

Zur exakten Behandlung von kollektiven Rotationen

Teil B: Anwendungen

Hanns Ruder

Institut für Theoretische Physik der Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen

(Z. Naturforsch. **28 a**, 1500–1515 [1973] ; received 5 April 1973)

On the Exact Treatment of Collective Rotations. Part B: Applications

In part B we deal with some applications and conclusions of the theory for collective rotations of quantum mechanical systems which has been treated in part A. In the first section we investigate the consequences of a body-fixed coordinate-system lying in the principal axes of inertia. We find that for this choice in general no specific decoupling is obtained, and therefore the so-called hydrodynamic moments of inertia are always a lower limit for the real moments of inertia of a system. Further the transition from a n -body system to the rigid body is carried out. In another section the symmetry conditions of systems with identical particles are treated. Especially we study the question how to define the optimal body-fixed frame of reference in a system of independent identical particles. Finally we compare the results of our exact theory of collective rotations with the results of the cranking model and find that only in the limit of an infinitely heavy core the cranking model leads to an exact expression for the moment of inertia.

Einleitung

Im Teil A dieser Arbeit^{1a} wurde eine Theorie entwickelt, die kollektive Rotationen von quantenmechanischen Systemen exakt beschreibt. Diese Theorie lieferte im Rahmen der zweiten Ordnung einer konsequenten Störungsrechnung nach dem Gesamtdrehimpuls \mathbf{L} einen exakten Ausdruck für den effektiven Trägheitstensor, den das System im Limes $\mathbf{L} \rightarrow 0$ besitzt. Gleichzeitig hatte man damit zwei Methoden, das zur Beschreibung von kollektiven Rotationen optimale körperfeste Koordinatensystem zu bestimmen. Da für alle Überlegungen der Hamilton-Operator benötigt wird, wurde im Teil A auch noch ein Verfahren abgeleitet, wie man den Hamilton-Operator eines n -Teilchen-Systems praktisch ohne Rechnung aus kinematisch-geometrischen Überlegungen gewinnen kann.

Im vorliegenden Teil B werden einige der vielen Anwendungsmöglichkeiten explizit durchgerechnet und verschiedene andere Ansätze für die Beschreibung von kollektiven Rotationen kritisch auf ihre Brauchbarkeit untersucht.

1. Die Hauptträgheitsachsen als Bezugssystem

Ein viel verwendeter Ansatzpunkt für die Beschreibung von kollektiven Rotationen sind die Hauptträgheitsachsen. Das heißt, das körpergebundene Koordinatensystem fällt mit den momentanen

Hauptträgheitsachsen der Punktkonfiguration zusammen.

Wir wollen untersuchen, wie ein solches Bezugssystem im Rahmen unserer Überlegungen aus Teil A zu beurteilen ist. Gleichzeitig können wir an diesem Beispiel explizit demonstrieren, wie einfach und übersichtlich die in Teil A Abschnitt 1 erarbeitete Methode ist, den Hamilton-Operator für ein bestimmtes körpergebundenes Koordinatensystem zu ermitteln.

Der Übergang zum reduzierten System macht auch keinerlei Schwierigkeiten. Man kann mit einer elementaren Rechnung zeigen, daß der Trägheitstensor des reduzierten Systems identisch ist mit dem Trägheitstensor des wirklichen n -Teilchen-Systems relativ zum Gesamtschwerpunkt. Unser in diesem Abschnitt verwendetes körpergebundene ξ - η - ζ -System liegt also gleichzeitig in den momentanen Hauptträgheitsachsen des reduzierten Systems. Für dieses ξ - η - ζ -System bestimmen wir jetzt den Hamilton-Operator.

Dazu müssen wir nach den Vorschriften von (10) und (14) aus Teil A einfach berechnen, um wieviel sich das ξ - η - ζ -System auf Grund seiner Definition verdreht, wenn wir an den einzelnen reduzierten Massen μ_i infinitesimale Verrückungen vornehmen. Diese Verrückungen bestehen aus einer infinitesimalen radialen Verschiebung um δq_i und aus einer infinitesimalen Drehung $\delta \Phi_i = (\delta \Phi_{i\xi}, \delta \Phi_{i\eta}, \delta \Phi_{i\zeta})$ jeder reduzierten Masse μ_i . Wir stellen diesen Vorgang in Abb. 1 schematisch dar.

Sonderdruckanforderungen an Dr. H. Ruder, Institut für Theor. Physik, D-8520 Erlangen, Glückstraße 6.



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

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

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

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

Wir bezeichnen den Trägheitstensor des Gesamtsystems in Hauptachsenlage mit Θ^{HA} , die Hauptträgheitsmomente mit Θ_{ξ} , Θ_{η} , Θ_{ζ} , den Trägheitstensor der Masse μ_i mit Θ_i , seine Elemente mit $\Theta_{i\xi\xi}$ usw. Eine infinitesimale Verrückung der Masse

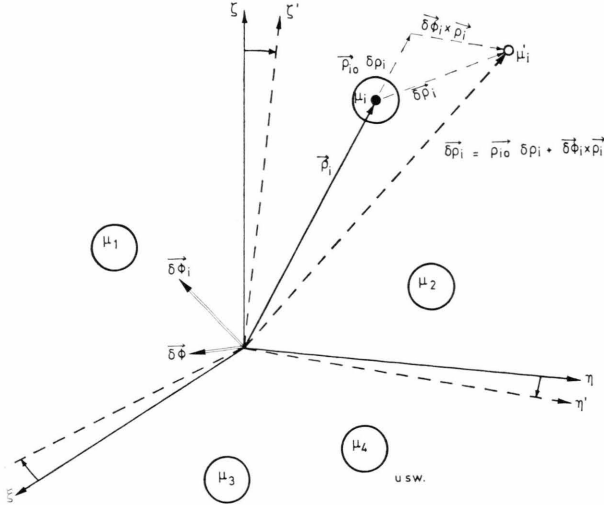


Abb. 1. Schematische Darstellung der Verdrehung des ξ - η - ζ -Systems um den Winkel $\delta\Phi$ bei einer infinitesimalen Verrückung der i -ten Masse um $\delta\rho_i$.

μ_i ändert nun den Trägheitstensor des Gesamtsystems. Er geht über in $\Theta^{\text{HA}} + \delta\Theta_i$. Die Hauptachsen dieses Tensors fallen natürlich nicht mehr mit den alten Hauptachsen zusammen. Um ihn wieder in Diagonalform zu bringen, müssen wir das ξ - η - ζ -System um den Winkel $\delta\Phi = (\delta\Phi_{\xi}, \delta\Phi_{\eta}, \delta\Phi_{\zeta})$ verdrehen. Wie sich dabei unser Tensor verändert, läßt sich mit Hilfe der Drehmatrix $S(\delta\Phi)$ berechnen. $S(\delta\Phi)$ hängt mit dem Drehvektor $\delta\Phi$ über

$$S(\delta\Phi) = \begin{pmatrix} 1 & \delta\Phi_{\zeta} & -\delta\Phi_{\eta} \\ -\delta\Phi_{\zeta} & 1 & \delta\Phi_{\xi} \\ \delta\Phi_{\eta} & -\delta\Phi_{\xi} & 1 \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

zusammen. Für den verdrehten Tensor erhält man:

$$\Theta'^{\text{HA}} = S(\delta\Phi)^{-1} \cdot (\Theta^{\text{HA}} + \delta\Theta_i) \cdot S(\delta\Phi). \quad (1.2)$$

Die Diagonalitätsbedingung für Θ'^{HA} liefert sofort den Zusammenhang zwischen $\delta\Phi$ und $\delta\Theta_i$. Für die gesuchten Koeffizienten $b_{i\xi}$ bzw. $a_{i\xi\xi}$ usw. benötigen wir aber den Zusammenhang zwischen $\delta\Phi$ und $\delta\Theta_i$ bzw. zwischen $\delta\Phi$ und $\delta\Phi_i$. Diesen Zusammenhang finden wir, wenn wir die Änderung des Trägheitstensors Θ_i bei einer infinitesimalen Verrückung $\delta\rho_i$ bzw. $\delta\Phi_i$ berechnen.

Eine infinitesimale Änderung $\delta\rho_i$ ergibt

$$\delta\Theta_i = (2/\rho_i) \Theta_i \delta\rho_i, \quad (1.3)$$

und eine infinitesimale Drehung um $\delta\Phi_i$ ergibt

$$\delta\Theta_i = S(\delta\Phi_i) \cdot \Theta_i \cdot S(\delta\Phi_i)^{-1} - \Theta_i. \quad (1.4)$$

Setzt man die Beziehung (1.3) in die Gl. (1.2) ein, so erhält man aus der Definition der $b_{i\xi,\eta,\zeta}$ von Gl. (10) aus Teil A

$$\begin{aligned} b_{i\xi} &= \frac{\delta\Phi_{\xi}}{\delta\rho_i} = \frac{2}{\rho_i} \frac{\Theta_{i\eta\zeta}}{\Theta_{\eta} - \Theta_{\zeta}}, \\ b_{i\eta} &= \frac{\delta\Phi_{\eta}}{\delta\rho_i} = \frac{2}{\rho_i} \frac{\Theta_{i\xi\zeta}}{\Theta_{\xi} - \Theta_{\zeta}}, \\ b_{i\zeta} &= \frac{\delta\Phi_{\zeta}}{\delta\rho_i} = \frac{2}{\rho_i} \frac{\Theta_{i\xi\eta}}{\Theta_{\xi} - \Theta_{\eta}}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Einsetzen von (1.4) in (1.2) liefert zusammen mit der Definition der $a_{i\xi\xi} = \delta\Phi_{\xi}/\delta\Phi_{i\xi}$ usw. von Gl. (14) aus Teil A entsprechend

$$\begin{aligned} a_{i\xi\xi} &= \frac{\Theta_{i\eta\eta} - \Theta_{i\zeta\zeta}}{\Theta_{\eta} - \Theta_{\zeta}}, & a_{i\xi\eta} &= \frac{\Theta_{i\xi\eta}}{\Theta_{\xi} - \Theta_{\zeta}}, \\ a_{i\xi\zeta} &= \frac{-\Theta_{i\zeta\zeta}}{\Theta_{\xi} - \Theta_{\eta}}, & a_{i\eta\zeta} &= \frac{-\Theta_{i\xi\zeta}}{\Theta_{\xi} - \Theta_{\eta}}, \\ a_{i\eta\xi} &= \frac{-\Theta_{i\eta\xi}}{\Theta_{\eta} - \Theta_{\zeta}}, & a_{i\eta\eta} &= \frac{\Theta_{i\zeta\zeta} - \Theta_{i\xi\xi}}{\Theta_{\zeta} - \Theta_{\xi}}, \\ a_{i\eta\zeta} &= \frac{\Theta_{i\eta\zeta}}{\Theta_{\xi} - \Theta_{\eta}}, & a_{i\zeta\xi} &= \frac{-\Theta_{i\zeta\xi}}{\Theta_{\zeta} - \Theta_{\xi}}, \\ a_{i\zeta\eta} &= \frac{-\Theta_{i\zeta\eta}}{\Theta_{\zeta} - \Theta_{\xi}}, & a_{i\zeta\zeta} &= \frac{\Theta_{i\xi\xi} - \Theta_{i\eta\eta}}{\Theta_{\xi} - \Theta_{\eta}}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Die gefundenen Koeffizienten erfüllen natürlich die Bedingungsgleichungen (11) und (16) aus Teil A, das heißt, die Summation über i ergibt 1 bzw. 0, da $\sum_i \Theta_{i\xi\eta} = \Theta_{\xi\eta} = 0$ usw. gilt. Der in H_2 auftretende effektive Trägheitstensor $\hat{\Theta}^{-1}$ aus Gl. (17) aus Teil A wird damit:

$$\begin{aligned} (\hat{\Theta}^{-1})_{\xi\xi} &= \frac{1}{(\Theta_{\eta} - \Theta_{\zeta})^2} \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{\mu_i \rho_i^2} \\ &\quad \cdot \{4\Theta_{i\eta\zeta}^2 + (\Theta_{i\eta\eta} - \Theta_{i\zeta\zeta})^2 + \Theta_{i\eta\xi}^2 + \Theta_{i\zeta\xi}^2\} \\ &= \frac{1}{(\Theta_{\eta} - \Theta_{\zeta})^2} \sum_{i=1}^{n-1} \mu_i (\eta_i^2 + \zeta_i^2) = \frac{\Theta_{\xi}}{(\Theta_{\eta} - \Theta_{\zeta})^2} \end{aligned}$$

und analog für die anderen Komponenten. Für $\hat{\Theta}^{-1}$ erhält man:

$$\hat{\Theta}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\Theta_{\xi}}{(\Theta_{\eta} - \Theta_{\zeta})^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\Theta_{\eta}}{(\Theta_{\xi} - \Theta_{\zeta})^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Theta_{\zeta}}{(\Theta_{\xi} - \Theta_{\eta})^2} \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

Die in $\hat{\Theta}^{-1}$ aus (1.7) auftretenden Ausdrücke für die 3 Hauptträgheitsmomente sind die gleichen, die man aus dem Tröpfchenmodell¹ erhält. Wir haben damit auf sehr kurzem Weg das bekannte Ergebnis²⁻⁵ abgeleitet, daß bei Wahl von Hauptträgheitsachsen für das körpergebundene ξ - η - ζ -System in dem formalen Trägheitstensor $\hat{\Theta}$ aus H_2 die sogenannten hydrodynamischen Trägheitsmomente erscheinen.

Als nächstes ermitteln wir für das Hauptträgheitsachsensystem die genaue Form des Kopplungsterms H_k . Wir erhalten sie aus (18) aus Teil A durch eine einfache Rechnung mit Hilfe der Beziehungen (1.5) und (1.6) für die Koeffizienten $b_{i\xi}$, $a_{i\xi\xi}$ usw. Dabei macht man noch von $\sum_i L'_{i\xi,\eta,\zeta} = 0$ und $\xi_i L'_{i\xi} + \eta_i L'_{i\eta} + \zeta_i L'_{i\zeta} = 0$ Gebrauch. ξ_i , η_i , ζ_i sind die kartesischen Koordinaten der i -ten Masse μ_i im ξ - η - ζ -System.

$$\begin{aligned}\mathfrak{U}_\xi &= \frac{2}{\Theta_\xi - \Theta_\zeta} \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\eta_i}{\varrho_i^2} \cdot \{ -\zeta_i \varrho_i p'_{\varrho i} + (\xi_i L'_{i\eta} - \eta_i L'_{i\xi}) \}, \\ \mathfrak{U}_\eta &= \frac{2}{\Theta_\xi - \Theta_\zeta} \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\xi_i}{\varrho_i^2} \cdot \{ -\zeta_i \varrho_i p'_{\varrho i} + (\xi_i L'_{i\eta} - \eta_i L'_{i\xi}) \}, \\ \mathfrak{U}_\zeta &= \frac{2}{\Theta_\xi - \Theta_\eta} \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{2 \varrho_i^2} \cdot \{ -2 \xi_i \eta_i \varrho_i p'_{\varrho i} + \xi_i (\zeta_i L'_{i\xi} - \xi_i L'_{i\zeta}) + \eta_i (L'_{i\zeta} - \zeta_i L'_{i\eta}) \}.\end{aligned}\quad (1.8)$$

Wir verwenden die $3n-3$ kartesischen Koordinaten ξ_i , η_i , ζ_i hier aus Bequemlichkeit, da sich mit ihnen der Kopplungsterm \mathfrak{U} einfacher ausdrücken läßt. Sie sind nicht unabhängig voneinander, da es nur $3n-6$ innere Koordinaten gibt. Die 3 Nebenbedingungen lauten

$$\sum_i \xi_i \eta_i = 0, \quad \sum_i \eta_i \zeta_i = 0, \quad \sum_i \zeta_i \xi_i = 0.$$

Bei einer expliziten Rechnung müssen wir die ξ_i , η_i , ζ_i daher durch unsere unabhängigen Koordinaten aus (5) aus Teil A ersetzen.

Wir erhalten den Kopplungsterm und den kollektiven Anteil H_2 der Hamilton-Form, wenn wir $\hat{\Theta}^{-1}$ aus (1.7) und \mathfrak{U} aus (1.8) in die Gl. (17) aus Teil A einsetzen. Damit haben wir die von der Definition des körpergebundenen Koordinatensystems abhängigen Anteile der Hamilton-Form für Hauptträgheitsachsen als Bezugssystem gewonnen.

Wie man aus (1.8) ersieht, ist \mathfrak{U} nicht Null. Der Kopplungsterm $H_k = \mathfrak{U} \cdot \mathbf{L}$ liefert also im allgemeinen in Störungsrechnung 2. Ordnung einen Beitrag zum effektiven Trägheitstensor Θ_{eff} (31) aus Teil A. Dieser Beitrag verschwindet nur dann, wenn für die Ausgangswellenfunktion Φ_0^0 , von der wir bis hierher überhaupt nicht zu sprechen brauchten, das Hauptträgheitsachsensystem genau das Koordinatensystem ist, in dem spezifische Entkopplung $\mathfrak{U} \Phi_0^0 = 0$ vorliegt. Das ist jedoch im allgemeinen nicht der Fall.

Wenn man den Kopplungsterm, wie es meistens geschieht, außer acht läßt, tritt eine im Zusammenhang mit Hauptträgheitsachsen oft diskutierte grundsätzliche Schwierigkeit auf: Die hydrodynamischen Trägheitsmomente, das heißt die Erwartungswerte von $\hat{\Theta}^{-1}$ aus (1.7), sind proportional zu $1/(\Theta_\xi - \Theta_\eta)^2$ usw. Das führt, wenn zwei Hauptträgheitsmomente gleich werden, zu der bekannten Singularität im Erwartungswert von H_2 . Im Fall $\Theta_\xi = \Theta_\eta$ erscheint diese Singularität bei $\hat{\Theta}^{-1}$. Wenn man den Kopplungsterm vernachlässigt, tritt sie bei Wahl von Hauptträgheitsachsen in jedem n -Teilchen-System auf, bei dem Konfigurationen mit $\Theta_\xi = \Theta_\eta$ mit endlicher Wahrscheinlichkeit vorkommen. Berücksichtigt man jedoch den Kopplungsterm H_k , so liefert er nach unseren Überlegungen aus Teil A Abschnitt 2 in Störungsrechnung 2. Ordnung nach \mathbf{L} einen Beitrag zu $(\Theta_{\text{eff}}^{-1})_\xi$. Dieser Beitrag stammt von \mathfrak{U}_ξ . Nun enthält \mathfrak{U}_ξ , wie man aus (1.8) ersieht, den Faktor $1/(\Theta_\xi - \Theta_\eta)$. Der Kopplungsterm H_k liefert also in Störungsrechnung 2. Ordnung ebenfalls eine Singularität proportional zu $1/(\Theta_\xi - \Theta_\eta)^2$, genauso wie der Erwartungswert von H_2 . Der Erwartungswert von H_2 ist stets positiv, der Beitrag von H_k aber stets negativ. Es besteht also die Möglichkeit, daß sich diese beiden singulären Beiträge kompensieren und sich ein endlicher Grenzwert ergibt. Ob und wie dies im einzelnen geschieht, hängt allein von der inneren Wellenfunktion Φ_0^0 ab.

Diese hier auftretenden Singularitäten sind charakteristisch für Hauptträgheitsachsen und sind nicht physikalischer, sondern rein mathematischer Natur. Sie haben ihre Ursache darin, daß für zwei gleiche Hauptträgheitsmomente die betreffenden Hauptträgheitsachsen unbestimmt werden und daß daher kein eindeutiger Zusammenhang zwischen den Lagen der Massenpunkte und den Koordinaten besteht, wenn man für das körpergebundene Koordinatensystem die Hauptträgheitsachsen wählt. Dies

wurde in II⁶ an einem einfachen Beispiel erläutert.

Wir können Hauptträgheitsachsen nur dann verwenden, wenn entweder durch die drehimpulsfreie Wellenfunktion Φ_0^0 des Systems Konfigurationen mit zwei gleichen Hauptträgheitsmomenten in genügend hoher Ordnung ausgeschlossen werden, oder, wenn kollektive Rotationen um die Symmetrieachse außer Betracht bleiben. Dieser letztere Fall ist in der Natur bei den deformierten gg-Kernen verwirklicht, deren niederenergetisches Anregungsspektrum man durch die Energieeigenwerte eines symmetrischen Kreisel mit $\Theta_{\xi} = \Theta_{\eta} \neq \Theta_{\zeta}$ beschreibt und bei denen man experimentell keine Anregungen um die Symmetrieachse findet.

Bei diesen Kernen steht uns ein reiches experimentelles Material zur Verfügung. Es zeigt sich, daß die Trägheitsmomente, wie man sie aus den Rotationsbanden im Anregungsspektrum solcher deformierter gg-Kerne entnimmt, um den Faktor 3 bis 5 größer sind als die hydrodynamischen. Es ist an sich sehr befriedigend, daß die hydrodynamischen Werte ausnahmslos kleiner sind, denn sie entstehen allein aus dem Erwartungswert von H_2 , und wir wissen, daß die Berücksichtigung von H_k grundsätzlich eine Vergrößerung des effektiven Trägheitsmoments bewirkt. Der Reziprokwert von $\langle \Phi_0^0 | \hat{O}^{-1} | \Phi_0^0 \rangle$ aus H_2 muß daher für jede Definition des körpergebundenen Koordinatensystems eine untere Grenze für die auftretenden Trägheitsmomente darstellen.

Die erheblichen Abweichungen vom Experiment zeigen jedoch, wie entscheidend wichtig der Kopplungsterm H_k ist. Seine Wirkung auf die Ausgangswellenfunktion verschwindet bei Wahl von Hauptträgheitsachsen keineswegs. Das Hauptträgheitsachsensystem unterscheidet sich also im Falle der deformierten gg-Kerne noch wesentlich von dem gesuchten System, das zur spezifischen Entkopplung führt.

Wir werden uns in einem späteren Abschnitt noch einmal mit Hauptträgheitsachsen beschäftigen. Es wird sich dabei zeigen, daß die Wahl der Hauptträgheitsachsen als ξ - η - ζ -System eng mit der Annahme unabhängiger Teilchen verknüpft ist. Die gegenüber den experimentellen Trägheitsmomenten von gg-Kernen viel zu kleinen hydrodynamischen Trägheitsmomente beweisen daher, daß in diesen Systemen Korrelationen zwischen den einzelnen Teilchen eine wichtige Rolle spielen.

Um den Einfluß solcher Korrelationen zu studieren, betrachten wir im nächsten Abschnitt einen

Extremfall, nämlich den Übergang zum starren Körper, wo maximale Korrelation vorliegt.

2. Der Grenzübergang zum starren Körper

Wir gehen von einem n -Teilchen-System aus, bei dem die einzelnen Massenpunkte elastisch an feste Gleichgewichtslagen gebunden sind. Der Übergang von einem solchen System zum starren Körper bereitet in der Quantenmechanik einige Schwierigkeiten (Weiguny⁷ und I⁸), die in ähnlicher Weise auch schon in der klassischen Mechanik auftreten, wenn man dort den Hamiltonschen Formalismus verwendet.

In I⁸ wurde der Grenzübergang für ein 3-Teilchen-System ausführlich untersucht. Dabei zeigte sich, daß im wesentlichen die Kopplungsglieder für die Schwierigkeiten verantwortlich sind. Da man durch keine Wahl des ξ - η - ζ -Systems erreichen kann, daß die Kopplungsglieder identisch verschwinden, wurde der Grenzübergang in zwei Schritte zerlegt. Wir gehen hier beim n -Teilchen-System ganz analog vor.

Unser Ziel ist stets, ein körpergebundenes Koordinatensystem zu finden, in dem der Kopplungsterm in seiner Wirkung auf die Ausgangswellenfunktion verschwindet. Dazu führen wir in einem ersten Schritt ein körpergebundenes Koordinatensystem so ein, daß seine Lage nur von den Richtungen der q_i und nicht von deren Beträgen abhängt. Durch diese Vorschrift ist das Bezugssystem keineswegs festgelegt, es verbleibt noch eine Mannigfaltigkeit von möglichen Systemen. Wir werden aber sehen, daß das endgültige System in dieser Mannigfaltigkeit enthalten ist.

Ändert man jetzt den Betrag von q_i , so behält ein solches System seine Lage bei. Die Koeffizienten $b_{i\xi,\eta,\zeta}$ sind also alle Null. Wegen der Gestalt des Kopplungsterms (18) aus Teil A hat $b_{i\xi,\eta,\zeta} = 0$ zur Folge, daß dieser keine p'_{oi} mehr enthält. Man kann deshalb in H_1 , ohne daß sich durch den Kopplungsterm Komplikationen ergeben, alle q_i mit einem Sperrpotential in radialer Richtung bei den gewünschten Werten q_i^0 fest werden lassen.

Das „teilweise starre“ System besteht nun aus den reduzierten Massen μ_i , die sich mit den festen Abständen q_i^0 um den Ursprung des Koordinatensystems bewegen. Auch in diesem Fall gibt es bei Systemen mit mehr als 3 Teilchen kein körpergebundenes Koordinatensystem, bei dem der Kopplungs-

term für beliebige Bewegungen identisch verschwindet. Dies wurde ebenfalls in I⁸ bewiesen. Wir müssen daher von jetzt an verwenden, daß im Limes des starren Körpers die Teilchen nur infinitesimal kleine Bewegungen um ihre Ruhelagen ausführen können.

Die Kopplungsterme entstehen anschaulich dadurch, daß ein körpergebundenes Koordinatensystem „falsch“ in das Teilchensystem hineindefiniert ist und sich demzufolge auch „falsch“ mitbewegt. Beispielsweise würde ein in den Hauptträgheitsachsen liegendes System beim Übergang zum starren Körper mit immer größerer Frequenz vibrieren, die Kopplungsglieder verschwinden in ihrer Wirkung auch im Limes nicht, und die Trägheitsmomente, die man aus H_2 allein bekommt, bleiben zu klein. Man muß für den richtigen Grenzübergang das körpergebundene System so definieren, daß es im Limes des starren Körpers im Körper ruht.

Die durch die inneren Kräfte verursachte Bewegung hat den Gesamtdrehimpuls Null. Das ξ - η - ζ -System soll daher bei einer infinitesimalen Verrückung des i -ten Teilchens so mitgenommen werden, daß von ihm aus betrachtet die Bewegung aller Teilchen den Gesamtdrehimpuls Null besitzt. Mit dieser Vorschrift verhält sich das ξ - η - ζ -System in seiner Bewegung genauso wie die in I⁸ für das 3-Körper-Problem definierte Schwerlinie (bzw. wie im translatorischen Fall der Schwerpunkt). Diese Mitbewegung des körpergebundenen Systems hat allerdings nur im Limes des starren Körpers einen Sinn, denn im Gegensatz zum 3-Körper-Problem ist das System der partiellen Ableitungen bei endlichen Verrückungen hier nicht mehr integrierbar^{7,8}. Als Ausgangslage für das ξ - η - ζ -System wählen wir die Hauptträgheitsachsen der Gleichgewichtslagen. Die oben formulierte Vorschrift lautet als Gleichung:

$$\Theta_i \cdot \delta \Phi_i = \Theta \cdot \delta \Phi. \quad (2.1)$$

Dabei ist Θ_i wieder der Trägheitstensor der Masse μ_i und Θ der des Gesamtsystems. Θ ist wegen der von uns gewählten Ausgangslage diagonal. $\delta \Phi_i$ ist der infinitesimale Drehvektor, der zur Verrückung von μ_i gehört, und $\delta \Phi$ der infinitesimale Drehvektor, der die gesuchte Verdrehung des Gesamtsystems beschreibt. Mit Hilfe der 3 unabhängigen Drehungen $\delta \Phi_{i\xi}$, $\delta \Phi_{i\eta}$, $\delta \Phi_{i\zeta}$ erhalten wir aus (2.1) zum Beispiel für $\delta \Phi_i = (\delta \Phi_{i\xi}, 0, 0)$

$$\begin{pmatrix} \Theta_{i\xi\xi} \delta \Phi_{i\xi} \\ \Theta_{i\eta\xi} \delta \Phi_{i\xi} \\ \Theta_{i\zeta\xi} \delta \Phi_{i\xi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Theta_{\xi\xi} \delta \Phi_{\xi} \\ \Theta_{\eta\xi} \delta \Phi_{\eta} \\ \Theta_{\zeta\xi} \delta \Phi_{\zeta} \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Die gesuchten Quotienten $\delta \Phi_{\xi}/\delta \Phi_{i\xi} = a_{i\xi\xi}$ usw. kann man direkt ablesen:

$$\begin{aligned} a_{i\xi\xi} &= \Theta_{i\xi\xi}/\Theta_{\xi\xi}, & a_{i\xi\eta} &= \Theta_{i\xi\eta}/\Theta_{\eta\eta}, & a_{i\xi\zeta} &= \Theta_{i\xi\zeta}/\Theta_{\zeta\zeta}, \\ a_{i\eta\xi} &= \Theta_{i\eta\xi}/\Theta_{\xi\xi}, & a_{i\eta\eta} &= \Theta_{i\eta\eta}/\Theta_{\eta\eta}, & a_{i\eta\zeta} &= \Theta_{i\eta\zeta}/\Theta_{\zeta\zeta}, \\ a_{i\zeta\xi} &= \Theta_{i\zeta\xi}/\Theta_{\xi\xi}, & a_{i\zeta\eta} &= \Theta_{i\zeta\eta}/\Theta_{\eta\eta}, & a_{i\zeta\zeta} &= \Theta_{i\zeta\zeta}/\Theta_{\zeta\zeta}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Setzt man dies in (19) aus Teil A ein, so erhält man für die Komponenten von $\hat{\Theta}^{-1}$

$$\begin{aligned} \hat{\Theta}_{\xi\xi}^{-1} &= (1/\Theta_{\xi\xi}^2) \sum_{i=1}^{n-1} (1/\mu_i \varrho_i^2) (\Theta_{i\xi\xi}^2 + \Theta_{i\xi\eta}^2 + \Theta_{i\xi\zeta}^2) \\ &= (1/\Theta_{\xi\xi}^2) \sum_{i=1}^{n-1} (\mu_i^2/\mu_i \varrho_i^2) \{(\eta_i^2 + \zeta_i^2)^2 + \xi_i^2 \eta_i^2 + \xi_i^2 \zeta_i^2\} \\ &= (1/\Theta_{\xi\xi}^2) \sum_{i=1}^{n-1} \mu_i (\eta_i^2 + \zeta_i^2) = (1/\Theta_{\xi\xi}) \quad (2.4) \end{aligned}$$

und analog für die anderen Komponenten. Damit wird

$$\hat{\Theta}^{-1} = \begin{pmatrix} \Theta_{\xi\xi}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \Theta_{\eta\eta}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \Theta_{\zeta\zeta}^{-1} \end{pmatrix}; \quad (2.5)$$

das heißt, der effektive Trägheitstensor wird in diesem Grenzfall bei der richtigen Wahl des ξ - η - ζ -Systems gleich dem Trägheitstensor des starren Körpers. Gleichzeitig erkennt man, daß für das so mitbewegte ξ - η - ζ -System der Kopplungsterm identisch verschwindet, denn es ist beispielsweise, wie man durch Einsetzen von (2.3) in (18) aus Teil A sofort findet,

$$\begin{aligned} \mathfrak{X}_{\xi} &= (1/\Theta_{\xi\xi}) \sum_{i=1}^{n-1} (1/\mu_i \varrho_i^2) (\Theta_{i\xi\xi} L'_{i\xi} \\ &\quad + \Theta_{i\xi\eta} L'_{i\eta} + \Theta_{i\xi\zeta} L'_{i\zeta}) \\ &= (1/\Theta_{\xi\xi}) \sum_{i=1}^{n-1} (1/\varrho_i^2) \{ \varrho_i^2 L'_{i\xi} \\ &\quad + \xi_i (\xi_i L'_{i\xi} + \eta_i L'_{i\eta} + \zeta_i L'_{i\zeta}) \} = 0. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Man hätte natürlich auch mit der Beziehung (2.6) anfangen können und wäre dann zu (2.5) gelangt. Das im Limes identische Verschwinden von H_k und die Gleichheit von $\hat{\Theta}$ und Θ_{starr} bedingen sich also gegenseitig. Wegen des in Teil A diskutierten Zusammenhangs zwischen dem Kopplungsterm und der Extremaleigenschaft des Erwartungswerts von H_2 ist Θ_{starr} somit das absolute Maximum für $\hat{\Theta}$.

Die experimentellen Werte für die Trägheitsmomente liegen ausnahmslos darunter. Unsere Überlegungen der Abschnitte 1 und 2 von Teil B liefern also eine untere und eine obere Grenze für die Trägheitsmomente. Allerdings sind die experimentellen

Werte so weit von den beiden Grenzen entfernt, daß selbst für eine näherungsweise Beschreibung weder der Ansatz aus Abschnitt 1 noch der aus Abschnitt 2 geeignet ist.

Wir haben an diesen beiden Beispielen gesehen, wie man bei einer gegebenen Definition des körpergebundenen Koordinatensystems ohne langwierige Rechnungen mit rein geometrisch-kinematischen Betrachtungen den Kopplungsterm H_k und den kollektiven Anteil H_2 gewinnen kann.

3. Systeme mit gleichen Teilchen und Symmetriebedingungen

a) Allgemeine Bemerkungen

In Teil A, Abschnitt 2, haben wir gefunden, daß bei der richtigen Wahl des körpergebundenen Koordinatensystems die Gesamtwellenfunktion bis zur 2. Ordnung in L Produktform besitzt:

$$\psi_m^l = \Phi_0^0(q_1) f_m^l(q_2). \quad (3.1)$$

Diese Tatsache hat uns berechtigt zu sagen, daß sich auf dem drehimpulsfreien Ausgangszustand $\Phi_0^0(q_1)$, der in dieser Näherung unverändert bleibt, eine kollektive Rotationsbande aufbaut.

Die Koordinaten q_2 , hier die Eulerschen Winkel zwischen dem raumfesten und dem optimalen körpergebundenen Koordinatensystem, sind die richtigen kollektiven Koordinaten für die Beschreibung von kollektiven Rotationen. Sie besitzen im Falle eines aus n gleichen Teilchen bestehenden Systems eine wichtige Eigenschaft, die wir aus der Produktform der Wellenfunktion (3.1) ableiten können.

Die Grundzustandswellenfunktion $\Phi_0^0(q_1)$ eines solchen Systems muß bei Vertauschung zweier beliebiger Teilchen in $+\Phi_0^0$ oder $-\Phi_0^0$ übergehen, je nachdem, ob wir es mit einem System aus Bosonen oder Fermionen zu tun haben. Dasselbe gilt natürlich auch für die Wellenfunktion jedes angeregten Zustandes. Wenn wir den Teilchenvertauschungsoperator mit E_{ij} bezeichnen, können wir schreiben

$$E_{ij} \psi_m^l = \pm \psi_m^l = (E_{ij} \Phi_0^0) (E_{ij} f_m^l) \\ = \pm \Phi_0^0 [E_{ij} f_m^l(q_2)] \quad (3.2)$$

Daraus folgt:

$$E_{ij} f_m^l(q_2) = + f_m^l(q_2). \quad (3.3)$$

Das heißt, die richtigen kollektiven Koordinaten q_2 müssen die Eigenschaft haben, daß die Funktion $f_m^l(q_2)$ invariant ist gegen Teilchenvertauschung.

An dieser Stelle soll für später noch bemerkt werden, daß man für die Parität eine analoge Überlegung durchführen kann. Es zeigt sich, daß die Parität der Gesamtwellenfunktion gegeben ist durch die Parität von $f_m^l(q_2)$ allein, da die Grundzustandswellenfunktion $\Phi_0^0(q_1)$ des Systems stets positive Parität besitzt.

b) gg-Kerne

Betrachten wir nun unter den Gesichtspunkten von a) einen deformierten gg-Kern. Dem experimentellen Befund entsprechend, beschreiben wir seine kollektiven Rotationen durch die Bewegungen eines symmetrischen Kreisels, bei denen die Projektionen des Gesamtdrehimpulses auf die Figurenachse Null ist. Die Gesamtwellenfunktion hat daher bei Verwendung des richtigen körpergebundenen Bezugssystems die Gestalt

$$\psi_m^l = \Phi_0^0(q_1) \cdot D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma) \quad (3.4)$$

ψ_m^l hängt in diesem Fall nicht vom Winkel γ ab. Von unserem gesuchten körpergebundenen Koordinatensystem müssen wir nur die Lage der ζ -Achse relativ zu den n Teilchen bestimmen. Die Lage der ξ - und η -Achse ist bedeutungslos. Wir haben also die in Abb. 2 skizzierte Situation.

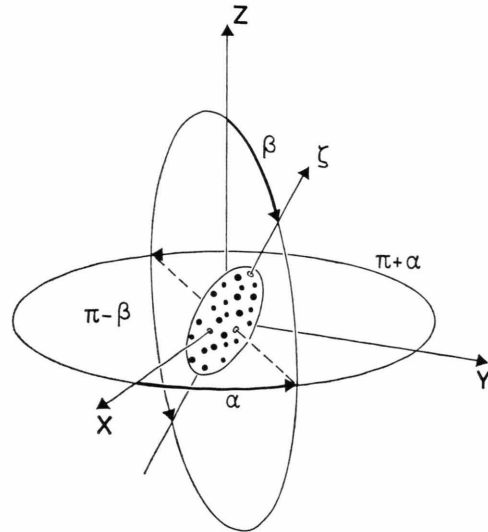


Abb. 2. Die Eulerschen Winkel α und β im Falle eines gg-Kernes.

Die Aufgabe, die Lage der richtigen ζ -Achse zu finden, besteht aus zwei Teilen. Einmal soll die ζ -Achse so in die durch die Wellenfunktion $\Phi_0^0(q_1)$ gegebene Grundzustandskonfiguration hineindefi-

nirt werden, daß spezifische Entkopplung $\mathfrak{U} \Phi_0^0 = 0$ vorliegt. Diese Bedingung kann aber bei einem gg-Kern, der im Mittel gegen ζ in $-\zeta$ symmetrisch ist, keine Aussage darüber liefern, wo die positive Richtung der ζ -Achse ist. Der zweite Teil der Aufgabe ist also die Festlegung der positiven ζ -Richtung. Diesen Teil können wir ganz unabhängig von der expliziten Definition der ζ -Achse behandeln.

Es gibt also wegen der Symmetrie unseres Systems keine Eigenschaft des Gesamtsystems, die es ermöglicht, die positive Richtung der ζ -Achse festzulegen, wie es etwa bei einer im Mittel birnenförmigen Gestalt der Fall wäre. Man kann daher die positive Richtung der ζ -Achse nur mit Hilfe einzelner Teilchen definieren. Um dies zu demonstrieren, greifen wir aus den vielen Möglichkeiten zwei charakteristische heraus:

1. Der positive Teil der ζ -Achse soll in der Hälfte des Raumes liegen, in der sich vom Schwerpunkt aus betrachtet (der ja mit dem Ursprung des ξ - η - ζ -Systems zusammenfällt) die i -te Masse befindet.
2. Wir wählen 3 Teilchen und betrachten die Flächennormale der von ihnen aufgespannten Ebene. Die positive Richtung der Flächennormale legen wir mit Hilfe des Umlaufsinns des von den 3 Massenpunkten gebildeten Dreiecks fest. Damit können wir auch die positive Richtung der ζ -Achse angeben, indem wir verlangen, daß die beiden positiven Richtungen einen spitzen Winkel bilden.

Wir erinnern uns jetzt an die Bedingung (3.3), welche die kollektiven Koordinaten erfüllen müssen. Sie lautet in unserem Falle

$$E_{ij} D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma) = + D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma). \quad (3.5)$$

Da diese Bedingung für beliebige Teilchen i und j und für alle in der kollektiven Rotationsbande auftretenden l und m gelten muß, können wir hieraus zusammen mit unseren obigen Überlegungen einen wichtigen Schluß ziehen. Die Beziehung (3.5) ist natürlich trivialerweise erfüllt, wenn die Eulerschen Winkel α und β selbst invariant gegen Teilchenvertauschung sind. Diese strenge Forderung können wir aber bei unserem symmetrischen Gebilde nicht erfüllen, denn jede mit Hilfe einzelner Teilchen gegebene Definition der positiven Richtung der ζ -Achse bewirkt, daß sich diese Richtung bei Vertauschung dieser Teilchen mit bestimmten anderen Teilchen umkehrt.

Wir erläutern dies an unseren beiden Beispielen:

- zu 1. Die Vertauschung des i -ten Massenpunktes mit einem Massenpunkt, dessen ζ -Koordinate negativ ist, bewirkt ein Umklappen der ζ -Achse.
- zu 2. Vertauscht man 2 der 3 zur Definition herangezogenen Massenpunkte, so ändert sich der Umlaufssinn im Dreieck, die Flächennormale und damit auch die ζ -Achse klappen um 180° .

Was diese Umkehrung der ζ -Richtung für die Eulerschen Winkel zur Folge hat, kann man aus Abb. 2 sofort ablesen:

$$\alpha \rightarrow \pi + \alpha, \quad \beta \rightarrow \pi - \beta. \quad (3.6)$$

Setzt man dies in (3.5) ein, so erhält man für diejenigen Paare von Teilchen, bei deren Vertauschung die ζ -Achse umklappt:

$$E_{ij} \cdot D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma) = D_{m0}^{l*}(\pi + \alpha, \pi - \beta, \gamma') \\ = (-1)^l D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma). \quad (3.7)$$

Hieraus folgt zusammen mit (3.5) zwingend, daß unser betrachtetes System wegen seiner im Mittel symmetrischen Gestalt bei kollektiven Rotationen nur die Drehimpulswerte

$$l = 0, 2, 4, \dots$$

annehmen kann.

Damit haben wir eine in den Spektren von gg-Kernen ausnahmslos auftretende Erscheinung im Rahmen einer mikroskopischen Theorie erklärt.

Auch die Parität der Zustände innerhalb einer Rotationsbande können wir sofort berechnen, da wir uns schon überlegt haben, daß sie durch die Parität von $f_m^l(q_2) = D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma)$ allein gegeben ist. Der Paritäts-Operator läßt die positive Richtung der ζ -Achse, je nach ihrer Definition, unverändert, oder er kehrt sie um, das heißt, es gilt entweder

$$P D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma) = + D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma) \quad \text{oder} \\ P D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma) = D_{m0}^{l*}(\pi + \alpha, \pi - \beta, \gamma') \\ = (-1)^l D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma) = + D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma), \quad (3.8)$$

da $l = 0, 2, 4, \dots$ ist.

In beiden Fällen ergibt sich also positive Parität. Dieses Ergebnis, daß alle Zustände in einer Rotationsbande eines deformierten gg-Kernes positive Parität haben, wird ebenfalls vom Experiment ausnahmslos bestätigt.

Unsere Überlegungen lassen sich prinzipiell auch auf ug- und uu-Kerne übertragen. Mit Hilfe der dort vorhandenen Unsymmetrie kann man die positive

Richtung der ζ -Achse invariant gegen Teilchenvertauschung definieren. Man erwartet daher bei diesen Systemen, daß im kollektiven Anregungsspektrum alle Drehimpulswerte vorkommen. Auch diese Folgerung stimmt mit dem Experiment überein. (Für ug-Kerne muß man allerdings die Theorie etwas modifizieren, da deren Grundzustand, auf dem sich die Rotationsbande aufbaut, nicht den Drehimpuls Null hat.)

Wie einschneidend die Bedingung der Symmetrie bezüglich Teilchenvertauschung die möglichen kollektiven Quantenzahlen l und n beeinflussen und wie weit man dadurch bereits das optimale körpergebundene Koordinatensystem bestimmen kann, soll ausführlich in einer weiteren Arbeit an einem System mit drei gleichen Teilchen untersucht werden.

Wir wenden uns jetzt dem Problem zu, die Richtung der ζ -Achse (ohne Vorzeichen) zu finden. Wegen der Beziehung (3.5) müssen wir grundsätzlich verlangen, daß diese Richtung invariant ist gegen Teilchenvertauschung.

Da wir hier Systeme mit gleichen Teilchen betrachten, erfüllen die in Abschnitt 1 behandelten Hauptträgheitsachsen diese Forderung. Allerdings haben wir dort festgestellt, daß die Hauptträgheitsachsen auf Grund der Diskrepanz zwischen den experimentellen und den hydrodynamischen Trägheitsmomenten bei gg-Kernen noch nicht das richtige körpergebundene Bezugssystem sein können. Die nun folgenden Überlegungen sollen zeigen, in welcher Richtung man eine Verbesserung suchen muß.

Unser Ausgangspunkt ist die Extremaleigenschaft des Erwartungswertes von H_2 , also

$$1/2 \delta \langle \psi_m^l | \mathbf{L} \hat{\Theta}^{-1} \mathbf{L} | \psi_m^l \rangle = 0. \quad (3.9)$$

In Teil A haben wir gezeigt, daß diese Forderung mit der Bedingung der spezifischen Entkopplung äquivalent ist. Wegen der Produktform der Wellenfunktion ψ_m^l wird aus (3.9)

$$1/2 \delta \langle D_{m0}^{l*} | \mathbf{L} \langle \Phi_0^0 | \hat{\Theta}^{-1} | \Phi_0^0 \rangle \mathbf{L} | D_{m0}^{l*} \rangle = 0. \quad (3.10)$$

Die Elemente des Tensors $\langle \Phi_0^0 | \hat{\Theta}^{-1} | \Phi_0^0 \rangle$ sind konstant. Wir können ihn daher stets durch eine zusätzliche konstante Verdrehung unseres Koordinatensystems auf Diagonalform bringen. Diese konstante Verdrehung ist für das weitere bedeutungslos, da die uns interessierenden Differentialquotienten $b_{i\xi}$, $a_{i\xi\xi}$ usw. durch eine einmalige konstante Verdrehung des ξ - η - ζ -Systems nicht verändert werden. Wenn wir noch verwenden, daß die kollektive Rotation eines

gg-Kernes durch die Bewegung eines symmetrischen Kreisels mit $L_\zeta = 0$ beschrieben wird, so werden die Erwartungswerte von $\hat{\Theta}_\xi^{-1}$ und $\hat{\Theta}_\eta^{-1}$ gleich, und den Erwartungswert von $\hat{\Theta}_\zeta^{-1}$ benötigen wir überhaupt nicht. Die Beziehung (3.10) vereinfacht sich dann weiter zu

$$\begin{aligned} 1/2 \delta \langle D_{m0}^{l*} | \langle \Phi_0^0 | \hat{\Theta}_\xi^{-1} | \Phi_0^0 \rangle L^2 | D_{m0}^{l*} \rangle \\ = 1/2 \hbar^2 l(l+1) \cdot \delta \langle \Phi_0^0 | \hat{\Theta}_\xi^{-1} | \Phi_0^0 \rangle = 0. \end{aligned}$$

Unser Extremalprinzip verlangt also in diesem Fall, die ζ -Achse so in das System hineinzudefinieren, daß der mit der Grundzustandswellenfunktion gebildete Erwartungswert von $\hat{\Theta}_\xi^{-1}$ extremal wird:

$$\delta \langle \Phi_0^0 | \hat{\Theta}_\xi^{-1} | \Phi_0^0 \rangle = 0. \quad (3.11)$$

Die allgemeine Gestalt von $\hat{\Theta}_\xi^{-1}$ können wir aus (19) aus Teil A entnehmen:

$$\hat{\Theta}_\xi^{-1} = \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{\mu_i} \left\{ b_{i\xi}^2 + \frac{1}{Q_i^2} (a_{i\xi\xi}^2 + a_{i\eta\xi}^2 + a_{i\zeta\xi}^2) \right\}. \quad (3.12)$$

Die beiden Ausdrücke (3.11) und (3.12) hängen von den reduzierten Massen und den Jacobi-Koordinaten ab und enthalten daher in dieser Form keinerlei Näherungen.

Wenn wir jetzt die Symmetrie bezüglich Teilchenvertauschung mitverarbeiten wollen, so werden wir an dieser Stelle mit dem bekannten Dilemma jeder n -Teilchen-Theorie konfrontiert: Entweder man wählt Jacobi-Koordinaten, erfüllt damit den Schwerpunktsatz und hat unabhängige Koordinaten. Dann ist es aber bei größeren Teilchenzahlen praktisch unmöglich, anzugeben, wie sich die Teilchenvertauschungen in diesen Koordinaten auswirken, da nicht die reduzierten, sondern die wirklichen Teilchen vertauscht werden müssen. Oder man wählt als Koordinaten die Abstandsvektoren der wirklichen Massenpunkte vom Gesamtschwerpunkt. Dann wird die Teilchenvertauschung sehr übersichtlich, aber man hat wegen des Schwerpunktsatzes überzählige Variablen.

Im Hamilton-Formalismus sind diese redundanten Variablen äußerst gefährlich. Für unser Problem, die Berechnung des Integrals (3.11), stellen sie zwar eine Näherung dar, aber sie können nicht zu grundsätzlich falschen Aussagen führen. Die Näherung ist um so besser, je mehr Teilchen wir haben. Der Ausdruck (3.12) wird daher ersetzt durch

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^n \left\{ b_{i\xi}^2 + \frac{1}{r_i^2} (a_{i\xi\xi}^2 + a_{i\eta\xi}^2 + a_{i\zeta\xi}^2) \right\}. \quad (3.13)$$

Dabei geben jetzt die $b_{i\xi}$ bzw. $a_{i\xi\xi}$ usw. an, um wieviel sich das körpergebundene Koordinatensystem auf Grund seiner Definition verdreht, wenn man am wirklichen Teilchen i eine infinitesimale Verrückung vornimmt.

Der Erwartungswert von (3.13) ist der Ausgangspunkt für die im nächsten Abschnitt durchgeführten Überlegungen.

c) Unabhängige Teilchen

In diesem Abschnitt machen wir eine zusätzliche Annahme für unser n -Teilchen-System. Wir stellen uns vor, daß sich die n Massenpunkte unabhängig voneinander in einem gemeinsamen deformierten Potential bewegen. Die Grundzustandswellenfunktion Φ_0^0 ist dann im Falle von Fermionen eine Slaterdeterminante.

Wir wollen jetzt für die ζ -Achse den allgemeinsten Ansatz ermitteln. Die ζ -Achse wird bezüglich des raumfesten Systems mit den beiden Eulerschen Winkeln α und β beschrieben. Außerdem soll sie in eindeutiger Weise mit der Lage der n Massenpunkte verknüpft sein. Wir benötigen daher zwei unabhängige Bedingungsgleichungen zu ihrer Festlegung. Wählen wir als Koordinaten für die n Massenpunkte die sphärischen Polarkoordinaten $r_i, \vartheta_i, \varphi_i$ in dem zu bestimmenden ξ - ζ -System, so ist die allgemeinste Form einer solchen Gleichung

$$\hat{F}(r_1, \vartheta_1, \varphi_1; \dots; r_n, \vartheta_n, \varphi_n) = 0. \quad (3.14)$$

Diese Gleichung muß in unserem Fall eine Reihe von Bedingungen erfüllen:

1. Wegen der Annahme unabhängiger Teilchen darf der Beitrag eines Teilchens zur Definition der ζ -Achse nicht davon abhängen, wo sich die anderen Teilchen befinden. Das bedeutet

$$\sum_{i=1}^{i=n} f_i(r_i, \vartheta_i, \varphi_i) = 0. \quad (3.15)$$

2. Aus der Forderung der Invarianz gegen Teilchenvertauschung folgt, daß diese Funktionen f_i alle gleich sein müssen. Unsere Bedingungsgleichung lautet also

$$\sum_{i=1}^{i=n} f(r_i, \vartheta_i, \varphi_i) = 0. \quad (3.16)$$

3. Da die Definition der ζ -Achse nur von der Konfiguration der Massenpunkte abhängen soll, kann die spezielle Wahl der ξ -Achse die Lage der

ζ -Achse nicht beeinflussen. Nun werden die Winkel φ_i von der ξ -Achse aus gezählt; wir müssen daher verlangen, daß

$$\sum_{i=1}^n f(r_i, \vartheta_i, \varphi_i) = \sum_{i=1}^n f(r_i, \vartheta_i, \varphi_i + a) = 0 \quad (3.17)$$

für beliebige a gilt. Auf Grund dieser Bedingung findet man nach einigen weiteren Überlegungen, die im Anhang 2 ausgeführt werden, daß $f(r_i, \vartheta_i, \varphi_i)$ nur ganz speziell von den φ_i abhängen kann. Die geforderte Invarianz gegen $\varphi_i \rightarrow \varphi_i + a$ bewirkt zusätzlich, daß aus der einen Bedingungsgleichung (3.16) automatisch die zwei unabhängigen Gleichungen

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n u_1(r_i, \vartheta_i) \cdot \sin \varphi_i &= 0, \\ \sum_{i=1}^n u_1(r_i, \vartheta_i) \cdot \cos \varphi_i &= 0 \end{aligned} \quad (3.18)$$

werden, die zur Festlegung der ζ -Achse genügen.

Die Struktur und die Bedeutung dieser beiden Gleichungen versteht man besser, wenn man ihre Äquivalenz mit einer Extremalbedingung zeigt. Dazu verlangen wir, daß die ζ -Achse so in die Konfiguration hineingelegt werden soll, daß

$$\sum_{i=1}^n F(r_i, \vartheta_i) = \text{Extremum} \quad (3.19)$$

erfüllt ist. Diese eine Extremalbedingung genügt zur Festlegung der ζ -Achse, denn sie liefert ebenfalls zwei unabhängige Gleichungen. Man erhält sie, indem man die ζ -Achse infinitesimal um die ξ -Achse bzw. η -Achse dreht. Dabei muß die Änderung von $\sum F(r_i, \vartheta_i)$ in erster Ordnung verschwinden.:

$$\delta \sum_{i=1}^n F(r_i, \vartheta_i) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial F(r_i, \vartheta_i)}{\partial \vartheta_i} \delta \vartheta_i = 0.$$

Bei einer Drehung der ζ -Achse um $\delta \Phi_\xi$ ist $\delta \vartheta_i$ gegeben durch

$$\delta \vartheta_i = + \sin \varphi_i \cdot \delta \Phi_\xi,$$

bei einer Drehung der ζ -Achse um $\delta \Phi_\eta$ durch

$$\delta \vartheta_i = - \cos \varphi_i \cdot \delta \Phi_\eta.$$

Die beiden Bedingungsgleichungen lauten damit

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \frac{\partial F(r_i, \vartheta_i)}{\partial \vartheta_i} \cdot \sin \varphi_i &= 0, \\ \sum_{i=1}^n \frac{\partial F(r_i, \vartheta_i)}{\partial \vartheta_i} \cdot \cos \varphi_i &= 0. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Obwohl die Funktion $F(r_i, \vartheta_i)$, die ein Extremum werden soll, von den φ_i nicht abhängt, treten die φ_i in den beiden Gleichungen (3.20) auf.

Durch Vergleich mit (3.18) erkennt man die Äquivalenz der beiden Betrachtungen. Der Zusammenhang zwischen $u_1(r_i, \vartheta_i)$ und $F(r_i, \vartheta_i)$ ergibt sich sofort zu

$$u_1(r_i, \vartheta_i) = -\frac{\partial F(r_i, \vartheta_i)}{\partial \vartheta_i}.$$

Durch die beiden Gleichungen aus (3.18) bzw. aus (3.20) ist die Lage der ζ -Achse definiert, und wir können jetzt unsere Koeffizienten $b_{i\zeta}, a_{i\zeta\zeta}$ usw. bestimmen. Wenn wir den j -ten Massenpunkt beispielsweise um $\delta\Phi_{j\zeta}$ verdrehen, so sind die beiden Gleichungen nicht mehr erfüllt. Damit sie wieder gelten, müssen wir die ζ -Achse in einer ganz bestimmten Weise nachführen. Der auftretende Drehvektor ist $(\delta\Phi_\zeta, \delta\Phi_\eta, 0)$. Er hängt eindeutig mit der Verdrehung des j -ten Massenpunktes zusammen. Wir zeigen diesen Zusammenhang explizit für den Koeffizienten $a_{i\zeta\zeta} = \delta\Phi_\zeta / \delta\Phi_{j\zeta}$. Für die Drehung des j -ten Massenpunktes um $\delta\Phi_{j\zeta}$ ergibt sich die Änderung der Summe aus der ersten Gleichung von (3.20) nach einer elementaren Rechnung zu:

$$\left(-\frac{\partial^2 F(r_j, \vartheta_j)}{\partial \vartheta_j^2} \sin^2 \varphi_j - \frac{\partial F(r_j, \vartheta_j)}{\partial \vartheta_j} \cot \vartheta_j \cos^2 \varphi_j \right) \cdot \delta\Phi_{j\zeta} = -A_j \delta\Phi_{j\zeta}. \quad (3.21)$$

Eine Drehung der ζ -Achse um $\delta\Phi_\zeta$ entspricht in ihrer Wirkung auf die Polarkoordinaten der Teilchen genau einer gemeinsamen Drehung aller Teilchen um den Winkel $-\delta\Phi_\zeta$. Für die Änderung der Summe erhält man daher bei einer solchen Drehung

$$\left(\sum_{i=1}^n A_i \right) \cdot \delta\Phi_\zeta. \quad (3.22)$$

Die Summe von (3.21) und (3.22) ist die gesamte Änderung der ersten Gleichung von (3.20) bei diesen Verdrehungen und muß daher Null sein. Damit erhält man für den Koeffizienten $a_{j\zeta\zeta}$

$$a_{j\zeta\zeta} = \frac{\delta\Phi_\zeta}{\delta\Phi_{j\zeta}} = \frac{A_j}{\sum_i A_i}. \quad (3.23)$$

Analoge Rechnungen liefern die übrigen Koeffizienten. Für den uns interessierenden Ausdruck (3.13) ergibt sich damit

$$\hat{\Theta}_\zeta^{-1} = \frac{1}{(\sum_i A_i)^2} \frac{1}{m} \sum_j \left\{ \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \vartheta_j \partial r_j} \right)^2 \sin^2 \varphi_j + \frac{1}{r_j^2} \left[\left(\frac{\partial^2 F}{\partial \vartheta_j^2} \right)^2 \sin^2 \varphi_j + \frac{1}{\sin^2 \vartheta_j} \left(\frac{\partial F}{\partial \vartheta_j} \right)^2 \cos^2 \varphi_j \right] \right\} \quad (3.24)$$

Wir verwenden jetzt noch, daß sich die Gestalt des n -Teilchen-Systems im Mittel nicht ändert, daß also für alle in $\Phi_0^0(q_1)$ enthaltenen Konfigurationen $\sum A_i$ näherungsweise konstant ist. Dann hängt jeder i Summand von (3.24) nur von den Koordinaten eines Teilchens ab. Um $(\Theta_{\text{eff}}^{-1})_\zeta$ zu bekommen, müssen wir mit Φ_0^0 , das in unserer Näherung eine Slaterdeterminante ist, den Erwartungswert des Ausdrucks (3.24) bilden. Man weiß nun, daß der Erwartungswert einer Summe von Einteilchenoperatoren mit einer Slaterdeterminante gleich ist dem n -ten Teil der Summe der Erwartungswerte der Einteilchenoperatoren, gebildet mit der aus der Slaterdeterminante folgenden Einteilchendichte

$$d_i = \sum_j |\Phi_{0j}^0(i)|^2.$$

(Φ_{0j}^0 sind die in der Slaterdeterminante auftretenden Einteilchenwellenfunktionen.) Da bei uns zusätzlich alle Einteilchenoperatoren aus (3.24) gleich sind, erhält man für den Erwartungswert von (3.24) einfach das mit d_i gewichtete Integral über einen Summanden. Dieses Integral hängt bei gegebener Teilchendichte d_i nur noch von der Funktion $F(r_i, \vartheta_i)$ ab.

Unsere Aufgabe, den Erwartungswert von (3.24) – und damit in diesem speziellen Fall auch den Erwartungswert von H_2 – durch geeignete Definition der ζ -Achse zu minimalisieren, ist jetzt zurückgeführt auf ein Variationsproblem für die Funktion $F(r_i, \vartheta_i)$. Mit den üblichen Methoden der Variationsrechnung ermittelt man die zugehörige Euler-Lagrange'sche Differentialgleichung. Unabhängig von der speziellen Form der Teilchendichte, von der wir nur verlangen, daß sie rotationssymmetrisch, aber nicht kugelsymmetrisch ist, findet man nach einiger Rechnung, die wir hier nicht wiedergeben, als einzige nicht singuläre Lösung

$$F(r, \vartheta) = r^2 \cdot \sin^2 \vartheta. \quad (3.25)$$

Die Bedingungsgleichungen für die Lage der ζ -Achse lauten damit

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \frac{\partial F}{\partial \vartheta_i} \sin \varphi_i &= 2 \sum_{i=1}^n r_i^2 \sin \vartheta_i \cos \vartheta_i \sin \varphi_i = 2 \sum_{i=1}^n \eta_i \zeta_i = 0, \\ \sum_{i=1}^n \frac{\partial F}{\partial \vartheta_i} \cos \varphi_i &= 2 \sum_{i=1}^n r_i^2 \sin \vartheta_i \cos \vartheta_i \cos \varphi_i = 2 \sum_{i=1}^n \xi_i \zeta_i = 0. \end{aligned}$$

Die ζ -Achse liegt also in einer Hauptträgheitsachse des n -Teilchen-Systems.

Wir können dieses Ergebnis so zusammenfassen: Bei einem System von unabhängigen Teilchen in einem gemeinsamen deformierten Potential liefert das Variationsprinzip für den Erwartungswert von H_2 als ζ -Achse eine Hauptträgheitsachse. Der von uns für die Definition der ζ -Achse verwendete Ansatz berücksichtigt die Invarianz der ζ -Achse gegen Teilchenvertauschung und die Unabhängigkeit der Teilchen. Hauptträgheitsachsen sind also unter diesen Voraussetzungen das beste körpergebundene Koordinatensystem.

Ein aus n unabhängigen Teilchen bestehendes System müßte demnach bei kollektiven Rotationen die hydrodynamischen Werte für die Trägheitsmomente senkrecht zur ζ -Achse besitzen. In Teil A haben wir aber immer wieder betont, daß die Einführung des optimalen körpergebundenen Koordinatensystems nichts mit den Bedingungen zu tun hat, die Voraussetzung für das Auftreten von Rotationsbanden sind. Es erhebt sich daher die Frage, ob ein System unabhängiger Teilchen überhaupt kollektive Rotationen ausführen kann. Wir werden auf diesen Punkt in Abschnitt 4 noch einmal zurückkommen. Eines ist jedenfalls auf Grund unseres Beweises sicher: Ein System, das bei kollektiven Rotationen größere Trägheitsmomente als die hydrodynamischen hat, kann nicht mit der Näherung unabhängiger Teilchen beschrieben werden.

4. Der Zusammenhang mit dem Inglis'schen Kurbelmodell

In diesem Abschnitt soll der Zusammenhang zwischen unserem exakten Ausdruck für das Trägheitsmoment und dem aus dem Inglis'schen Kurbelmodell folgenden Ausdruck untersucht werden. Dazu betrachten wir ein System, das aus einem starren Körper mit den Hauptträgheitsmomenten Θ_ξ , Θ_η , Θ_ζ und zusätzlich aus n Teilchen mit den Massen m_i besteht. Die Teilchen sollen die potentielle Energie $V_i(\mathbf{r}_i)$ besitzen (i. a. nicht kugelsymmetrisch) und untereinander wechselwirkungsfrei sein. Dabei ist \mathbf{r}_i der Abstandsvektor des i -ten Massenpunktes vom Schwerpunkt des starren Körpers. Die Masse des starren Körpers nehmen wir unendlich groß an, damit wir das in diesem Zusammenhang nicht interessierende Problem der Abseparation der Schwerpunktsbewegung außer acht lassen können. Die

Trägheitsmomente des starren Körpers sollen jedoch endlich groß sein.

Die Gesamtenergie dieses Systems besteht aus der Summe der kinetischen und potentiellen Energien der n Teilchen und der Rotationsenergie des starren Körpers. Wir bezeichnen den Drehimpuls-Operator des starren Körpers („Rumpf“) mit \mathbf{L}_R . Für den Hamilton-Operator des Systems ergibt sich dann

$$H = \sum_{i=1}^n \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + V_i(\mathbf{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \mathbf{L}_R \Theta^{-1} \mathbf{L}_R \\ = \sum_{i=1}^n H_i + \frac{1}{2} \mathbf{L}_R \Theta^{-1} \mathbf{L}_R. \quad (4.1)$$

Damit wir unsere Überlegungen aus Teil A sofort anwenden können, müssen wir den Hamilton-Operator auf die allgemeine Form

$$H = H_1 + \mathfrak{K} \cdot \mathbf{L} + 1/2 \cdot \mathbf{L} \hat{\Theta}^{-1} \mathbf{L}, \quad (4.2)$$

entsprechend der Gl. (17) aus Teil A bringen. Dazu führen wir den Gesamtdrehimpuls-Operator \mathbf{L} ein, indem wir \mathbf{L}_R mit Hilfe der Beziehung

$$\mathbf{L}_R = \mathbf{L} - \sum_{i=1}^n \mathbf{L}_i \quad (4.3)$$

ersetzen. \mathbf{L}_i ist der Drehimpuls-Operator des i -ten Teilchens.

Als körperfestes Koordinatensystem wählen wir das Hauptträgheitsachsensystem des starren Körpers allein. Dieses System ist bestimmt nicht das optimale Bezugssystem, in dem spezifische Entkopplung vorliegt. Aber wir wollen hier den in Teil A Abschnitt 3 unter c) genannten Weg gehen, nämlich ein für die Rechnung bequemes körperfestes Koordinatensystem einführen und dann die nichtverschwindende Wirkung des Kopplungsterms durch eine konsequente Störungsrechnung zweiter Ordnung berücksichtigen. Wir haben dann damit im Teil B für alle drei in Teil A Abschnitt 3 genannten Wege Beispiele gegeben.

Das oben eingeführte körperfeste Bezugssystem hat den großen Vorteil, daß der in H_2 reziprok auftretende Trägheitstensor in Hauptachsenform vorliegt und nur die konstanten Hauptträgheitsmomente Θ_ξ , Θ_η , Θ_ζ des starren Körpers enthält. Wir setzen (4.3) in (4.1) ein und erhalten:

$$H = \sum_{i=1}^n H_i + \frac{1}{2} \sum_{\mu=\xi,\eta,\zeta} \frac{1}{\Theta_\mu} \left(\sum_{i=1}^n L_{i\mu} \right)^2 \\ - \sum_{\mu=\xi,\eta,\zeta} \frac{1}{\Theta_\mu} \left(\sum_{i=1}^n L_{i\mu} \right) L_\mu + \frac{1}{2} \sum_{\mu=\xi,\eta,\zeta} \frac{1}{\Theta_\mu} L_\mu^2. \quad (4.4)$$

Durch Vergleich mit (4.2) findet man

$$\mathfrak{K}_\mu = - (1/\Theta_\mu) \sum_{i=1}^n L_{i\mu}. \quad (4.5)$$

Der effektive Trägheitstensor ergibt sich damit aus Gl. (31) aus Teil A zu

$$(\Theta_{\text{eff}}^{-1})_{\mu\kappa} = \frac{1}{\Theta_\mu} \delta_{\mu\kappa} - \frac{2}{\Theta_\mu \Theta_\kappa} \sum_\nu \frac{1}{E_\nu^0 - E_0^0} \cdot \langle 0 | \sum_i L_{i\mu} | \nu \rangle \langle \nu | \sum_i L_{i\kappa} | 0 \rangle. \quad (4.6)$$

$\mu, \kappa = \xi, \eta, \zeta$

Nimmt man speziell an, daß sich die Teilchen in einem anisotropen dreidimensionalen Oszillatorpotential bewegen, dessen drei Achsen mit den Hauptträgheitsachsen des starren Körpers zusammenfallen, so kann man zeigen, daß der Beitrag des Kopplungsterms ebenfalls diagonal ist, und man erhält

$$\left(\frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} \right)_\mu = \frac{1}{\Theta_\mu} - \frac{2}{\Theta_\mu^2} \sum_\nu \frac{1}{E_\nu^0 - E_0^0} |\langle \nu | \sum_i L_{i\mu} | 0 \rangle|^2. \quad (4.7)$$

Wir betrachten noch den im Zusammenhang mit der Kernphysik besonders interessierenden Fall, daß der Rumpf einen symmetrischen Kreisel mit $\Theta_\xi = \Theta_\eta = \Theta_0$ darstellt und daß sich die Teilchen in einem deformierten rotationssymmetrischen Potential bewegen, dessen Symmetrieachse mit der des Rumpfes zusammenfällt. Der Rumpf soll wie üblich um seine Figurenachse die Projektion Null haben, also

$$(L_R)_\zeta = 0 = L_\zeta - \sum_i L_{i\zeta}. \quad (4.8)$$

Die ζ -Komponente des Gesamtdrehimpulses wird allein von den n Teilchen geliefert. Diesen Tatbestand berücksichtigt man, indem man bei dem Ansatz für die Gesamtwellenfunktion (siehe Gl. (23) aus Teil A)

$$\psi_m^l = \sum_{n=-l}^{+l} \left(\sum_\nu c_{n\nu} \Phi_\nu^0(q_1) \right) \cdot D_{mn}^{l*}(q_2) \quad (4.9)$$

nur solche inneren Wellenfunktionen Φ_ν^0 für den Koeffizienten von $D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma)$ verwendet, für die

$$\left(\sum_i L_{i\zeta} \right) \Phi_\nu^0(q_1) = n \hbar \Phi_\nu^0(q_1) \quad (4.10)$$

gilt. Man findet dann, daß das Gesamtsystem bei kollektiven Rotationsanregungen sich ebenfalls wie ein symmetrischer Kreisel verhält. Daß in dem Ansatz (4.9) über n summiert wird, anders als man es beim symmetrischen Kreisel gewöhnt ist, beruht natürlich darauf, daß in dem gewählten Bezugs-

system nicht spezifische Entkopplung vorliegt. Für das effektive Trägheitsmoment um die ξ - oder η -Achse ergibt sich, vollkommen analog zu unseren Überlegungen aus Teil A Abschnitt 2,

$$\frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} = \frac{1}{\Theta_0} - \frac{2}{\Theta_0^2} \sum_\nu \frac{1}{E_\nu^0 - E_0^0} |\langle \nu | \sum_i L_{i\xi} | 0 \rangle|^2. \quad (4.11)$$

Nimmt man speziell an, daß

$$2 \sum_\nu \frac{1}{E_\nu^0 - E_0^0} |\langle \nu | \sum_i L_{i\xi} | 0 \rangle|^2 \ll \Theta_0 \quad (4.12)$$

ist, und entwickelt Θ_{eff} aus (4.11) nach $1/\Theta_0$, so ergibt sich

$$\Theta_{\text{eff}} = \Theta_0 + 2 \sum_\nu \frac{1}{E_\nu^0 - E_0^0} |\langle \nu | \sum_i L_{i\xi} | 0 \rangle|^2 + \left(\sim \frac{1}{\Theta_0} \right) + \dots \quad (4.13)$$

Man sieht, in dieser Näherung für große Θ_0 ist

$$2 \sum_\nu \frac{1}{E_\nu^0 - E_0^0} |\langle \nu | \sum_i L_{i\xi} | 0 \rangle|^2 \quad (4.14)$$

das Zusatzträgheitsmoment, das von den n Teilchen herrührt. (4.14) ist aber genau der Ausdruck für das Trägheitsmoment von n Teilchen in einem deformierten Potential, den man aus dem Inglissschen Kurbelmodell^{9,10} erhält. Berücksichtigt man noch die Unabhängigkeit der Teilchen, so werden die Eigenzustände $|\nu\rangle$ von H_1 Produktwellenfunktionen (bzw. Slaterdeterminanten bei Fermionen), und man kann für $\langle \nu | \sum_i L_{i\xi} | 0 \rangle$ auch $\langle \bar{\nu} | L_{i\xi} | \bar{0} \rangle$ schreiben, wobei jetzt $|\bar{\nu}\rangle$ und $|\bar{0}\rangle$ die entsprechenden Einzelteilchenwellenfunktionen sind.

Die Übereinstimmung des von uns gefundenen Ausdrucks für das Zusatzträgheitsmoment mit dem Inglissschen Ausdruck gilt aus zwei Gründen exakt nur für $\Theta_0 \rightarrow \infty$:

1. Eine Näherung besteht in der Entwicklung des Ausdrucks (4.11), wie es in (4.13) geschieht.
2. Eine weitere Näherung betrifft die in die Störungsrechnung eingehenden Eigenfunktionen von H_1 . Bei unserer exakten Theorie ist H_1 der in Gl. (4.4) auftretende Ausdruck

$$H_1 = \sum_{i=1}^n H_i + \frac{1}{2} \sum_{\mu=\xi,\eta,\zeta} \frac{1}{\Theta_\mu} \left(\sum_i L_{i\mu} \right)^2. \quad (4.15)$$

Bei Inglis dagegen sind die verwendeten Wellenfunktionen die Eigenfunktionen von $\sum_i H_i$ allein.

Die Inglissche Formel liefert also, wie wir im Rahmen unserer exakten Theorie zeigen konnten, das Zusatzträgheitsmoment von n Teilchen in einem deformierten Potential, das bei kollektiver Rotation zu einem im Limes unendlich großen Θ_0 hinzukommt. Dieses Ergebnis ist an sich zu erwarten, wenn man die Inglissche Ableitung seiner Formel betrachtet. Es wird ein deformiertes Potential mit der Winkelgeschwindigkeit ω in Rotation versetzt und die zu ω^2 proportionale Zusatzenergie in Störungsrechnung zweiter Ordnung berechnet. Damit man ein solches Potential überhaupt mit näherungsweise konstanter Winkelgeschwindigkeit unabhängig von der Teilchenbewegung und unter Verletzung des Drehimpulssatzes in Rotation versetzen kann, muß es, wie man sich auch anschaulich überlegen kann, ein im Limes unendlich großes Trägheitsmoment besitzen. Die Störungsrechnung selbst liefert dann noch das von den n Teilchen herrührende Zusatzträgheitsmoment.

Es stellt sich nun die Frage, inwieweit dieses Zusatzträgheitsmoment der n Teilchen mit dem Trägheitsmoment zusammenhängt, das n Teilchen in einem deformierten Potential allein besitzen. Dies untersuchen wir zunächst an demselben einfachen Modell aus der klassischen Mechanik, das wir bereits in II⁶ Anhang II behandelt haben. Wir betrachten also zwei elastisch verbundene Massenpunkte mit einem Gleichgewichtsabstand ϱ_0 . Das zugehörige reduzierte System ist dann ein einzelner Massenpunkt, der elastisch mit einem Gleichgewichtsabstand ϱ_0 an ein Zentrum gebunden ist. Um die Wirkung eines Rumpfes mit dem Trägheitsmoment Θ_0 und einem mit ihm verknüpften deformierten Potential möglichst einfach zu simulieren, nehmen wir weiter an, daß der reduzierte Massenpunkt auf einer drehbaren Stange mit dem Trägheitsmoment Θ_0 gleitet. Das Beispiel aus II⁶ Anhang II entspricht dann dem Fall $\Theta_0 = 0$. Um das effektive Trägheitsmoment dieses Systems zu berechnen, haben wir es mit Hilfe eines kleinen konstanten Drehmoments langsam, im Vergleich mit seiner Eigenschwingung, in Rotation versetzt und die vom System aufgenommene Energie als Funktion des Drehimpulses bestimmt. Für den Fall

$\Theta_0 = 0$ haben wir als effektives Trägheitsmoment

$$\Theta_{\text{eff}} = \left[\frac{1}{T} \int_0^T \frac{1}{\mu \varrho^2} dt \right]^{-1} = \left[\overline{\frac{1}{\mu \varrho^2}} \right]^{-1} \quad (4.16)$$

erhalten. Geht man für den anderen uns interessierenden Fall — Θ_0 sehr groß — analog vor, so findet man für das effektive Trägheitsmoment

$$\Theta_{\text{eff}} = \Theta_0 + \mu \varrho^2. \quad (4.17)$$

An diesem einfachen Beispiel erkennt man zweierlei:

Einmal stellt man fest, daß das gleiche System ein verschiedenes Trägheitsmoment besitzt, je nachdem, ob man es für sich allein betrachtet oder im Zusammenhang mit einem großen Θ_0 . Zum zweiten findet man, daß sich das zu einem großen Θ_0 hinzutretende Trägheitsmoment einfach als Mittelwert des momentanen zeitabhängigen Trägheitsmomentes des reduzierten Massenpunktes ergibt. Dieses Ergebnis ist auch anschaulich klar, denn bei einem großen Θ_0 ist die kollektive Rotation allein durch das Verhalten von Θ_0 bestimmt und wird nicht durch die Bewegungen der Außenteilchen beeinflusst. Dieser Zeitmittelwert entspricht bei der quantenmechanischen Behandlung dem Erwartungswert von $\mu \varrho^2$ oder, allgemein ausgedrückt, dem Erwartungswert des Trägheitstensors. Diese Größe wird üblicherweise — etwas ungenau — mit Θ_{starr} bezeichnet.

In diesem einfachen Beispiel ergeben also unsere Überlegungen, daß $\Theta_{\text{Inglis}} = \Theta_{\text{starr}}$ wird. Lüders¹¹ hat gezeigt, daß bei unabhängigen Teilchen in einem deformierten Potential im Limes großer Teilchenzahlen die Inglissche Formel stets Θ_{starr} liefert. Ein solches Ergebnis ist nach unseren obigen Überlegungen unmittelbar einsichtig.

Will man jedoch das Trägheitsmoment von n Teilchen für sich allein, dann entspricht dies dem Fall $\Theta_0 \rightarrow 0$, und Θ_{eff} ist nicht durch den Inglisschen Ausdruck gegeben. Wir greifen daher auf den für jedes Θ_0 exakt gültigen Ausdruck (4.11) zurück und entwickeln die darin auftretende Größe

$$2 \sum_{\nu} \frac{1}{E_{\nu}^0 - E_0^0} \left| \langle \nu | \sum_i L_{iz} | 0 \rangle \right|^2$$

in eine Taylor-Reihe nach Θ_0 :

$$2 \sum_{\nu} \frac{1}{E_{\nu}^0 - E_0^0} \left| \langle \nu | \sum_i L_{iz} | 0 \rangle \right|^2 = A + B \Theta_0 + C \Theta_0^2 + (\sim \Theta_0^3) + \dots \quad (4.18)$$

Setzt man dies in (4.11) ein, so ergibt sich

$$\frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} = \frac{1}{\Theta_0} - \frac{A}{\Theta_0^2} - \frac{B}{\Theta_0} - C + (\sim \Theta_0) + \dots \quad (4.19)$$

Man sieht sofort, daß man im Limes $\Theta_0 \rightarrow 0$ ein $\Theta_{\text{eff}} \neq 0$ nur dann erhält, wenn $A=0$ und $B=1$ ist, und zwar ergibt sich

$$\Theta_{\text{eff}} = -1/C. \quad (4.20)$$

Das heißt also, damit man ein nicht verschwindendes positives Θ_{eff} bekommt, muß im Limes $\Theta_0 \rightarrow 0$

$$2 \sum_{\nu} \frac{1}{E_{\nu}^0 - E_0^0} |\langle \nu | \sum_i L_{i\zeta} | 0 \rangle|^2 = \Theta_0 - |C| \Theta_0^2 + (\sim \Theta_0^3) + \dots \quad (4.21)$$

gelten. Dabei sind $|\nu\rangle$ und E_{ν}^0 die Eigenfunktionen bzw. die Eigenwerte von H_1 aus (4.15). Für $\Theta_0 \rightarrow 0$ wird der zweite, mit $1/\Theta_0$ behaftete, Term von H_1 immer wesentlicher, und der erste Term, nämlich $\sum_i H_i$, kann als Störung behandelt werden. (Es wird allerdings Störungsrechnung mit Entartung erforderlich.) Die konsequente Entwicklung für $\Theta_0 \rightarrow 0$ der Eigenfunktionen und Energieeigenwerte von H_1 nach Θ_0 liefert eine Entwicklung der Zähler $|\langle \nu | \sum_i L_{i\zeta} | 0 \rangle|^2$ und Nenner $E_{\nu}^0 - E_0^0$ und damit auch des Ausdrucks

$$2 \sum_{\nu} \frac{1}{E_{\nu}^0 - E_0^0} |\langle \nu | \sum_i L_{i\zeta} | 0 \rangle|^2$$

selbst. Hieraus erhält man dann wegen (4.20) einen exakten Ausdruck für das effektive Trägheitsmoment von n Teilchen allein. Dieses Programm wird in einer weiteren Arbeit verfolgt. Hier soll nur noch vermerkt werden, daß man dabei die Annahme unabhängiger Teilchen fallenlassen muß, um realistische Ergebnisse zu erhalten. Man findet nämlich bei der exakten Behandlung eines einfachen Systems, das aus einem Rumpf mit dem Trägheitsmoment Θ_0 und zwei unabhängigen Teilchen mit den festen Abständen r_1^0 und r_2^0 in einem deformierten Potential besteht, daß dieses System für $\Theta_0 \rightarrow 0$ keine Rotationsbanden zeigt.

Herr Professor Dr. H. Volz widmete dieser Arbeit viel Zeit und Interesse. Er gab mir in zahlreichen Diskussionen viele wertvolle Anregungen. Ich möchte mich dafür herzlich bedanken.

Anhang 1

Hier soll gezeigt werden, daß die Diagonalelemente von \mathfrak{A} , gebildet mit 2 Eigenfunktionen Φ_{ν}^0 und $\Phi_{\nu'}^0$ von H_1 , für ein beliebiges n -Teilchen-System allgemein verschwinden. Gleichzeitig erhält man mit diesem Beweis eine für die Rechnung sehr nützliche Eigenschaft der nichtdiagonalen Matrixelemente von \mathfrak{A} .

Wie wir in Teil A Abschnitt 1 diskutiert haben, unterscheidet sich H_k im Hamilton-Operator wegen des Operatorcharakters der $p'_{\rho i}$ und $L'_{i\zeta, \eta, \zeta}$ von dem Kopplungsterm H_k in der Hamilton-Funktion. Die im quantenmechanischen Fall hinzukommenden Glieder sind gerade so gebaut, daß H_k auf definierte Weise hermitisch wird. Diesen Vorgang wollen wir am Beispiel der Koordinate q_i genauer studieren. Die Kopplungsglieder dieser Koordinate entstehen bei der Transformation auf das körpergebundene Koordinatensystem aus dem Operator $-\hbar^2/2 \mu_i (\partial^2/\partial q_i^2 + 2/q_i \cdot \partial/\partial q_i)$. Wir betrachten o.B.d.A. nur die Kopplung mit L_{ζ} . Es ergibt sich für den nur von q_i abhängigen Teil von \mathfrak{A}_{ζ} , den wir mit $\mathfrak{A}_{\zeta}(q_i)$ bezeichnen

$$\mathfrak{A}_{\zeta}(q_i) = \frac{1}{2 \mu_i} \frac{\hbar}{i} \left(b_{i\zeta} \frac{\partial}{\partial q_i} \right) + \frac{1}{2 \mu_i} \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q_i} b_{i\zeta} + \frac{1}{q_i} b_{i\zeta} \right) = \mathfrak{A}_{\zeta}^{(1)}(q_i) + \mathfrak{A}_{\zeta}^{(2)}(q_i). \quad (1)$$

Der erste Summand $\mathfrak{A}_{\zeta}^{(1)}(q_i)$ entspricht genau dem auch klassisch vorhandenen Kopplungsterm, der zweite Summand $\mathfrak{A}_{\zeta}^{(2)}(q_i)$ stellt die quantenmechanisch hinzutretenden Glieder dar. Zwischen den Matrixelementen von $\mathfrak{A}_{\zeta}^{(1)}(q_i)$ und $\mathfrak{A}_{\zeta}^{(2)}(q_i)$ besteht auf Grund ihrer Entstehung ein wichtiger Zusammenhang, den man durch partielle Integration gewinnt:

$$\begin{aligned}
& \int_0^\infty \Phi_{\nu'}^*(\varrho_i) b_{i\xi}(\varrho_i) \left(\frac{\partial \Phi_{\nu'}(\varrho_i)}{\partial \varrho_i} \right) \varrho_i^2 d\varrho_i = \Phi_{\nu'}^* \Phi_{\nu'} b_{i\xi} \varrho_i^2 \Big|_0^\infty \\
& - \int_0^\infty \Phi_{\nu'} b_{i\xi} \left(\frac{\partial \Phi_{\nu'}^*}{\partial \varrho_i} \right) \varrho_i^2 d\varrho_i - \int_0^\infty \Phi_{\nu'} \left(\frac{\partial b_{i\xi}}{\partial \varrho_i} \right) \Phi_{\nu'}^* \varrho_i^2 d\varrho_i - \int_0^\infty \Phi_{\nu'} \left(\frac{2}{\varrho_i} \right) b_{i\xi} \Phi_{\nu'}^* \varrho_i^2 d\varrho_i; \\
& \langle \nu | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(2)}(\varrho_i) | \nu' \rangle = -\frac{1}{2} \{ \langle \nu | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(1)}(\varrho_i) | \nu' \rangle - \langle \nu' | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(1)}(\varrho_i) | \nu \rangle^* \}.
\end{aligned} \quad (2)$$

Diese Beziehung gilt natürlich für jede Koordinate und damit auch für den gesamten Kopplungsterm:

$$\langle \nu | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(2)} | \nu' \rangle = -\frac{1}{2} \{ \langle \nu | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(1)} | \nu' \rangle - \langle \nu' | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(1)} | \nu \rangle^* \}. \quad (3)$$

Da uns quantenmechanisch nur Matrixelemente des Kopplungsterms interessieren, genügt auch bei der quantenmechanischen Betrachtung die Kenntnis von $\mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(1)}$ allein, denn wir erhalten aus der obigen Gleichung sofort

$$\begin{aligned}
\langle \nu | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta} | \nu' \rangle &= \langle \nu | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(1)} | \nu' \rangle + \langle \nu | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(2)} | \nu' \rangle \\
&= \frac{1}{2} \{ \langle \nu | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(1)} | \nu' \rangle + \langle \nu' | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(1)} | \nu \rangle^* \}.
\end{aligned} \quad (4)$$

Diese Beziehung ist eine große rechnerische Erleichterung, denn $\mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(1)}$ sieht genauso einfach aus wie die entsprechenden klassischen Größen, wenn wir dort überall den kanonischen Impuls p_q durch $\hbar/i \cdot \partial/\partial q$ ersetzen. $\mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta}^{(2)}$ dagegen kann sehr kompliziert werden. Außerdem entnimmt man der Beziehung (4), daß \mathfrak{U} hermitisch ist:

$$\langle \nu | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta} | \nu' \rangle = \langle \nu' | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta} | \nu \rangle^*. \quad (5)$$

Verwendet man noch, daß die Eigenfunktionen Φ_{ν}^0 von H_1 reell sind und daß \mathfrak{U} rein imaginär ist, so folgt aus (5), daß die Diagonalelemente von \mathfrak{U} , gebildet mit den Φ_{ν}^0 , verschwinden:

$$\langle \nu | \mathfrak{U}_{\xi, \eta, \zeta} | \nu \rangle = 0. \quad (6)$$

Anhang 2

Wir gehen von der Beziehung (3.17) aus, die lautet:

$$\sum_{i=1}^n f(r_i, \vartheta_i, \varphi_i) = \sum_{i=1}^n f(r_i, \vartheta_i, \varphi_i + a) = 0. \quad (1)$$

Um diese Bedingung auszuwerten, entwickeln wir $f(r_i, \vartheta_i, \varphi_i)$ in eine Fourierreihe:

$$\begin{aligned}
\sum_i \sum_{\nu} \{ u_{\nu}(r_i, \vartheta_i) \cos \nu \varphi_i + v_{\nu}(r_i, \vartheta_i) \sin \nu \varphi_i \} &= \sum_i \sum_{\nu} \{ u_{\nu}(r_i, \vartheta_i) \cos \nu(\varphi_i + a) + v_{\nu}(r_i, \vartheta_i) \sin \nu(\varphi_i + a) \} \\
&= \sum_{\nu} \left\{ \sum_i [u_{\nu}(r_i, \vartheta_i) \cos \nu \varphi_i + v_{\nu}(r_i, \vartheta_i) \sin \nu \varphi_i] \cos \nu a \right. \\
&\quad \left. - \sum_i [u_{\nu}(r_i, \vartheta_i) \sin \nu \varphi_i - v_{\nu}(r_i, \vartheta_i) \cos \nu \varphi_i] \sin \nu a \right\}.
\end{aligned} \quad (2)$$

Da diese Gleichung für beliebige a gelten muß, folgt hieraus

$$\left. \begin{aligned} \sum_i u_0(r_i, \vartheta_i) &= 0, \text{ für } \nu=0, \\ \sum_i [u_{\nu}(r_i, \vartheta_i) \cos \nu \varphi_i + v_{\nu}(r_i, \vartheta_i) \sin \nu \varphi_i] &= 0 \\ \sum_i [u_{\nu}(r_i, \vartheta_i) \sin \nu \varphi_i - v_{\nu}(r_i, \vartheta_i) \cos \nu \varphi_i] &= 0 \end{aligned} \right\} \nu \neq 0. \quad (3)$$

Diese Gleichungen sind jeweils invariant gegen

$$\varphi_i \rightarrow \varphi_i + \frac{2\pi n_i}{\nu} \quad \text{bzw.} \quad \varphi_i \rightarrow \varphi_i' \quad \text{für } \nu=0.$$

Man entnimmt hieraus, daß nur $\nu=1$ Bedingungsgleichungen liefert, die ein physikalisch sinnvolles Verhalten zeigen, das heißt:

$$\sum_i (u_1 \cos \varphi_i + v_1 \sin \varphi_i) = 0, \quad \sum_i (u_1 \sin \varphi_i - v_1 \cos \varphi_i) = 0. \quad (4)$$

Nun soll durch diese Gleichungen die ζ -Achse nur bis auf ihr Vorzeichen festgelegt werden. (Mit dem Problem der positiven Richtung der ζ -Achse haben wir uns schon ausführlich in Abschnitt 3.b.) auseinandergesetzt.) Das heißt, die Gln. (4) müssen auch gelten, wenn man die ζ -Achse umkehrt. Für die Teilchenkoordinaten bedeutet dies

$$r_i \rightarrow r_i, \quad \vartheta_i \rightarrow \pi - \vartheta_i, \quad \varphi_i \rightarrow 2\pi - \varphi_i, \quad (5)$$

(wenn man o. B. d. A. die ξ -Achse festhält).

Außerdem muß die Lage der ζ -Achse bei der Paritäts-Operation unverändert bleiben. Dabei kann sie entweder ihr Vorzeichen beibehalten, und es wird

$$r_i \rightarrow r_i, \quad \vartheta_i \rightarrow \pi - \vartheta_i, \quad \varphi_i \rightarrow \pi + \varphi_i, \quad (6)$$

oder sie kehrt ihr Vorzeichen um, und es ergibt sich

$$r_i \rightarrow r_i, \quad \vartheta_i \rightarrow \vartheta_i, \quad \varphi_i \rightarrow \pi - \varphi_i. \quad (7)$$

Setzt man dieses Verhalten der Teilchenkoordinaten aus (5), (6) und (7) der Reihe nach in (4) ein und vergleicht die entsprechenden Gleichungen miteinander, so zerfällt (4) in die beiden unabhängigen Bedingungsgleichungen

$$\sum_i u_1(r_i, \vartheta_i) \cos \varphi_i = 0, \quad \sum_i u_1(r_i, \vartheta_i) \sin \varphi_i = 0. \quad (8)$$

Für $v_1(r_i, \vartheta_i)$ erhält man analoge Gleichungen. Sie müssen auf dieselbe ζ -Achse führen wie (8), und wir lassen sie daher im weiteren weg.

¹ A. Bohr, Rotational States of Atomic Nuclei, E. Munksgaard, Kopenhagen 1954.

^{1a} H. Ruder, Z. Naturforsch. **28 a**, [1973], als „A“ zitiert.

² T. Tamura, Fortschr. Phys. **6**, 109 [1958].

³ F. Villars, Nucl. Phys. **3**, 240 [1957]; F. Villars, Ann. Phys. **5**, 224 [1958].

⁴ F. Villars, Ann. Rev. Nuclear Sci. **7**, 185 [1957].

⁵ F. Villars, Ann. Phys. **56**, 224 [1970].

⁶ H. Ruder u. H. Volz, Z. Naturforsch. **24 a**, 1171 [1969].

⁷ A. Weiguny, Z. Physik **186**, 227 [1965].

⁸ H. Ruder u. H. Volz, Z. Naturforsch. **23 a**, 1419 [1968].

⁹ D. R. Inglis, Phys. Rev. **96**, 1059 [1954].

¹⁰ D. R. Inglis, Phys. Rev. **103**, 1786 [1956].

¹¹ G. Lüders, Z. Naturforsch. **15 a**, 371 [1960].