

Zeitschrift: Helvetica Physica Acta
Band: 17 (1944)
Heft: IV

Artikel: Zum Deuteronproblem. II
Autor: Wentzel, G.
DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-111506>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

Download PDF: 17.01.2026

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Zum Deuteronproblem. II¹⁾

von G. Wentzel.

(22. IV. 1944)

Es werden diejenigen Deuteron-Zustände untersucht, bei denen entweder der Spin J oder der isotope Spin K null ist. Unter ihnen erweisen sich ein S -Zustand mit $K = 0, J = 1$ und ein solcher mit $J = 0, K = 1$ als die energetisch tiefsten Zustände (die beiden Terme sind gleich bei Vernachlässigung der Tensorkraft), und zwar gilt dies nicht nur für grosse sondern auch für kleine Werte der Isobaren-Energie. Da die zwei tiefsten Zustände mit den bekannten Deuteron-Zuständen 3S und 1S identifiziert werden können, entspricht die Theorie in dieser Hinsicht der Erfahrung. Neu gegenüber den früheren Theorien ist die Voraussage isobarer Deuteron-Zustände; der Spin-Ladungs-Charakter und die Anregungsenergien der tiefsten dieser Zustände werden diskutiert.

§ 1. Verallgemeinerung der Gleichungen (I, 29 und 33).

Im I. Teil dieser Arbeit, § 4, wurden die Deuteron-Zustände mit $J=K=0$ untersucht. Hier kommen wir zum nächst verwickelteren Fall: Eine der beiden Quantenzahlen J, K sei null, die andere beliebig. Es handelt sich also um Zustände, die entweder Spin-Singletts oder Ladungssingletts sind. Da die Tensorkraft — wie in I — ignoriert werden soll, ist die Theorie bezüglich J und K symmetrisch; es genügt daher, den einen Fall ($J=0, K$ beliebig) zu betrachten; der andere Fall ($K=0, J$ beliebig) ergibt sich dann durch Vertauschung von J und K . Nach dem „Vektormodell“ (vgl. (I, 5)) gibt es auch hier nur F -Komponenten mit $j_1=j_2=j$; ferner ist die ungerade Zahl $j_1+j_2=2j$ auf die Werte $\geq J$ und $\geq K$ beschränkt, d. h. j durchläuft nur die Werte j_0, j_0+1, j_0+2, \dots , wo j_0 die kleinste halbganze Zahl bedeutet, die sowohl $\geq J/2$ als $\geq K/2$ ist;

$$\text{für } J=0: j_0 = \begin{cases} K/2, & \text{wenn } K \text{ ungerade,} \\ (K+1)/2, & \text{wenn } K \text{ gerade.} \end{cases} \quad (1)$$

Das Pauliprinzip besagt nach (I, 9):

$$F(jj, \mathbf{r}) = \mp F(jj, -\mathbf{r}), \text{ jenachdem } J+K \begin{cases} \text{gerade} \\ \text{ungerade.} \end{cases} \quad (2)$$

¹⁾ Teil I: M. FIERZ und G. WENTZEL, Helv. Phys. Acta **17** (1944), S. 215. Die dortigen Bezeichnungen werden hier übernommen; Gleichungsnummern mit vorgesetzter I beziehen sich auf Teil I.

Wie im Falle $J=K=0$ untersuchen wir zunächst die Gleichung (I, 11) bzw. (I, 25), d. h. das *Problem zweier ruhender Nukleonen* (festgehaltene Ortskoordinaten). Mit den Bezeichnungen

$$a(jj) = a_j, \quad (jj | \Omega | j'j') = \Omega_{jj'}$$

haben wir das Gleichungssystem:

$$\left. \begin{aligned} & \left\{ -W + \varepsilon [(j + \frac{1}{2})^2 - 1] \right\} a_j + V \sum_{j' \geq j_0} \Omega_{jj'} a_{j'} = 0 \\ & (j = j_0, j_0 + 1, \dots). \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Indem wir uns für den Fall

$$J = 0, K \text{ beliebig}$$

entscheiden, können wir nach FIERZ¹⁾ ansetzen:

$$\left. \begin{aligned} \Omega_{jj} &= 1 - \frac{K(K+1)}{2j(j+1)}, \\ \Omega_{j,j-1} = \Omega_{j-1,j} &= \frac{\sqrt{j^2 - \left(\frac{K}{2}\right)^2} \cdot \sqrt{j^2 - \left(\frac{K+1}{2}\right)^2}}{j \cdot \sqrt{j^2 - 1/4}}, \\ \text{alle anderen Matrixelemente} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Für die folgenden Rechnungen empfiehlt es sich, die Quadratwurzeln zu beseitigen; dies kann z. B. durch die folgende Substitution geschehen, wobei wir gleichzeitig statt j den ganzzahligen Index $s = j + \frac{1}{2}$ einführen:

$$a_{s-\frac{1}{2}} = b_s \sqrt{\gamma_s}, \quad \text{wo} \quad (5)$$

$$\gamma_s = [s^2 - (\frac{1}{2})^2] [s^2 - (\frac{2}{2})^2] [s^2 - (\frac{3}{2})^2] \cdots [s^2 - (\frac{K}{2})^2]. \quad (6)$$

Beachtet man, dass

$$\frac{\gamma_{s-1}}{\gamma_s} = \frac{\left(j - \frac{K}{2}\right)\left(j - \frac{K+1}{2}\right)}{\left(j + \frac{K}{2}\right)\left(j + \frac{K+1}{2}\right)} \cdot \frac{j + \frac{1}{2}}{j - \frac{1}{2}} \quad (j = s - \frac{1}{2}),$$

so erhält man anstelle von (3), (4):

$$\left. \begin{aligned} & \left\{ -W + \varepsilon [s^2 - 1] \right\} b_s + V \sum_{s' \geq s_0} \bar{\Omega}_{ss'} b_{s'} = 0 \\ & (s \geq s_0 = j_0 + \frac{1}{2}); \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

¹⁾ M. FIERZ, Helv. Phys. Acta **17** (1944), S. 181, Gl. IV. Berichtigung zu I:
Diese Arbeit von FIERZ ist auch in Fussnote 2 S. 219 gemeint.

$$\left. \begin{aligned} \bar{\Omega}_{ss} &= \Omega_{jj} = 1 - \frac{K(K+1)}{2(s^2 - \frac{1}{4})}, \\ \bar{\Omega}_{s,s-1} &= \frac{\left(j - \frac{K}{2}\right)\left(j - \frac{K+1}{2}\right)}{j(j - \frac{1}{2})} = 1 + \frac{K(K-1)}{2(s-1)} - \frac{K(K+1)}{2s-1}, \\ \bar{\Omega}_{s-1,s} &= \frac{\left(j + \frac{K}{2}\right)\left(j + \frac{K+1}{2}\right)}{j(j + \frac{1}{2})} = 1 - \frac{K(K-1)}{2s} + \frac{K(K+1)}{2s-1}, \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

alle andern Matrixelemente = 0.

Die neue Matrix $\bar{\Omega}$ ist natürlich nicht-hermitisch, da die Substitution (5) nicht-unitär ist¹⁾.

Im Gleichungssystem (3) durchlaufen die Indices j, j' nur die Werte $\geq j_0$ (vgl. (1)). Seine Eigenwerte W sind aber gleichzeitig auch Eigenwerte des erweiterten Gleichungssystems, das man erhält, wenn man j, j' alle halbganzen Werte $\geq \frac{1}{2}$ durchlaufen lässt²⁾. Dies beruht darauf, dass nach (4)

$$\Omega_{j_0, j_0-1} = \Omega_{j_0-1, j_0} = 0$$

ist; infolgedessen *zerfällt* das erweiterte System in ein System von Gleichungen für die Komponenten $a_{j_0}, a_{j_0+1}, \dots$ allein, das mit (3) übereinstimmt und die Eigenwerte W besitzt, und in ein (endliches) System von Gleichungen für die Größen $a_{\frac{1}{2}}, a_{\frac{3}{2}}, \dots, a_{j_0-1}$, dessen Eigenwerte im allgemeinen nicht Eigenwerte von (3) sind; die letzteren Eigenwerte sind leicht zu berechnen und können daher mit den gesuchten Eigenwerten W nicht verwechselt werden; wir nennen sie „falsche Eigenwerte“. Analog erweitern wir jetzt auch das Gleichungssystem (7), indem wir die Indices s, s' über alle ganzzahligen Werte ≥ 1 laufen lassen. Allerdings zerfällt dieses System *nicht*, da nach (8)

$$\text{zwar } \bar{\Omega}_{s_0, s_0-1} = 0, \text{ aber } \bar{\Omega}_{s_0-1, s_0} \neq 0$$

ist (für $K \geq 2$) (die Matrix $\bar{\Omega}$ ist nur „halb reduziert“). Trotzdem stimmen sowohl seine „richtigen“ wie seine „falschen“ Eigenwerte mit denen von (3) überein, wie leicht zu sehen ist. Die zu den richtigen Eigenwerten W gehörigen Eigenvektoren des erweiterten Systems besitzen „falsche“ Komponenten $b_1, b_2, \dots, b_{s_0-1}$; doch braucht man diese nur nullzusetzen, um die Eigenvektoren des engeren Gleichungssystem (7) zu erhalten (bezüglich der Normie-

¹⁾ Durch die Substitution $a_{s-\frac{1}{2}} = b_s/\sqrt{\gamma_s}$ wäre man zur transponierten Matrix gelangt.

²⁾ Eine Erweiterung tritt natürlich nur ein für $j_0 \geq \frac{3}{2}$, d. h. $K \geq 2$.

rung vgl. § 2). Bei der Erweiterung können übrigens die Matrixkomponenten

$$\Omega_{jj'} \text{ mit } j < j_0, \text{ bzw. } \bar{\Omega}_{ss'} \text{ mit } s < s_0 \quad (9)$$

nach Belieben gewählt werden; die richtigen Eigenwerte W sind von dieser Wahl unabhängig, und dies kann geradezu als ein Kriterium für einen richtigen Eigenwert benutzt werden.

Wenn wir nun vom erweiterten System (7) ausgehen, wo also s und s' von 1 an laufen, so können wir bei den weiteren Rechnungen ähnlich vorgehen wie in I, § 4. Durch die Fourierreihe

$$\varphi(\eta) = \sum_{s=1}^{\infty} b_s \frac{\sin s\eta}{\sqrt{\pi}} (-1)^s \quad (10)$$

definieren wir eine Funktion der Variablen η mit den Eigenschaften:

$$\varphi(\eta + k \cdot 2\pi) = \varphi(\eta), \quad \varphi(-\eta) = -\varphi(\eta). \quad (11)$$

Ferner sei

$$D(\eta\xi) = \frac{1}{\pi} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{s'=1}^{\infty} \bar{\Omega}_{ss'} \cdot \sin s\eta \cdot \sin s'\xi \cdot (-1)^{s+s'}. \quad (12)$$

Aus den Gleichungen (7) folgt dann, dass die Funktion φ der Integro-Differential-Gleichung

$$\varphi''(\eta) + \left(\frac{W}{\varepsilon} + 1 \right) \varphi(\eta) - \frac{V}{\varepsilon} \int_{-\pi}^{\pi} D(\eta\xi) \varphi(\xi) d\xi = 0 \quad (13)$$

genügt. Dies ist die Verallgemeinerung der Mathieu-Gleichung (I, 33)¹⁾.

Zur Berechnung des Kerns D setzen wir die Ausdrücke (8) in (12) ein (und zwar vorläufig auch für $s < s_0$) und trennen die Terme mit verschiedener K -Abhängigkeit:

$$D = D_0 + \frac{K(K-1)}{2} D_1 + \frac{K(K+1)}{2} D_2. \quad (14)$$

Zunächst:

$$\begin{aligned} D_0(\eta\xi) &= \frac{1}{\pi} \sum_{s=1}^{\infty} \sin s\eta \{ \sin s\xi - \sin(s+1)\xi - \sin(s-1)\xi \} \\ &= (1 - 2 \cos \xi) \cdot \frac{1}{2\pi} \sum_{s=1}^{\infty} \{ \cos s(\xi - \eta) - \cos s(\xi + \eta) \}. \end{aligned}$$

¹⁾ Hätten wir, gemäss der Bemerkung in Fussnote 1, S. 254, mit der transponierten $\bar{\Omega}$ -Matrix gerechnet, so stände in (13) der Kern $D(\xi\eta)$ statt $D(\eta\xi)$.

Definieren wir eine periodische δ -Funktion durch

$$\delta(z) = \frac{1}{2\pi} \sum_{s=-\infty}^{\infty} e^{isz} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{2} + \sum_{s=1}^{\infty} \cos sz \right), \quad (15)$$

so wird

$$\begin{aligned} D_0(\eta\xi) &= (1 - 2 \cos \xi) \cdot \frac{1}{2} \{ \delta(\xi - \eta) - \delta(\xi + \eta) \}, \\ \int_{-\pi}^{\pi} D_0(\eta\xi) \varphi(\xi) d\xi &= (1 - 2 \cos \xi) \cdot \frac{1}{2} \{ \varphi(\eta) - \varphi(-\eta) \} \\ &= (1 - 2 \cos \xi) \cdot \varphi(\eta). \end{aligned} \quad (16)$$

Für $K = 0$ wird $D = D_0$, und (13) geht in die Mathieu-Gleichung (I, 33) über ($x = \pi + \eta$). Weiter ist:

$$\begin{aligned} D_1(\eta\xi) &= \frac{1}{\pi} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s} \sin s\xi \{ \sin(s-1)\eta - \sin(s+1)\eta \} \\ &= -\sin \eta \cdot \frac{1}{\pi} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s} \{ \sin s(\xi - \eta) + \sin s(\xi + \eta) \}. \end{aligned}$$

Aus (15) folgt aber durch Integration von $-z$ bis $+z$, wo $|z| < 2\pi$:

$$\begin{aligned} \int_{-z}^{+z} dz \delta(z) &\equiv \frac{z}{|z|} = \frac{1}{\pi} \left(z + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\sin sz}{s} \right), \\ \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\sin sz}{s} &= \frac{\pi}{2} \frac{z}{|z|} - \frac{z}{2} \quad (\text{für } |z| < 2\pi). \end{aligned}$$

Hiermit wird, falls ξ und η auf das Intervall $-\pi$ bis $+\pi$ beschränkt werden:

$$D_1(\eta\xi) = -\sin \eta \cdot \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{\xi - \eta}{|\xi - \eta|} + \frac{\xi + \eta}{|\xi + \eta|} \right] - \frac{1}{\pi} \xi \right\}.$$

Nun ist

$$\frac{1}{2} \left[\frac{\xi - \eta}{|\xi - \eta|} + \frac{\xi + \eta}{|\xi + \eta|} \right] = \begin{cases} 1, & \text{wenn } \xi > |\eta|, \\ -1, & \text{wenn } \xi < -|\eta|, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (17)$$

Beachtet man noch, dass φ ungerade ist, so folgt:

$$\int_{-\pi}^{\pi} D_1(\eta\xi) \varphi(\xi) d\xi = -2 \sin \eta \cdot \left[\int_{-\eta}^{\eta} \varphi(\xi) d\xi - \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \xi \varphi(\xi) d\xi \right].$$

Hierfür schreiben wir:

$$\int_{-\pi}^{\pi} D_1(\eta\xi) \varphi(\xi) d\xi = 2 \sin \eta \cdot \left[\int_0^{\eta} \varphi(\xi) d\xi + \Gamma \right], \quad (18)$$

$$\Gamma = - \int_0^\pi \left(1 - \frac{1}{\pi} \xi \right) \varphi(\xi) d\xi. \quad (19)$$

Schliesslich [vgl. (8), (12), (14)]:

$$D_2(\eta \xi) = \frac{1}{\pi} \sum_{s=1}^{\infty} \sin s \eta \left\{ \sin s \xi \cdot \left(-\frac{1}{s - \frac{1}{2}} + \frac{1}{s + \frac{1}{2}} \right) + \frac{\sin(s-1)\xi}{s - \frac{1}{2}} - \frac{\sin(s+1)\xi}{s + \frac{1}{2}} \right\}.$$

Ersetzt man in den Termen mit den Nennern $s + \frac{1}{2}$ die Zahl s durch $-s$, so erhält man folgende, von $-\infty$ bis $+\infty$ laufende Summe:

$$D_2(\eta \xi) = -\frac{1}{\pi} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{s - \frac{1}{2}} \sin s \eta \cdot \{ \sin s \xi - \sin(s-1)\xi \} \\ = -2 \sin \frac{\xi}{2} \cdot \frac{1}{\pi} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{s - \frac{1}{2}} \sin s \eta \cdot \cos(s - \frac{1}{2}) \xi.$$

Schreiben wir hier

$$\sin s \eta = \sin(s - \frac{1}{2}) \eta \cdot \cos \frac{\eta}{2} + \cos(s - \frac{1}{2}) \eta \cdot \sin \frac{\eta}{2},$$

so liefert der zweite Term aus Symmetriegründen keinen Beitrag zur Summe, und es kommt:

$$D_2(\eta \xi) = -\cos \frac{\eta}{2} \cdot \sin \frac{\xi}{2} \\ \cdot \frac{1}{\pi} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{s - \frac{1}{2}} \{ \sin(s - \frac{1}{2})(\eta - \xi) + \sin(s - \frac{1}{2})(\eta + \xi) \}.$$

Nun folgt aber aus (15) für $|z| < 2\pi^1$:

$$\int_{-z}^{+z} dz \delta(z) e^{-\frac{iz}{2}} \equiv \frac{z}{|z|} = \frac{1}{2\pi i} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{s - \frac{1}{2}} (e^{i(s - \frac{1}{2})z} - e^{-i(s - \frac{1}{2})z}) \\ = \frac{1}{\pi} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{\sin(s - \frac{1}{2})z}{s - \frac{1}{2}}.$$

Folglich

$$D_2(\eta \xi) = -\cos \frac{\eta}{2} \cdot \sin \frac{\xi}{2} \cdot \left[\frac{\eta - \xi}{|\eta - \xi|} + \frac{\eta + \xi}{|\eta + \xi|} \right].$$

¹⁾ Für beliebige z gilt:

$$\int_{-z}^{+z} dz \delta(z) e^{-\frac{iz}{2}} \equiv \frac{\sin z/2}{|\sin z/2|} = \frac{1}{\pi} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{\sin(s - \frac{1}{2})z}{s - \frac{1}{2}}.$$

Mit Hilfe von (17) (wo ξ und η zu vertauschen sind) findet man:

$$\int_{-\pi}^{\pi} D_2(\eta \xi) \varphi(\xi) d\xi = -4 \cos \frac{\eta}{2} \int_0^\eta \sin \frac{\xi}{2} \cdot \varphi(\xi) d\xi. \quad (20)$$

Wir setzen nun den Kern (14), unter Benutzung von (16), (18) und (20), in die Integro-Differential-Gleichung (13) ein. Mit den Abkürzungen

$$\alpha = \frac{W+V}{\varepsilon} + 1, \quad \beta = \sqrt{\frac{V}{\varepsilon}} {}^1) \quad (21)$$

lautet das Ergebnis:

$$\begin{aligned} \varphi''(\eta) + [\alpha - 2\beta^2(1 - \cos \eta)] \varphi(\eta) \\ + \beta^2 K(K+1) \cdot 2 \cos \frac{\eta}{2} \int_0^\eta \sin \frac{\xi}{2} \varphi(\xi) d\xi \\ - \beta^2 K(K-1) \cdot \sin \eta \left[\int_0^\eta \varphi(\xi) d\xi + \Gamma \right] = 0. \end{aligned} \quad (22)$$

Wir wollen noch untersuchen, wie der Kern D sich ändert, wenn wir von der oben erwähnten Freiheit Gebrauch machen, die \bar{Q} -Komponenten (9) abzuändern. Ändern wir z. B. in (12) die Komponenten $\bar{Q}_{1s'}$ ab, was für $K \geq 2$ ($s_0 \geq 2$) erlaubt ist, so ändert sich

$$\begin{aligned} D(\eta \xi) &\text{ um } \sin \eta \sum_{s'} c_{s'} \sin s' \xi, \\ \int_{-\pi}^{\pi} D(\eta \xi) \varphi(\xi) d\xi &\text{ um } \sin \eta \int_0^\pi f(\xi) \varphi(\xi) d\xi, \end{aligned}$$

wo $f(\xi)$ eine beliebige Funktion ist. Fügt man den betreffenden Zusatzterm in (13) bzw. (22) hinzu, so bedeutet dies nichts anderes als eine Änderung des Wertes der Konstanten Γ in (22); während diese bisher durch (19) definiert war, tritt nun an die Stelle des Faktors $(1 - \xi/\pi)$ im Integranden eine beliebige Funktion von ξ . Wir können daher Γ als eine beliebig wählbare Konstante auffassen; die „richtigen“ Eigenwerte W müssen von dieser Wahl unabhängig sein, was wir im Folgenden verifizieren werden. Die zugehörigen Eigenfunktionen φ sind natürlich von Γ abhängig; eine Änderung von Γ bewirkt in der Fourierreihe (10) eine Änderung der „falschen Komponenten“ $s < s_0$ (und umgekehrt). Das Gesagte gilt, wie bemerkt, nur für $K \geq 2$; doch braucht diese Einschrän-

¹⁾ V ist gemäss (I, 6) positiv angenommen.

kung nicht besonders vermerkt zu werden, da Γ in (22) mit $K(K-1)$ multipliziert ist und daher für $K = 0$ oder 1 garnicht auftritt. Entsprechend kann man für $K \geq 4$ ($s_0 \geq 3$) einen weiteren Term $\text{const} \cdot \sin 2\eta$ in (22) hinzufügen, und so fort; wir wollen aber einfachheitshalber davon absehen und nur den einen Γ -Term in (22) stehen lassen.

Wir kommen nun zur Bestimmung der Eigenwerte der Gleichungen (3) bzw. (22). Da es sich schon im einfachsten Fall $K = 0$ um das Eigenwertproblem einer Mathieu-Gleichung handelt, sind wir für $K > 0$ erst recht gezwungen, uns auf die Untersuchung der beiden Grenzfälle $V \ll \varepsilon$ und $V \gg \varepsilon$ zu beschränken und eventuell für $V \sim \varepsilon$ eine Interpolation zu versuchen. Der erstgenannte Grenzfall ist natürlich durch eine Störungsrechnung leicht zu erledigen: betrachtet man in der Matrix des Gleichungssystems (3) die Matrix $V \cdot Q$ als eine kleine Störung, so findet man für die Eigenwerte W folgende Entwicklung nach Potenzen von V/ε :

$$W = \varepsilon [(j + \frac{1}{2})^2 - 1] + V Q_{jj} + \frac{V^2}{2\varepsilon} \left(\frac{Q_{j,j-1}^2}{j} - \frac{Q_{j,j+1}^2}{j+1} \right) + \dots \quad (23)$$

$(j \geq j_0, \text{ d. h. } j \geq K/2; \quad V \ll \varepsilon).$

Führen wir statt j wieder die ganze Zahl $s = j + \frac{1}{2}$ ein, so können wir, unter Benutzung von (8), anstelle von (23) auch schreiben:

$$W_s = \varepsilon [s^2 - 1] + V \bar{Q}_{ss} + \frac{V^2}{\varepsilon} \left(\frac{\bar{Q}_{s,s-1} \bar{Q}_{s-1,s}}{2s-1} - \frac{\bar{Q}_{s,s+1} \bar{Q}_{s+1,s}}{2s+1} \right) + \dots \quad (24)$$

$(s \geq s_0, \text{ d. h. } s \geq \frac{K+1}{2}; \quad V \ll \varepsilon).$

Den anderen Grenzfall dagegen werden wir auf Grund der Gleichung (22) behandeln. In dieser nehmen wir also jetzt $\beta \gg 1$ an, was nach (21) $V \gg \varepsilon$ bedeutet.

§ 2. Grenzfall $\beta \gg 1$.

Für $K = 0$ lösten wir in I, § 4 die Schrödingergleichung (22), indem wir deren „Potentialfunktion“ in der Umgebung ihres Minimums ($x = \pi$, d. h. hier $\eta = 0$) entwickelten; wurden vom Cosinus nur die quadratischen Terme beibehalten, so ergaben sich die Eigenwerte eines harmonischen Oszillators; die höheren Entwicklungsterme entsprachen anharmonischen Störungen.

Für $K \neq 0$ liegt es nahe, eine analoge Entwicklung zu versuchen. Wir ersetzen daher in (22) $(1 - \cos \eta)$ durch $\eta^2/2$, und in

den K -abhängigen Termen $\cos \eta/2$ durch 1, $\sin \xi/2$ durch $\xi/2$ und $\sin \eta$ durch η . Es wird sich zeigen, dass die dabei vernachlässigten Terme wirklich nur anharmonische Störungen ergeben. Für die „nullte Näherung“ setzen wir also folgende Gleichung an:

$$\begin{aligned} \varphi''(\eta) + (\alpha - \beta^2 \eta^2) \varphi(\eta) + \beta^2 K(K+1) \int_0^\eta \xi \varphi(\xi) d\xi \\ - \beta^2 K(K-1) \eta \left[\int_0^\eta \varphi(\xi) d\xi + \Gamma \right] = 0. \end{aligned} \quad (25)$$

Differenziert man diese Gleichung K -mal nach η , so folgt [$\varphi^{(l)}$ bedeutet die l -te Ableitung von φ]:

$$\varphi^{(K+2)}(\eta) + (\alpha - \beta^2 \eta^2) \varphi^{(K)}(\eta) = 0; \quad (26)$$

d. h. die Funktion

$$\varphi^{(K)} = \psi \quad (27)$$

genügt der Oszillatorgleichung:

$$\psi'' + (\alpha - \beta^2 \eta^2) \psi = 0. \quad (28)$$

Von den Lösungen dieser Gleichung kommen nur die — für grosse $|\eta|$ exponentiell abklingenden — Oszillatoren-Eigenfunktionen in Betracht, da nur sie den (später zu besprechenden) Normierungsbedingungen unterworfen werden können. Folglich sind die Eigenwerte des Parameters α :

$$\alpha_n = \beta(2n+1). \quad (29)$$

Da aber φ nach Definition eine ungerade Funktion ist, gilt für ihre K -te Abteilung ψ_n :

$$\psi_n(-\eta) = (-1)^{K+1} \cdot \psi_n(\eta). \quad (30)$$

Für die durch (29) definierte Oszillationsquantenzahl n bedeutet dies:

$$n+K = \text{ungerade Zahl}; \quad (31)$$

$$\left. \begin{array}{l} n = 1, 3, 5, \dots, \text{ wenn } K \text{ gerade,} \\ n = 0, 2, 4, \dots, \text{ wenn } K \text{ ungerade.} \end{array} \right\} \quad (32)$$

Die entsprechenden Eigenwerte W sind nach (21) und (29):

$$W_{(n)} = -V + \sqrt{\varepsilon V} (2n+1) + \dots \quad (33)$$

In dieser „harmonischen Näherung“ sind also die Eigenwerte mit $K = 2, 4, \dots$ die gleichen wie die früher (I, § 4) für $K = 0$ gefun-

denen; für $K = 1, 3, 5, \dots$ dagegen liegen alle Eigenwerte nach (32) um $2\sqrt{\varepsilon V}$ tiefer. Die K -Entartung, d. h. das Zusammenfallen der zu geraden bzw. ungeraden K -Werten gehörigen Eigenwerte, besteht, wie sich zeigen wird, nur solange die Anharmonizitäten vernachlässigt werden. Alle gefundenen Eigenwerte sind „richtige“ Eigenwerte im Sinne des § 1, d. h. Eigenwerte des ursprünglichen (nicht erweiterten) Gleichungssystems (3), wie schon aus ihrer Unabhängigkeit von Γ folgt.

Nach (27) sind die Eigenfunktionen φ der Gleichung (25) durch K -malige Integration der Oszillator-Eigenfunktionen ψ zu erhalten. Durch wiederholte Integration zwischen 0 und η bilden wir zunächst die Funktionen:

$$\left. \begin{aligned} \psi^{(-1)}(\eta) &= \int_0^\eta \psi(\xi) d\xi, & \psi^{(-2)}(\eta) &= \int_0^\eta \psi^{(-1)}(\xi) d\xi = \int_0^\eta \psi(\xi)(\eta - \xi) d\xi, \\ \cdots, \quad \psi^{(-l-1)}(\eta) &= \int_0^\eta \psi^{(-l)}(\xi) d\xi = \frac{1}{l!} \int_0^\eta \psi(\xi)(\eta - \xi)^l d\xi. \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

Dann ist offenbar

$$\varphi(\eta) = \psi^{(-K)}(\eta) + P_{K-1}(\eta), \quad (35)$$

wo P_{K-1} ein ungerades Polynom höchstens $(K-1)$ -ten Grades ist. Geht man mit (35) in die Gleichung (25) ein, und benutzt man die Gleichung, die aus der Oszillatorgleichung (28) durch K -malige Integration zwischen 0 und η folgt, so erhält man lineare Gleichungen für die Koeffizienten des Polynoms, die dieses eindeutig zu bestimmen gestatten. Seine Kenntnis ist aber für das Folgende nicht nötig. Zu beachten ist, dass die Koeffizienten des Polynoms vom Parameter Γ abhängen; dies entspricht dem in § 1 hervorgehobenen Umstand, dass in der Fourierreihe (10) die „falschen Komponenten“ b_s ($s < s_0$) von Γ abhängig sind. Natürlich ist die Formel (35) für die Eigenfunktionen φ , wegen der in der harmonischen Näherung gemachten Vernachlässigungen, nur für $|\eta| \leq 1$ gültig; auf die Außenbereiche ($\eta \rightarrow \pm \pi$) kommen wir später zurück.

Als nächstes berechnen wir die durch die „Anharmonizitäten“ hervorgerufenen Eigenwertstörungen. Indem wir in der Entwicklung der trigonometrischen Funktionen in (22) jeweils einen Schritt weiter gehen [also z. B.

$$2 \cos \frac{\eta}{2} \sin \frac{\xi}{2} \text{ durch } \xi - \frac{1}{8} \xi \eta^2 - \frac{1}{24} \xi^3$$

ersetzen], kommt anstelle von (25):

$$\left. \begin{aligned} & \varphi''(\eta) + (\alpha - \beta^2 \eta^2) \varphi(\eta) + \beta^2 K(K+1) \int_0^\eta \xi \varphi(\xi) d\xi \\ & \quad - \beta^2 K(K-1) \eta \left[\int_0^\eta \varphi(\xi) d\xi + \Gamma \right] \\ = \beta^2 & \left\{ -\frac{1}{12} \eta^4 \varphi(\eta) + K(K+1) \left[\frac{1}{8} \eta^2 \int_0^\eta \xi \varphi(\xi) d\xi + \frac{1}{24} \int_0^\eta \xi^3 \varphi(\xi) d\xi \right] \right. \\ & \quad \left. - K(K-1) \frac{1}{6} \eta^3 \left[\int_0^\eta \varphi(\xi) d\xi + \Gamma \right] \right\} \equiv U(\eta). \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

Die kleinen Korrekturterme haben wir rechterhand in der Störungsfunktion U zusammengefasst; in ihr kann in erster Näherung φ durch seinen Wert nullter Näherung (35) ausgedrückt werden. Mit den Definitionen (34) (bezüglich φ statt ψ) wird

$$\begin{aligned} \int_0^\eta \xi \varphi d\xi &= \eta \varphi^{(-1)} - \varphi^{(-2)}, \\ \int_0^\eta \xi^3 \varphi d\xi &= \eta^3 \varphi^{(-1)} - 3 \eta^2 \varphi^{(-2)} + 6 \eta \varphi^{(-3)} - 6 \varphi^{(-4)}; \end{aligned}$$

folglich

$$U = \beta^2 \left\{ -\frac{1}{12} \eta^4 \varphi - K(K-1) \frac{1}{6} \eta^3 [\varphi^{(-1)} + \Gamma] + K(K+1) \left[\frac{1}{6} \eta^3 \varphi^{(-1)} - \frac{1}{4} \eta^2 \varphi^{(-2)} + \frac{1}{4} \eta \varphi^{(-3)} - \frac{1}{4} \varphi^{(-4)} \right] \right\} \quad (37)$$

Durch K -malige Differentiation der Gleichung (36) folgt unter Benutzung von Früherem:

$$\varphi^{(K+2)} + (\alpha - \beta^2 \eta^2) \varphi^{(K)} = U^{(K)}, \quad (38)$$

und für die K -te Ableitung der Störungsfunktion erhält man aus (37) durch eine längere Rechnung:

$$U^{(K)} = \beta^2 \left\{ -\frac{1}{12} \eta^4 \varphi^{(K)} + \frac{K(K+1)}{4} \eta [\eta \varphi^{(K-2)} - \varphi^{(K-3)}] + \frac{K(K^2-1)}{12} [2 \eta \varphi^{(K-3)} - 3 \varphi^{(K-4)}] - K(K-1) \Gamma \eta^{(K-2)} \right\}. \quad (39)$$

Der Term $\sim \Gamma$ kommt nur für $K \geq 2$ vor; $\eta^{(K-2)}$ bedeutet die $(K-2)$ -te Ableitung von η , d. h.:

$$\eta^{(0)} = \eta, \quad \eta^{(1)} = 1, \quad \eta^{(2)} = \eta^{(3)} = \dots = 0.$$

Der Ausdruck (39) lässt sich vereinfachen durch Berücksichtigung

der Gleichung (25), die φ in nullter Näherung bestimmt. Differenziert man nämlich diese Gleichung $(K - 2)$ -mal (unter der Voraussetzung $K \geq 2$), bzw. $(K - 1)$ -mal (unter der Voraussetzung $K \geq 1$), so kommt:

$$\begin{aligned} \varphi^{(K)} + (\alpha - \beta^2 \eta^2) \varphi^{(K-2)} + 2 \beta^2 [2 \eta \varphi^{(K-3)} - 3 \varphi^{(K-4)}] \\ - \beta^2 K(K-1) \Gamma \eta^{(K-2)} = 0 \quad (K \geq 2), \\ \varphi^{(K+1)} + (\alpha - \beta^2 \eta^2) \varphi^{(K-1)} + 2 \beta^2 [\eta \varphi^{(K-2)} - \varphi^{(K-3)}] \\ - \beta^2 K(K-1) \Gamma \eta^{(K-1)} = 0 \quad (K \geq 1). \end{aligned}$$

Die hier durch eckige Klammern hervorgehobenen Ausdrücke sind dieselben wie in (39); diese Ausdrücke (die nur für $K \geq 2$ bzw. $K \geq 1$ in (39) auftreten) können daher aus (39) eliminiert werden. Das Ergebnis lautet:

$$\begin{aligned} U^{(K)} = -\frac{1}{12} \beta^2 \eta^4 \varphi^{(K)} - \frac{K(K+1)}{8} \eta [\varphi^{(K+1)} + (\alpha - \beta^2 \eta^2) \varphi^{(K-1)}] \\ - \frac{K(K^2-1)}{24} [\varphi^{(K)} + (\alpha - \beta^2 \eta^2) \varphi^{(K-2)}]. \quad (40) \end{aligned}$$

Die Terme $\sim \Gamma$ haben sich gerade fortgehoben (nur für $K = 2$ und $K = 3$ ist dies nicht-trivial). Zu beachten ist aber, dass das in φ enthaltene Polynom noch von Γ abhängt. α bedeutet in (40) den zur Oszillator-Eigenfunktion $\varphi^{(K)} = \psi$ gehörigen Eigenwert (29).

Kehren wir nun zur Gleichung (38) zurück und denken wir uns dort linkerhand die (gestörte) Funktion $\varphi^{(K)}$ nach den Oszillator-Eigenfunktionen ψ_n entwickelt, so werden wir auf das Eigenwertproblem der Matrix

$$\alpha_n \cdot \delta_{mn} + U_{mn}^{(K)} \quad (41)$$

geführt, wo

$$\begin{aligned} U_{mn}^{(K)} = \int d\eta \psi_m \left\{ -\frac{1}{12} \beta^2 \eta^4 \varphi_n^{(K)} - \frac{K(K+1)}{8} \eta [\varphi_n^{(K+1)} + (\alpha_n - \beta^2 \eta^2) \varphi_n^{(K-1)}] \right. \\ \left. - \frac{K(K^2-1)}{24} [\varphi_n^{(K)} + (\alpha_n - \beta^2 \eta^2) \varphi_n^{(K-2)}] \right\}. \quad (42) \end{aligned}$$

φ_n bedeutet hier die ungestörte Eigenfunktion (35); $\varphi_n^{(K)} = \psi_n$, $\int d\eta \psi_n^2 = 1$. [Die Integration nach η braucht nur über den Bereich erstreckt zu werden, in welchem die Oszillatorkfunktion ψ_m merklich von null verschieden ist: $|\eta| \lesssim \beta^{-1/2} \ll 1$; die Kenntnis der Funktion φ_n für grössere $|\eta|$ -Werte ist also hier nicht erforderlich.] Im Integranden in (42) kann man zufolge der Oszillatorgleichung setzen:

$$\psi_m(\alpha_n - \beta^2 \eta^2) = \psi_m(\alpha_n - \alpha_m) - \psi_m''.$$

Im Diagonalelement $U_{nn}^{(K)}$, das hier allein interessiert, verschwindet daher der mit dem Faktor $K(K^2 - 1)$ versehene Term, wie man durch partielle Integration unmittelbar sieht. Für den anderen K -abhängigen Term findet man:

$$\begin{aligned}\int d\eta \cdot \eta [\psi_n \varphi_n^{(K+1)} - \psi_n'' \varphi_n^{(K-1)}] &= \int d\eta [2\eta \psi_n \psi_n' + \psi_n' \varphi_n^{(K-1)}] \\ &= \int d\eta \left[\eta \frac{\partial}{\partial \eta} (\psi_n^2) - \psi_n^2 \right] = -2.\end{aligned}$$

Bei den partiellen Integrationen sind die Γ -abhängigen Polynome herausgefallen. Der von K unabhängige Term in (42) (für $m = n$) entspricht der uns schon bekannten Anharmonizität für $K = 0$ (Mathieu-Gleichung). Somit wird

$$U_{nn}^{(K)} = \frac{K(K+1)}{4} - \frac{n(n+1)}{8} - \frac{1}{16}. \quad (43)$$

Nach (29) und (41) ist der korrigierte Eigenwert α in erster Näherung:

$$\alpha = \beta(2n+1) + U_{nn}^{(K)};$$

führen wir ihn in (21) ein, so erhalten wir folgende — für $\beta \gg 1$ oder $V \gg \varepsilon$ gültige — Eigenwertformel:

$$\left. \begin{aligned}W_{(n)} &= -V + \sqrt{\varepsilon V} (2n+1) + \varepsilon \left[\frac{K(K+1)}{4} - \frac{n(n+1)}{8} - \frac{17}{16} \right] + \dots; \\ n &= 0, 2, 4, \dots, \text{ wenn } K \text{ ungerade,} \\ n &= 1, 3, 5, \dots, \text{ wenn } K \text{ gerade.}\end{aligned} \right\} \quad (44)$$

Es sei hier daran erinnert, dass die ganzen vorstehenden Rechnungen sich auf Deuteronzustände mit dem Spin $J = 0$ beziehen. Wie eingangs bemerkt, können aber die Quantenzahlen J und K jederzeit vertauscht werden; die Formel (44) gilt also, wenn wir in ihr J anstelle von K schreiben, auch für Zustände beliebigen Spins, sofern deren „isotoper Spin“ $K = 0$ ist (Ladungssingletts).

Unter den betrachteten Eigenwerten — mit $J = 0$ oder $K = 0$ — sind die tiefsten diejenigen mit den Quantenzahlen

$$\left. \begin{aligned}n &= 0, J = 0, K = 1 \quad \text{und} \quad n = 0, J = 1, K = 0; \\ W_{(0)} &= -V + \sqrt{\varepsilon V} - \frac{9}{16} \varepsilon + \dots.\end{aligned} \right\} \quad (45)$$

Wir werden sie (vgl. § 3) den untersten Deuteronzuständen 1S und 3S zuzuordnen haben, was mit dem Pauliprinzip verträglich ist. Von den Eigenwerten $J = K = 0$, die wir schon in I, § 4 betrachteten und die zu P -, F -...-Termen gehören, liegt der tiefste ($n = 1$)

um etwa $2\sqrt{\epsilon V}$ höher. Bei festgehaltener Oszillationsquantenzahl n ist die K - bzw. J -Abhängigkeit der Eigenwerte W durch die Terme

$$\frac{\epsilon}{4} K(K+1) \quad \text{bzw.} \quad \frac{\epsilon}{4} J(J+1)$$

gegeben; die quadratische Abhängigkeit ist eine ganz ähnliche wie in der „Isobaren-Energie“ des einzelnen Nukleons: $\frac{\epsilon}{2} j(j+1)$.

Die Zuordnung der Eigenwerte (44) zu den für den anderen Grenzfall ($\beta \ll 1$) berechneten Eigenwerten W_s (24) wird durch folgende Verknüpfung der Quantenzahlen n in (44) und s in (24) hergestellt:

$$2s = n + J + K + 1. \quad (46)$$

Dadurch sind nämlich, bei festen Werten von J und K , die tiefsten Eigenwerte (24) und (44) einander zugeordnet, ebenso die zweit-tiefsten Eigenwerte (24) und (44), desgleichen die nächst höheren usw. Eine andere Zuordnung ist nicht möglich, da sich sonst bei Variation des Parameters β verschiedene Eigenwerte mit gleichem J und K überschneiden müssten, was ausgeschlossen ist. —

Zwei Bemerkungen zum Grenzfall $\beta \gg 1$ sind noch nachzu-tragen. Wie schon hervorgehoben wurde, bestimmt die Oszillator-näherung den Verlauf der Eigenfunktionen φ nur in der Nähe des Punktes $\eta = 0$ ($|\eta| \ll 1$), und ihr Verlauf weiter aussen bleibt noch zu untersuchen. Wegen des ungeraden Charakters von φ genügt es, die eine Hälfte des Periodizitätsintervalls zu betrachten: $0 < \eta < \pi$. Die Oszillator-Eigenfunktionen ψ_n sind (sofern $n \sim 1$) nur für $\eta \lesssim \beta^{-\frac{1}{2}}$ merklich von null verschieden; gehen wir nun in das Gebiet $\beta^{-\frac{1}{2}} \ll \eta \ll 1$, wo zwar die Näherungsformel (35) noch brauchbar, ψ aber schon fast auf null abgeklungen ist, so wird $\psi^{(-K)}$, und damit nach (35) auch φ , asymptotisch gleich einem Polynom ($K-1$)-ten Grades:

$$\varphi = c_1 \eta^{K-1} + c_2 \eta^{K-2} + \dots \quad \text{für } \beta^{-\frac{1}{2}} \ll \eta \ll 1.$$

Von diesen Termen ist der erste — oder wenn $c_1 = 0$ ist¹⁾, der zweite — gross gegen die weiteren Terme, wie man leicht abschätzt. Wir behaupten nun, dass der weitere Verlauf der Eigenfunktion φ ,

¹⁾ Da das in (35) eingehende ungerade Polynom P_{K-1} von dem frei wählbaren Parameter Γ abhängt, kann man durch Wahl von Γ erreichen, dass entweder $c_1 = 0$ (wenn K gerade) oder $c_2 = 0$ (wenn K ungerade). Diese Wahl von Γ vereinfacht die für das Folgende erforderlichen Abschätzungen. — Für $K=1$ ist natürlich $c_2 \equiv 0$.

wenn man η gegen π anwachsen lässt, durch folgende Formel dargestellt wird:

$$\varphi \cong \cos \frac{\eta}{2} \cdot \left[c_1 \left(2 \sin \frac{\eta}{2} \right)^{K-1} + c_2 \left(2 \sin \frac{\eta}{2} \right)^{K-2} \right] \quad (47)$$

für $\beta^{-\frac{1}{2}} \ll \eta \leq \pi$.

Geht man nämlich mit diesem Ansatz in die (exakte) Bestimmungsgleichung (22) ein, so heben sich dort die mit dem Faktor β^2 versehnen Terme — ohne den Γ -Term — gerade fort, und die übrigbleibenden Terme¹⁾ sind klein gegen die einzelnen β^2 -Terme (für $\eta \gg \beta^{-\frac{1}{2}}$). Man wird daher φ als eine Entwicklung (nach β^{-1}) ansetzen können, deren höchste Terme durch (47) gegeben sind. Diese gehen aber auch für $\eta \ll 1$ in $c_1 \eta^{K-1} + c_2 \eta^{K-2}$ über, womit der Anschluss an die Oszillatornäherung hergestellt ist. Für $\eta = \pi$ verschwindet φ (linear), und für $\eta > \pi$ gilt — wegen der Symmetrieeigenschaften (11) — wieder die gleiche Formel (47); der Übergang in den benachbarten Periodizitätsbereich vollzieht sich also in völlig regulärer Weise.

Die zweite Bemerkung betrifft die *Normierung* der Eigenvektoren des Gleichungssystems (3). Bei den Anwendungen in I, § 3 [vgl. (I, 12 und 24)] wurde $\sum_j a_j^2 = 1$ verlangt; nach (5) bedeutet dies:

$$\sum_s \gamma_s b_s^2 = 1. \quad (48)$$

Da γ_s nach (6) für $s < s_0$ verschwindet, kann die Summe in (48) über alle s -Werte (von 1 an) erstreckt werden. Wir setzen gemäss (10)

$$b_s = (-1)^s \int_{-\pi}^{\pi} d\eta \frac{\sin s\eta}{\sqrt{\pi}} \varphi(\eta) \quad (49)$$

und bilden $\gamma_s b_s$, wobei wir in γ_s (6) $s^2 \sin s\eta$ durch $-\partial^2 \sin s\eta / \partial \eta^2$ ersetzen und die Differentialoperatoren vermöge partieller Integration an φ angreifen lassen:

$$\left. \begin{aligned} \gamma_s b_s &= (-1)^{K+s} \int_{-\pi}^{\pi} d\eta \frac{\sin s\eta}{\sqrt{\pi}} \Delta_K \varphi(\eta), \quad \text{wo} \\ \Delta_K &= \left[\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \left(\frac{1}{2} \right)^2 \right] \left[\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \left(\frac{2}{2} \right)^2 \right] \left[\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \left(\frac{3}{2} \right)^2 \right] \cdots \left[\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \left(\frac{K}{2} \right)^2 \right] \end{aligned} \right\} \quad (50)$$

¹⁾ D. h. $\varphi'' + \alpha \varphi$ und der Γ -Term; ferner gehören hierher die Beiträge der kleinen ξ -Werte zu den Integralen von 0 bis η in (22) [für $\xi \gtrsim \beta^{-\frac{1}{2}}$ ist (47) durch (35) zu ersetzen!].

Aus (49) und (50) folgt, bei Berücksichtigung von (11):

$$\sum_s \gamma_s b_s^2 = (-1)^K \int_{-\pi}^{\pi} d\eta \varphi \cdot \Delta_K \varphi. \quad (51)$$

Nehmen wir nun wieder $\beta \gg 1$ an, so liefert der Bereich $\beta^{-1/2} \ll \eta \leq \pi$ keinen Beitrag zum Normierungsintegral; denn dort kann φ nach (47) in der Form geschrieben werden:

$$\varphi = \text{Realteil von } \left\{ \lambda_1 e^{\frac{i\eta}{2}} + \lambda_2 e^{i\eta} + \dots + \lambda_K e^{\frac{iK\eta}{2}} \right\},$$

und infolgedessen ist

$$\Delta_K \varphi = 0 \quad \text{für } \beta^{-1/2} \ll |\eta| \leq \pi. \quad (52)$$

Anderseits ist im Oszillationsbereich ($|\eta| \gtrsim \beta^{-1/2}$) Δ_K durch $\partial^2 K / \partial \eta^2 K$ ersetzbar; damit vernachlässigt man nur Terme der relativen Ordnung β^{-1} . Daher wird nach (51) und (27):

$$\sum_s \gamma_s b_s^2 = (-1)^K \int d\eta \varphi \varphi^{(2K)} = \int d\eta [\varphi^{(K)}]^2 = \int d\eta \psi^2.$$

Die Normierungsbedingung (48) bedeutet daher, wenn Fehler der Ordnung β^{-1} in Kauf genommen werden, nichts anderes als

$$\int d\eta \psi^2 = 1. \quad (53)$$

In der gleichen Weise kann man auch den Erwartungswert von $s^2 = (j + \frac{1}{2})^2$ berechnen; man findet dafür wieder die Formel (I, 38):

$$\overline{s^2} = \sum_s s^2 \gamma_s b_s^2 = - \int d\eta \psi \psi'' = \beta (n + \frac{1}{2}). \quad (54)$$

§ 3. Diskussion der Ergebnisse.

Das Problem (3), das wir bis jetzt behandelt haben, entspricht dem Deuteron mit festgehaltenen Ortskoordinaten. Wir gehen nun zum eigentlichen Deuteronproblem über, indem wir — gemäss den Ausführungen in I, §§ 2 und 3 — die Energie der Relativbewegung berücksichtigen; und zwar stützen wir uns dabei wieder auf die beiden in I, § 3 entwickelten Näherungsmethoden.

A. Adiabaten-Verfahren.

Bei dieser Methode ist in (3) bzw. (I, 11) V als Funktion des Nukleonabstandes r zu betrachten; dadurch werden die Eigenwerte W Funktionen von r , und diese Funktionen sind die Poten-

tialfunktionen der „adiabatischen“ Näherung. Die tiefstliegende Potentialkurve gehört nach Obigem zu den Quantenzahlen

$J = 0, K = 1$ oder $J = 1, K = 0; n = 0, s = 1$:

$$W_{(0)}(r) = \begin{cases} -\frac{1}{3} V(r) - \frac{5}{27} \frac{[V(r)]^2}{\varepsilon} + \dots & \text{für } V(r) \ll \varepsilon, \\ -V(r) + \sqrt{\varepsilon V(r)} - \frac{9}{16} \varepsilon + \dots & \text{für } V(r) \gg \varepsilon \end{cases} \quad (55)$$

[vgl. (24) mit (8), bzw. (45)]. Nach dem Pauliprinzip (2) [vgl. auch (I, 13)] sind die betreffenden Schrödingerfunktionen gerade [$f(-r) = f(r)$]. Als tiefste Deuteronzustände haben wir daher zwei S -Zustände zu erwarten; dass beide Zustände hier dieselbe Energie erhalten, liegt natürlich an der Vernachlässigung der „Tensorkraft“. Der eine Zustand ($J = 0$) ist ein 1S -Zustand, und zwar ein Ladungs-triplett: zu $K = 1$ gehören (vgl. I, § 2) die isotopen Spinkomponenten $N = -1, 0, +1$, d. h. die Ladungen $N + 1 = 0, 1, 2$; wir haben diesen Zustand mit dem (wahrscheinlich instabilen) 1S -Zustand zu identifizieren, der aus der wellenmechanischen Theorie der Neutron-Proton-Streuung und der Proton-Proton-Streuung bekannt ist. Der andere tiefe Zustand ($J = 1$), der mit dem Deuteron-Grundzustand zu identifizieren ist, ist ein 3S -Zustand und ein Ladungs-singlett ($K = 0, N = 0$, Ladung $N + 1 = 1$).

Es ist klar, dass man bei einem beliebig vorgegebenen Wert der Isobaren-Konstanten ε die Wechselwirkungsfunktion $V(r)$ so einrichten kann, dass die adiabatische Potentialfunktion (55) für den 3S -Zustand als tiefsten Zustand die richtige Bindungsenergie (≈ 2 MeV) liefert. Man kann daher aus der Erfahrungstatsache allein, dass die untersten Deuteronzustände die oben charakterisierten 3S - und 1S -Zustände sind, noch nicht auf den Wert der Isobaren-Energie schliessen; insbesondere können kleine Werte von ε nicht ausgeschlossen werden. Dagegen hängt die Reihenfolge der nächst höheren Zustände bzw. Potentialkurven sehr wesentlich von ε ab, genauer gesagt vom Verhältnis ε/\bar{V} (vgl. I). Da die Annahme $\varepsilon \gg \bar{V}$ auf die bekannte ältere Theorie zurückführt, beschränken wir uns hier auf die Diskussion des Falles $\varepsilon \ll \bar{V}$.

Wie in I, § 4 definieren wir einen kritischen Abstand r_ε durch $V(r_\varepsilon) = \varepsilon$; im Bereich $r \ll r_\varepsilon$, wo $V(r) \gg \varepsilon$ ist, kann die Formel (44) angewendet werden. Im betrachteten Falle $\varepsilon \ll \bar{V}$ ist r_ε so gross, dass man bei der Berechnung diskreter Energie-Eigenwerte (mit exponentiell abklingenden Schrödingerfunktionen) die Potentialkurven (44) auch für $r \gtrsim r_\varepsilon$ gelten lassen kann; der dabei begangene Fehler kann durch eine Störungsrechnung korrigiert wer-

den. Jedenfalls wird die adiabatische Wechselwirkung im „wesentlichen“ r -Bereich durch (44) beschrieben. In diesem Bereich ist die Reihenfolge der Potentialkurven (44) in erster Linie durch den Term $\sqrt{\epsilon} V(2n + 1)$ und erst in zweiter Linie durch den K -abhängigen Term $\sim \epsilon$ bestimmt. Der tiefsten Kurve $n = 0, K = 1$ folgt daher als nächst höhere die Kurve $n = 0, K = 3$; der Abstand der beiden Kurven ist $\frac{5}{2}\epsilon$, also von r unabhängig [für $r \ll r_\epsilon$; bei zunehmendem r steigt der Abstand nach (24) und (46) auf 3ϵ]. Weiter folgen, ebenfalls in (fast) konstantem Abstand, die Kurven $n = 0, K = 5, 7, \dots$. Wegen der Vertauschbarkeit von J und K gehören zu den gleichen Kurven auch Zustände mit $K = 0, J = 1, 3, 5, \dots$. Da $J + K$ in allen diesen Fällen ungerade ist, sind die betreffenden Schrödingerfunktionen gerade (S -, D -, \dots -Terme). Daher muss sich z. B. der stabile S -Zustand auf allen jenen Potentialkurven wiederholen. Diese S -Zustände sind „isobare Zustände“ des Deuterons, die mit dem Grundzustand eine „homologe Reihe“ bilden. Betrachten wir nur die untersten¹⁾ dieser Deuteron-Isobaren:

$$J = 0, K = 3 ({}^1S) \quad \text{und} \quad J = 3, K = 0 ({}^7S). \quad (56)$$

Der zum Spin $J = 3$ gehörige Septett- S -Zustand ist ein Ladungs singlett und kommt nur mit der Ladung $N + 1 = 1$ vor (Wasserstoff); der 1S -Term dagegen ist ein Ladungsseptett, d. h. er kann Ladungszahlen zwischen -2 und $+4$ besitzen. Die Anregungsenergie dieser isobaren Zustände ist durch den Abstand der Potentialkurven $K = 3$ und $K = 1$ gegeben, beträgt also $\frac{5}{2}\epsilon$ [bzw. ein wenig mehr, da der Kurven-Abstand, wie bemerkt, für $r \rightarrow \infty$ etwas zunimmt]; $\frac{5}{2}\epsilon$ ist gleich $5/3$ der Anregungsenergie der untersten Proton-Isobaren ($\frac{3}{2}\epsilon$). Da der Deuteron-Grundzustand in Wirklichkeit nur eine recht kleine Bindungsenergie besitzt und seine Stabilität möglicherweise nur der Tensorkraft verdankt, die hier ignoriert wird, können wir allerdings nicht sicher entscheiden, ob die betrachteten Deuteron-Isobaren wirklich als stabil anzusehen sind; ihre Stabilität wird aber sehr begünstigt durch den erwähnten stärkeren Anstieg ihrer Potentialkurven im Außenbereich ($r \gg r_\epsilon$). — Auf die Zustände mit $n \geq 1$ brauchen wir hier nicht einzugehen; die unterste dieser Potentialkurven ($n = 1, J = K = 0$) wurde nämlich schon in I, § 4 besprochen, und die höheren Terme dürften vorerst wenig Interesse haben.

¹⁾ Gemeint sind natürlich nur die tiefsten Zustände unter den hier betrachteten mit $J = 0$ oder $K = 0$; über die anderen Zustände kann erst in einem späteren Teil III berichtet werden.

In I, § 3 wurde gezeigt, dass man die adiabatische Näherung wie in der Molekültheorie als „nullte Näherung“ einer Störungsrechnung verwenden kann. Die Störungsmatrix bestimmt sich durch die in (I, 15) definierten Funktionen $A_{mn}(r)$ und $B_{mn}(r)$. Wir schreiben diese, in Anpassung an die hier verwendete Bezeichnungsweise:

$$A_{mn} = -\frac{2}{M_p} \sum_j a_{j(m)} \frac{\partial a_{j(n)}}{\partial r}, \quad B_{mn} = -\frac{1}{M_p} \sum_j a_{j(m)} \frac{\partial^2 a_{j(n)}}{\partial r^2}; \quad (57)$$

dabei bedeutet $a_{j(n)}$ den zum Eigenwert $W_{(n)}$ gehörigen Eigenvektor des Gleichungssystems (3), der jetzt natürlich r -abhängig ist ($V = V(r)$). Zur Ausrechnung für $r \ll r_\varepsilon$ schreiben wir gemäss (5)

$$\sum_j a_{j(m)} \frac{\partial^r a_{j(n)}}{\partial r^r} = \sum_s \gamma_s b_{s(m)} \frac{\partial^r b_{s(n)}}{\partial r^r},$$

wo die s -Summe — wie in (48) — über alle positiven s -Werte erstreckt werden kann. Benutzt man die Formeln (49), (50) und (52), so erhält man — durch die gleichen Überlegungen, die zur Normierungsbedingung (53) führten, und mit der gleichen Genauigkeit —:

$$\sum_j a_{j(m)} \frac{\partial^r a_{j(n)}}{\partial r^r} = \int d\eta \psi_m \frac{\partial^r \psi_n}{\partial r^r}. \quad (58)$$

Setzt man dies in (57) ein, so kommt man [vgl. auch (53)] genau zu den Formeln (I, 41 und 42) zurück. Die Quantenzahl K bzw. J ist also aus dem Ergebnis herausgefallen. Allerdings bestimmt sie gemäss (32) die Parität der Oszillationsquantenzahlen m, n .

Da hinsichtlich der Größenordnung der Matrixelemente A_{mn} , B_{mn} und der Abstände der adiabatischen Potentialkurven (für feste Werte von J, K) kein Unterschied gegenüber dem früher behandelten Fall $J = K = 0$ besteht, können die dortigen Folgerungen betreffend den Gültigkeitsbereich der adiabatischen Näherung und die Konvergenz der Störungsrechnung unverändert übernommen werden¹⁾. Wir dürfen also auch hier die Isobaren-Konstante ε nicht allzu klein annehmen (nicht unter etwa 20 MeV).

Solange aber die Terme A_{mn} , B_{mn} überhaupt als „kleine Störungen“ gelten können, wird man sie — immer unter der Voraussetzung $\varepsilon \ll \bar{V}$ — im Bereich $r \ll r_\varepsilon$ durch die Näherungsformeln (I, 42) darstellen können. Vergleichen wir nun Zustände der gleichen

¹⁾ Vgl. (I, 44) und die anschliessende Diskussion. Dort handelte es sich um Zustände des kontinuierlichen Energiespektrums (Streuvorgänge); doch macht dies für die Abschätzung der Störungen keinen Unterschied.

Parität von $J + K$ (m, n gerade bzw. ungerade), so sind die Funktionen $A_{mn}(r), B_{mn}(r)$ in dem für die Energieberechnung massgebenden r -Bereich von K bzw. J unabhängig, während die adiabatischen Potentialfunktionen $W_m(r)$ dort nur durch die additiven Konstanten $\varepsilon K(K+1)/4$ bzw. $\varepsilon J(J+1)/4$ von K, J abhängen. Die Gleichungen (I, 18) oder (I, 19 und 20) ergeben daher unmittelbar folgendes Näherungsgesetz für die Energie-Eigenwerte:

$$\left. \begin{aligned} E &= \frac{\varepsilon}{4} K(K+1) + E'_\alpha && \text{für } J = 0, \\ E &= \frac{\varepsilon}{4} J(J+1) + E'_\alpha && \text{für } K = 0 \end{aligned} \right\} \quad (59)$$

(E'_α von K bzw. J unabhängig). Was wir oben auf Grund der grössten adiabatischen Näherung schon feststellten, gilt also auch bei störungsmässiger Berücksichtigung der A -, B -Terme: dass es nämlich „homologe Reihen“ von isobaren Zuständen gibt, die sich in ihren Energien nur durch die Terme $\varepsilon K(K+1)/4$ bzw. $\varepsilon J(J+1)/4$ unterscheiden [gleiche Quantenzahl α , d. h. fast gleiche Schrödingerfunktion $f_{n\alpha}(r)$, und gleiche Parität von $J+K$.] Die Energiedifferenzen solcher homologer Zustände sind also durch (59) unmittelbar bestimmt, ohne dass die Störungsrechnung ausgeführt werden muss. Insbesondere ergibt sich so für die Anregungsenergie der Isobaren (56) wieder der Wert $\frac{5}{2}\varepsilon$.

B. Variationsverfahren.

Nach I, § 3 haben wir jetzt im Gleichungssystem (3) V durch den Mittelwert \bar{V} (I, 26) zu ersetzen. Ist dieser gross gegen ε , so werden die betreffenden Eigenwerte \bar{W} ($J = 0$) nach (44):

$$\bar{W}_{(n)} = -\bar{V} + \sqrt{\varepsilon \bar{V}} (2n+1) + \varepsilon \left[\frac{K(K+1)}{4} - \frac{n(n+1)}{8} - \frac{17}{16} \right] + \dots \quad (60)$$

$(n+K$ ungerade).

Da dieser Ausdruck sich von (I, 45) wieder lediglich durch die additive Konstante $\varepsilon K(K+1)/4$ unterscheidet, können die Formeln (I, 46ff.) ohne weiteres übernommen werden, wenn nur die Energien E (I, 47) um $\varepsilon K(K+1)/4$ vergrössert werden. Damit kommen wir abermals zur Aussage (59) zurück. Jetzt ist allerdings der Energieterm E' in (59) durch andere Bestimmungsgleichungen definiert [E' hat die Bedeutung von „ E “ in (I, 47)]; doch lehrt die in I durchgeführte Abschätzung, die mutatis mutandis auch hier gilt [vgl. (I, 48 bis 51) und die anschliessende Fussnote], dass die

Aussagen der beiden Näherungen über die Eigenwerte E' wenigstens qualitativ übereinstimmen.

Nach (54) ist wiederum $\bar{j}^2 \sim \sqrt{\bar{V}/\varepsilon} \gg 1$. Dagegen ist das relative Schwankungsquadrat von j gerade für den Grundzustand und die tiefliegenden isobaren Zustände ($n = 0$) nicht sehr klein, da die betreffenden Eigenvektoren a_j im wesentlichen einer Gauss-Verteilung entsprechen:

$$a_j \underset{n=0}{\approx} \text{const} \cdot e^{-\frac{1}{2\beta}(j+\frac{1}{2})^2} \quad (\text{für } n=0).$$

Trotzdem besteht auch in diesem Falle kein Grund, die Ergebnisse der Variationsmethode („Hartree-Näherung“) anzuzweifeln; insbesondere ist nicht einzusehen, warum diese Methode bei kleinen ε -Werten weniger zuverlässig sein sollte als bei grösseren, wo sie durch die Adiabaten-Näherung bestätigt wird. Daher sollte gerade bei kleinen ε -Werten, wo die Adiabaten-Methode versagt, die Variationsmethode sehr wohl zur Ergänzung dienen können. So ist z. B. anzunehmen, dass die Energiedifferenzen homologer Zustände für $\varepsilon \ll \bar{V}$ allgemein der Näherungsformel (59) entsprechen.

Zürich, Physikal. Institut der Universität.
