xi\zeta} = 0 \text{ usw.} \quad (16)$$

Wir können nun die Beziehungen für $p_{\varrho i}$ und L_i (9a und 12) in den Ausdruck für die kinetische Energie (4) einsetzen und erhalten dann T_{rel} als Funktion der $a_{i\xi\xi}$, $b_{i\xi}$ usw. Betrachten wir zuerst den Fall der klassischen Mechanik, dann müssen wir nur in (13) für $\hbar/i \cdot \partial/\partial q_i$ den zur Koordinate q_i kanonischen Impuls p_i setzen. Das ist auch bei krummlinigen Koordinaten richtig, wenn es sich um lineare Ausdrücke handelt, wie von NÄPPEL, RUDER und VOLZ⁴ gezeigt wurde. Die Größen

$p'_{\varrho i}$ und $L'_{i\xi}$ usw. sind dann keine Operatoren mehr, wir können die quadratischen Ausdrücke einfach ausrechnen und erhalten:

$$\begin{aligned} H_{\text{rel}} &= T_{\text{rel}} + V(\{q_1\}) \\ &= \sum_{i=1}^{n-1} (1/2 \mu_i) (p'_{\varrho i}^2 + [1/\varrho_i^2] L_i'^2) + V(\{q_1\}) \\ &\quad + \mathfrak{A} \cdot \mathbf{L} + 1/2 \mathbf{L} \hat{\Theta}^{-1} \mathbf{L} \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } \mathfrak{A}_\xi &= \sum_{i=1}^{n-1} (1/\mu_i) \{ b_{i\xi} p'_{\varrho i} + (1/\varrho_i^2) (a_{i\xi\xi} L'_{i\xi} + a_{in\xi} L'_{in} \\ &\quad + a_{i\xi\zeta} L'_{i\xi}) \} \end{aligned} \quad (18)$$

entsprechend für \mathfrak{A}_η und \mathfrak{A}_ζ :

$$\begin{aligned} (\hat{\Theta}^{-1})_{\xi\xi} &= \sum_{i=1}^{n-1} (1/\mu_i) \{ b_{i\xi}^2 + (1/\varrho_i^2) (a_{i\xi\xi}^2 + a_{in\xi}^2 \\ &\quad + a_{i\xi\zeta}^2) \} \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} (\hat{\Theta}^{-1})_{\xi\eta} &= \sum_{i=1}^{n-1} (1/\mu_i) \{ b_{i\xi} b_{in} + (1/\varrho_i^2) (a_{i\xi\xi} a_{i\xi\eta} \\ &\quad + a_{in\xi} a_{in\eta} + a_{i\xi\zeta} a_{i\xi\eta}) \} \end{aligned}$$

entsprechend für die anderen Komponenten von $\hat{\Theta}^{-1}$.

Dabei sind die auftretenden Glieder schon so zusammengefaßt, daß die beiden ersten Summanden nur innere Koordinaten enthalten und H_1 darstellen. Der dritte Summand enthält alle in \mathbf{L} linearen Glieder, ist also unser H_k aus II, während der vierte Summand eine quadratische Form in den körpergebundenen Drehimpulskomponenten ist und somit H_2 entspricht.

Quantenmechanisch sieht der Hamilton-Operator im Prinzip genauso aus, an einigen Stellen ergeben sich aber doch Unterschiede. Einmal haben die krummlinigen Koordinaten zur Folge, daß das Volumenelement des Konfigurationsraums Funktionen der Koordinaten enthält, und dadurch treten im Hamilton-Operator neben zweiten auch erste Ableitungen auf. So ist zu ersetzen $p'_{\varrho i}^2 \Rightarrow -\hbar^2 ([\partial^2/\partial \varrho_i^2] + [2/\varrho_i] [\partial/\partial \varrho_i])$, und zu den $L_i'^2$ kommt ein Glied der Form $-\hbar^2 \cot v_i (\partial/\partial v_i)$ hinzu. Außerdem ist bei unserer speziellen Wahl der inneren Koordinaten $L_i'^2$ gesondert zu behandeln. Alle diese Punkte wurden in den zitierten Arbeiten^{3, 4} ausführlich diskutiert. Für das weitere sind diese Einzelheiten nicht wichtig, da wir von dem Operator H_1 lediglich benutzen, daß er nur von den inneren Koordinaten q_1 abhängt und für jedes körpergebundene ξ - η - ζ -System dieselbe Gestalt hat.

Etwas anders verhält es sich beim Kopplungsterm H_k . Hier treten beim Übergang von der klassischen Hamilton-Funktion zum Hamilton-Operator einige Besonderheiten auf, die kurz diskutiert werden sollen. Die in H_k zusammengefaßten Glieder sind definitionsgemäß linear in den Komponenten des Gesamtdrehimpulses. Das sind zunächst die gemischten Glieder, die beim Qua-

drienen der linearen Ausdrücke (9a) für den Radialimpuls und (12) für den Drehimpuls der einzelnen reduzierten Massen μ_i entstehen. Die $p'_{\varrho i}$ und die $L'_{i\xi, n, \zeta}$ sind Differentialoperatoren nach den inneren Koordinaten und wirken auf die $b_{i\xi}$ und $a_{i\xi\xi}$ usw. Man bekommt daher erstens Glieder der Gestalt $b_{i\xi} p'_{\varrho i} L_\xi$ und $a_{i\xi\xi} \cdot L'_{i\xi} \cdot L_\xi$ usw., bei denen die Operatoren über die Funktionen $b_{i\xi}$ und $a_{i\xi\xi}$ usw. hinweggezogen worden sind. Zum zweiten erhält man Glieder, bei denen die Operatoren $p'_{\varrho i}$ und $L'_{i\xi, n, \zeta}$ auf die Funktionen $b_{i\xi}$ und $a_{i\xi\xi}$ gewirkt haben, also Glieder der Gestalt $(p'_{\varrho i} b_{i\xi}) L_\xi$ und $(L'_{i\xi} a_{i\xi\xi}) L_\xi$. Diese Faktoren bei den Komponenten des Gesamtdrehimpulses sind keine Differentialoperatoren nach den inneren Koordinaten mehr, sondern nur noch Funktionen von ihnen. Außerdem treten in H_k Terme auf, die bei der Ersetzung der linearen Operatoren aus H_1 durch (9a) und (12) entstehen. Auch diese Terme sind keine Operatoren, sondern nur Funktionen von den inneren Koordinaten und haben beispielsweise die Form $\hbar/i \cdot 1/\varrho_i \cdot b_{i\xi}$. Die Ursache für diese Glieder ist letzten Endes die Abhängigkeit der Funktionaldeterminante von den inneren Koordinaten^{3, 4} (vergleiche auch Anhang 1). Diese im Kopplungsterm der klassischen Hamilton-Funktion nicht vorhandenen Glieder machen den quantenmechanischen Kopplungsterm hermitisch. Den Beweis findet man in Anhang 1 (Anhang 1 in Teil B).

Der kollektive Teil H_2 sieht quantenmechanisch genauso aus wie klassisch, da die L_ξ , L_n , L_ζ nur äußere und die Funktionen $b_{i\xi}$, $a_{i\xi\xi}$ usw. nur innere Koordinaten enthalten. Wir können daher beim Quadrieren die L_ξ , L_n , L_ζ , auch wenn sie Operatoren sind, über die $b_{i\xi}$, $a_{i\xi\xi}$ usw. hinwegschieben.

Die Hamilton-Form (17), vor allem natürlich ihr kollektiver Anteil H_2 , ist der Ausgangspunkt für unsere weiteren Betrachtungen. Es soll noch einmal betont werden, daß diese Hamilton-Form vollkommen exakt ist, daß Translations- und Drehinvarianz nicht verletzt sind, daß also Gesamtimpuls und Gesamtdrehimpuls erhalten bleiben, und daß sie keine redundanten Variablen enthält.

2. Störungsrechnung zweiter Ordnung nach dem Gesamtdrehimpuls L

In diesem Abschnitt sollen die in der Einleitung diskutierten Zusammenhänge, die zu kollektiven Rotationen führen, durch eine konsequente Störungsrechnung nach dem Gesamtdrehimpuls L vertieft werden. Das Ergebnis dieser Störungsrechnung liefert ein besseres Verständnis für den Zusammenhang zwischen der Bedingung der spezifischen Entkopplung und der Extremaleigenschaft des Erwartungswertes von H_2 . Außerdem zeigt die Störungsrechnung einen, zumindest numerisch, immer gangbaren Weg für die exakte Be-

rechnung des in der Einleitung definierten Trägheitstensors. Dieser Trägheitstensor tritt in der Taylorentwicklung der Energie des n -Teilchen-Systems nach L bei den in den Komponenten von L quadratischen Gliedern auf. Die Bedingungen für Rotationsbanden lassen sich damit mathematisch durch die Konvergenz der Taylor-Entwicklung erfassen. Die Abweichungen von reinen Rotationsbanden können im Rahmen dieser Störungsrechnung durch einfaches Weiterentwickeln behandelt werden. Bei dieser Störungsrechnung wird der Kopplungsterm H_k , der linear von L abhängt, als Störoperator 1. Ordnung und der kollektive Anteil H_2 , der L quadratisch enthält, als Störoperator 2. Ordnung aufgefaßt. Die hier entwickelte Störungsrechnung unterscheidet sich von der üblichen Schrödingerschen Störungsrechnung in 2 Punkten:

- Der Störparameter, den wir mit λ bezeichnen wollen, ist der Drehimpuls selbst und somit gequantelt. Die Ergebnisse der Störungsrechnung haben also nur für gewisse Werte des Störparameters einen Sinn.
- Es handelt sich um Störungsrechnung mit Entartung, obwohl der Grundzustand des Systems mit $l = 0$, auf dem sich die Rotationsbande aufbaut, nicht entartet ist. Da es zu festen l und m genau $2l + 1$ linear unabhängige Funktionen $D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma)$ gibt, ist der Entartungsgrad $2l + 1$, nimmt also von „nicht entartet“ bei $l = 0$ mit wachsender Störung zu. Für die Darstellungskoeffizienten der Drehgruppe verwenden wir die $D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma)$ von ROSE⁵.

Wegen dieser beiden Besonderheiten soll die Durchführung der Störungsrechnung 2. Ordnung kurz skizziert werden. Die ersten Schritte sind die gleichen wie in II Abschnitt 11.

Wir gehen aus von dem Hamilton-Operator (17), in dem wir, um die Größenordnungen für die Störungsrechnung anzudeuten, H_k durch λH_k und H_2 durch $\lambda^2 H_2$ ersetzen:

$$H = H_1 + \lambda H_k + \lambda^2 H_2. \quad (20)$$

Als nächstes führen wir „ungestörte“ Lösungsfunktionen $\Phi_\nu^0(q_1)$ ein, die die Eigenfunktionen des Operators $H_1(q_1)$ sind:

$$H_1 \Phi_\nu^0 = E_\nu^0 \Phi_\nu^0. \quad (21)$$

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

gegebenen Quantenzahlen l und m die Form

$$\Psi_m^l = \sum_{n=-1}^{n=+1} \Phi_n(q_1) \cdot D_{mn}^{l*}(q_2), \quad (22)$$

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 dem vollständigen Funktionensystem $\Phi_0^0(q_1)$ entwickeln, wird

$$\begin{aligned} \Psi_m^l &= \sum_{n=-1}^{n=+1} \left(\sum_{\nu} c_{n\nu} \Phi_{\nu}^0(q_1) \right) \cdot D_{mn}^{l*}(q_2) \\ &= \sum_{\nu} \Phi_{\nu}^0(q_1) \left(\sum_n c_{n\nu} D_{mn}^{l*}(q_2) \right). \end{aligned} \quad (23)$$

Jedes Glied der Reihe über ν ist Lösung von (21) und enthält gleichzeitig alle Variablen q_1 und q_2 . Unsere Aufgabe besteht darin, die Koeffizienten $c_{n\nu}$ zu bestimmen. Wir gehen dazu vor wie in der üblichen Schrödinger-schen Störungstheorie, indem wir den zu Ψ_m^l gehörigen Energiewert und das zugehörige Koeffizientensystem nach λ entwickeln:

$$\begin{aligned} E_{\nu} &= E_{\nu}^0 + \lambda E_{\nu}^{(1)} + \lambda^2 E_{\nu}^{(2)} + \dots, \\ c_{n\nu} &= c_{n\nu}^0 + \lambda c_{n\nu}^{(1)} + \lambda^2 c_{n\nu}^{(2)} + \dots. \end{aligned} \quad (24)$$

Wenn wir den vor Einschalten der Störung vorhandenen Ausgangszustand mit dem Index $\nu = 0$ bezeichnen, schreibt sich (23)

$$\begin{aligned} \Psi_{m0}^l &= \Phi_0^0 \sum_n c_{n0}^0 D_{mn}^{l*} + \lambda \sum_{\nu=1} \Phi_{\nu}^0 \sum_n c_{n\nu}^{(1)} D_{mn}^{l*} \\ &\quad + \lambda^2 \sum_{\nu=0} \Phi_{\nu}^0 \sum_n c_{n\nu}^{(2)} D_{mn}^{l*} + \dots. \end{aligned} \quad (25)$$

Im Fall $l = 0$ reduziert sich dieser Ausdruck auf das erste Glied, das im Raum der q_1 eine einfache nicht entartete 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 $D_{mn}^{l*}(q_2)$. Im Raum der q_1 , q_2 bedeutet das für das System der Ausgangsfunktionen eine $(2l + 1)$ -fache Entartung.

Mit den Ansätzen (24) und (25) führt man nun das Schrödingersche Störungsverfahren für den Hamilton-Operator (20) durch: Man setzt die betreffenden Ansätze in die Schrödinger-Gleichung ein und ordnet nach Potenzen des Störparameters λ . 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 $E_0^{(1)}$ als der Erwartungswert von H_k . Der Operator H_k ist seiner Definition entsprechend linear in den Drehimpulskomponenten. In II wurde für das Dreikörperproblem gezeigt, daß der Erwartungswert von

H_k , gebildet über die innere Wellenfunktion, immer verschwindet. Aus den daran angeknüpften Überlegungen (die bei der kollektiven Rotation hinzutretende Energie kann nicht vom Drehsinn, d. h. nicht linear von L abhängen) wurde schon in II der Schluß gezogen, daß das gleiche auch für Systeme mit mehr Teilchen gelten wird. Im Anhang 1 wird der Beweis hierfür für das n -Teilchen-System allgemein erbracht. Das heißt also, daß allgemein die bei einer kollektiven Rotation auftretende Zusatzenergie in erster Näherung verschwindet. In die Bestimmung der $c_{n\nu}^{(1)}$ 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, wenn also das körperegebundene Koordinatensystem so in die durch Φ_0^0 beschriebene Grundzustandskonfiguration hineingelegt wird, daß der Fall der spezifischen Entkopplung vorliegt. Bei dieser Wahl des körperegebundenen Bezugssystems verschwinden sämtliche Koeffizienten $c_{n\nu}^{(1)}$. An der erweiterten Ausgangswellenfunktion

$$\Psi_{m0}^l = \Phi_0^0 \sum_n c_{n0}^0 D_{mn}^{l*} \quad (26)$$

ändert sich in dieser Näherung nichts. An dieser Stelle erkennt man die Berechtigung, im Falle der spezifischen Entkopplung die Gesamtwellenfunktion in Produktform anzusetzen. Mit diesen Ergebnissen vereinfacht sich die Störungsrechnung 2. Ordnung, da sich nur Beiträge aus den Gliedern ergeben, die schon in den Ansätzen (23) bis (25) 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, das $(2l + 1)$ -fach entartet ist. Wir bekommen also die Störenergien 2. Ordnung gleichzeitig mit den Koeffizienten nullter Ordnung aus einer Säkulardeterminante, deren Elemente die Matrixelemente von H_2 mit den Wellenfunktionen nullter Ordnung sind.

Dieses Vorgehen wird klarer, wenn wir es gedanklich in zwei Schritte zerlegen. 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 körperfesten 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 asymmetrischen Kreisel. Der 2. Schritt der Diagonalisierung des Operators führt zu den bekannten Eigenwerten des Kreiselproblems, die nunmehr als Störenergien 2. Ordnung zu der Energie des nicht-rotierenden Ausgangszustandes hinzutreten. Bei dieser Störungsrechnung, die in II durchgeführt wurde, haben

wir vorausgesetzt, daß wir das durch die Bedingung der spezifischen Entkopplung definierte körpergebundene Koordinatensystem kennen. Diese Voraussetzung hat das Verschwinden aller Matrixelemente von H_k , die mit dem Ausgangszustand Φ_0^0 gebildet werden, zur Folge, so daß sämtliche Entwicklungskoeffizienten $c_{n\nu}^{(1)}$ Null waren. Schon beim Dreikörperproblem bereitet die Bestimmung dieses für kollektive Rotationen optimalen körpergebundenen Koordinatensystems erhebliche mathematische Schwierigkeiten. Beim n -Körperproblem wird es daher im allgemeinen nicht möglich sein, dieses System zu finden. Wir wollen deshalb die oben skizzierte Störungstheorie für den Fall erweitern, daß man dieses optimale körpergebundene System nicht kennt.

Die Diagonalelemente von H_k verschwinden, wie man aus Anhang 1 ersieht, weiterhin. Die Matrixelemente der Form $\langle \Phi_\nu^0 \cdot D_{mn}^{l*} | H_k | \Phi_0^0 \cdot D_{mn}^{l*} \rangle$ dagegen sind nicht mehr alle Null. Für die Koeffizienten $c_{n\nu}^{(1)}$ erhalten wir den üblichen Ausdruck

$$c_{n\nu}^{(1)} = \frac{\sum_{n''} c_{n''0}^0 \langle \nu n | H_k | \nu n'' \rangle}{(E_0^0 - E_\nu^0)} \quad (27)$$

mit der Abkürzung

$$\langle \nu n | H_k | \nu n'' \rangle = \langle \Phi_\nu^0 D_{mn}^{l*} | H_k | \Phi_0^0 D_{mn''}^{l*} \rangle. \quad (28)$$

Betreiben wir mit der so in 1. Ordnung veränderten Wellenfunktion die Störungsrechnung weiter, so erhalten wir zu der Störmatrix

$$\langle \nu n' | H_2 | \nu n \rangle, \quad (-l \leq n', n \leq +l),$$

die sich aus H_2 ergibt, einen Beitrag von derselben Größenordnung, der von H_k kommt, nämlich die Störmatrix

$$\sum_\nu \frac{\sum_{n''} \langle \nu n' | H_k | \nu n'' \rangle \langle \nu n'' | H_k | \nu n \rangle}{E_0^0 - E_\nu^0} \quad (29)$$

Die Addition dieser beiden Störmatrizen ergibt den gesamten Beitrag in 2. Ordnung. Integrieren wir jetzt wieder wegen der speziellen Form der Operatoren H_k und H_2 über die inneren Koordinaten q_1 , so ergibt sich für die gesamte Störmatrix

$$\begin{aligned} & 1/2 \langle n' | \mathbf{L} \langle \nu | \hat{\Theta}^{-1} | \nu \rangle \mathbf{L} | n \rangle \\ & + \sum_\nu \frac{\sum_{n''} \langle \nu | \mathfrak{A} | \nu \rangle \langle n' | \mathbf{L} | n'' \rangle \langle \nu | \mathfrak{A} | \nu \rangle \langle n'' | \mathbf{L} | n \rangle}{E_0^0 - E_\nu^0} \end{aligned} \quad (30)$$

Diesen Ausdruck können wir auf eine bedeutend übersichtlichere Form bringen, wenn wir die Skalarprodukte $\langle \nu | \mathfrak{A} | \nu \rangle \langle n' | \mathbf{L} | n'' \rangle$ komponentenweise ausschreiben und den Faktor untersuchen, der bei

$$\langle \nu | \mathfrak{A}_\mu | \nu \rangle \langle \nu | \mathfrak{A}_\kappa | \nu \rangle \quad (\mu, \kappa = \xi, \eta, \zeta)$$

auftritt, nämlich

$$\sum_{n''} \langle n' | \mathbf{L}_\mu | n'' \rangle \langle n'' | \mathbf{L}_\kappa | n \rangle.$$

Wegen der Vollständigkeit der Funktionen $|n''\rangle = D_{mn''}^{l*}$ bezüglich n'' wird daraus $\langle n' | \mathbf{L}_\mu \mathbf{L}_\kappa | n \rangle$. Das ist genau der Faktor, der bei $\langle \nu | \hat{\Theta}^{-1} | \nu \rangle$ steht. Wir führen daher einen neuen Tensor Θ_{eff} ein, dessen Komponenten durch

$$\begin{aligned} (\Theta_{\text{eff}}^{-1})_{\mu\kappa} &= \langle \nu | \hat{\Theta}^{-1} | \nu \rangle \\ &- 2 \sum_\nu \frac{\langle \nu | \mathfrak{A}_\mu | \nu \rangle \langle \nu | \mathfrak{A}_\kappa | \nu \rangle}{E_\nu^0 - E_0^0} \end{aligned} \quad (31)$$

definiert sind. Mit diesem neuen Tensor schreibt sich die Störmatrix (30)

$$\langle n' | \mathbf{L} \Theta_{\text{eff}}^{-1} \mathbf{L} | n \rangle. \quad (32)$$

Mit diesem Ergebnis können wir alle Folgerungen, die wir im Falle der Störungsrechnung mit spezifischer Entkopplung gezogen haben, übernehmen, wenn wir den Tensor $\langle \nu | \hat{\Theta}^{-1} | \nu \rangle$ durch den in (31) definierten Tensor Θ_{eff}^{-1} ersetzen. Formal erkennt man diesen Zusammenhang, wenn man sich erinnert, daß das körpergebundene Koordinatensystem, in dem spezifische Entkopplung vorliegt, durch die Bedingung $\mathfrak{A} \Phi_0^0 = 0$ definiert ist. Diese Bedingung liefert sofort $\langle \nu | \mathfrak{A}_\mu | 0 \rangle = 0$, $\mu = \xi, \eta, \zeta$ und damit $\Theta_{\text{eff}}^{-1} = \langle \nu | \hat{\Theta}_{\text{sp.E.}}^{-1} | \nu \rangle$. Die durch die kollektive Rotation hinzutretenden Energien sind daher die Energien der asymmetrischen Kreisels mit dem Trägheitstensor Θ_{eff} aus (31). An dem Ergebnis (31) sieht man auch sehr deutlich den Zusammenhang zwischen der Bedingung der spezifischen Entkopplung und der Extremaleigenschaft des Erwartungswertes von H_2 : Der Beitrag von H_k in Störungsrechnung 2. Ordnung ist stets negativ. Die Werte von Θ_{eff}^{-1} als Entwicklungskoeffizienten der Energie nach dem Gesamtdrehimpuls \mathbf{L} sind von der Wahl des körpergebundenen Bezugssystems unabhängig. Mit diesen beiden Überlegungen folgt aus (31) sofort, daß $\langle \nu | \hat{\Theta}^{-1} | \nu \rangle$ am kleinsten ist, wenn der zweite Summand den Wert Null hat. Das ist aber genau bei der spezifischen Entkopplung der Fall.

3. Zusammenfassung

Wir haben jetzt 3 verschiedene Möglichkeiten, das Trägheitsmoment eines n -Teilchen-Systems zu bestimmen:

- Die spezifische Entkopplung. Man löst $\mathfrak{A} \Phi_0^0 = 0$, erhält daraus das gesuchte körpergebundene Koordinatensystem und ermittelt in diesem System $\langle \nu | \hat{\Theta}_{\text{sp.E.}}^{-1} | \nu \rangle$.

- b) Das Extremalprinzip. Man bildet $\langle \mathbf{o} | \hat{\Theta}^{-1} | \mathbf{o} \rangle$ und sucht, in Abhängigkeit von der Definition des körpergebundenen Koordinatensystems, das Minimum der Rotationsenergie eines asymmetrischen Kreisels mit diesem Tensor als Trägheitstensor.
- c) Die allgemeine Störungsrechnung 2. Ordnung. Man wählt ein beliebiges (für die Rechnungen möglichst günstiges) körpergebundenes Koordinatensystem, berechnet sich für dieses System $\hat{\Theta}^{-1}$ und \mathfrak{U} wie in Abschnitt 1 erläutert, und bestimmt Θ_{eff}^{-1} aus (31).

Die Wege sind äquivalent und führen, wie wir am Ende von Abschnitt 2 diskutiert haben, zu demselben Ergebnis für den in die Rotationsenergien eingehenden effektiven Trägheitstensor des Systems.

Bemerkenswert ist noch, daß man für a) und b) nur die Kenntnis von Φ_0^0 benötigt, während für c) die Kennt-

nis des gesamten Funktionensystems Φ_{ν}^0 vorausgesetzt wird. Dies ist kein Widerspruch, da man bei bekanntem H_1 aus Φ_0^0 und E_0^0 rückwärts eindeutig das Potential ermitteln kann und daraus über die Schrödinger-Gleichung (21) alle Eigenfunktionen Φ_{ν}^0 erhält.

Damit ist eine konsequente und in sich geschlossene Theorie für kollektive Rotationen erstellt. Im folgenden Teil B sollen alle diese Punkte an Beispielen erläutert und einige Anwendungsmöglichkeiten explizit durchgerechnet werden.

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

² H. RUDER u. H. VOLZ, Z. Naturforsch. **24a**, 1171 [1969].

³ W. BÜTTNER u. H. RUDER, Z. Naturforsch. **24a**, 1163 [1969].

⁴ H. NÄPFEL, H. RUDER u. H. VOLZ, Z. Naturforsch. **23a**, 199 [1968].

⁵ M. E. ROSE, Elementary Theory of Angular Momentum, Wiley, New York 1966.