

Die Abweichung der Kerne ${}^4_2\text{He}$ und ${}^{16}_8\text{O}$ vom Hartree-Modell.

Von **B. O. Grönblom** in Helsingfors, z. Z. in Leipzig.

Mit 4 Abbildungen. (Eingegangen am 29. April 1938.)

Es wird unter verschiedenen Annahmen über die Kernkräfte die Korrektur erster Näherung zur Hartree-Energie berechnet, der durch die Struktur des Kerns bedingt ist. Dadurch wird bei ${}^{16}_8\text{O}$ der theoretisch verständliche Anteil des Massendefektes von 26,5 auf 51,5% erhöht. Über die Arbeiten von Nakabayasi, Inglis und dem Verfasser hinausgehend, wird die Energie zweiter Ordnung nicht nur durch die ersten Glieder einer Reihenentwicklung für große Dichten beschrieben, sondern in geschlossener Form dargestellt, was eine Berichtigung der bisherigen Resultate erlaubt.

1. Einleitung.

Bekanntlich weicht das wirkliche Verhalten der Atomkerne von dem mit Hilfe der Hartree-Methode berechneten wesentlich ab, und dies um so mehr, je schwerer der betrachtete Kern ist. Dies hat offensichtlich seinen Grund darin, daß die Kerne in Wirklichkeit nicht die Struktur einer Protonen-Neutronen-Flüssigkeit haben, sondern daß die Teilchen eine Tendenz zeigen, sich zu Gruppen zusammenzuschließen, die sich untereinander zu einem symmetrischen Gebilde anordnen, das sich dem Tröpfchenmodell überlagert.

Da andererseits das Hartree-Modell gewisse qualitative Züge des Kernbaues annäherungsweise wiedergibt, wird man erwarten können, daß die erwähnte Strukturbildung mit Hilfe einer Störungsrechnung behandelt werden kann, wobei das reine Hartree-Verfahren als Ausgangspunkt benutzt wird. Die höheren Näherungen, die sich an dieses sukzessiv anschließen, werden dann anschaulich die Bildung immer höherer Konfigurationen bedeuten.

Die vorhandenen Rechnungen mit dem Hartree-Verfahren könnten in zwei Richtungen hin verbessert werden. Einmal stellt das mittlere Feld, unter dessen Einwirkung wir die Teilchen betrachten, sicherlich nur eine recht grobe Näherung dar. Eine Verbesserung des hierin liegenden Fehlers würde so erfolgen, daß man das durch die Dichteverteilung erster Näherung gebildete Potential als korrigiertes Ausgangspotential annimmt, und dieselbe Rechnung mit diesem Potential durchführt usw. Man würde so schrittweise Felder bekommen, die sich dem wirklichen mittleren Felde immer

mehr anschließen, wie es in den Hartreeschen Arbeiten über die Atomhüllen durchgeführt wird. Zweitens ist aber zu beachten, daß das wirkliche *momentane* (d. h. von der momentanen Lage *aller* Teilchen abhängige) Feld, das auf ein Teilchen wirkt, nicht immer durch seinen Mittelwert (gemittelt über die Bahnen der anderen Teilchen) ersetzt werden darf, auch wenn dieser Mittelwert noch so genau berechnet ist. Dieser Ersatz des wirklichen Feldes durch seinen Mittelwert verlangt nämlich, daß der mittlere Abstand der Teilchen klein ist gegenüber der Reichweite der zwischen den Teilchen wirkenden Kraft. Diese Bedingung ist, wie wir wissen, bei den Kernen nicht erfüllt.

Da die in der ersten Alternative erwähnte Verbesserung der Mehrkörpereigenschaft der Kerne keine Rechnung trägt, ist es nicht zu erwarten, daß eine Berechnung in diesem Sinne die bestehende Diskrepanz beheben würde, d. h. die Ausbildung der Konfigurationen näherungsweise beschreiben kann. Man wird also erwarten, daß die Schwankungen der Dichte um ihren Mittelwert für den Fehler der Hartree-Methode verantwortlich ist, und wird also versuchen, die Einwirkung dieser Abweichungen durch ein Störungsverfahren zu berechnen. Oder mit anderen Worten: Es soll die Störung des näherungsweise angenommenen Grundzustandes durch die angeregten Zustände berechnet werden.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Berechnung der Störungsenergie zweiter Ordnung bei zwei leichten Kernen, nämlich bei ${}^4_2\text{He}$ und ${}^{16}_8\text{O}$.

Obwohl dieses Thema bereits in vier Arbeiten behandelt worden ist¹⁾, dürfte eine nochmalige Behandlung des Problems nicht überflüssig sein, und dies aus dem folgenden Grunde. In den erwähnten Arbeiten wird die Störung nach Potenzen der reziproken Dichte entwickelt, d. h. es wird nur die Störung durch die niedrigsten Anregungsstufen berechnet. Dieses Verfahren scheint gerechtfertigt beim ${}^4_2\text{He}$, wo die Teilchen dicht beisammen liegen, und somit bereits die Eigenfunktionen, die den niedrigsten Anregungsstufen entsprechen, über das ganze Gebilde hinausreichen. Anders liegen die Verhältnisse beim ${}^{16}_8\text{O}$. Da hier die Dichte schon in erster Näherung viel geringer ist als beim ${}^4_2\text{He}$, kann man nicht erwarten, daß eine Reihenentwicklung, die nach Potenzen der reziproken Dichte fortschreitet, rasch konvergiert. Wie die hier vorgenommenen Rechnungen

¹⁾ D. R. Inglis, Phys. Rev. **51**, 231, 1937 (${}^4_2\text{He}$ und ${}^7_3\text{Li}$); W. J. Kroeger u. D. R. Inglis, Referat eines Vortrages in Washington, Phys. Rev. **51**, 1003, 1937 (${}^{16}_8\text{O}$); K. Nakabayasi, Sc. Rep. Tôhoku Imp. Univ. I, XXV, 5, 1141, 1937 (${}^4_2\text{He}$ und ${}^{16}_8\text{O}$); B. O. Grönblom, Naturwiss. **25**, 256, 1937; Acta Soc. Scient. Fenn. II, 9, 1937 (${}^4_2\text{He}$ und ${}^{16}_8\text{O}$).

zeigen, genügt es in der Tat zur vollständigen Beantwortung des Problems hier nicht, wenn man lediglich die Störung durch die niedrigsten angeregten Zustände betrachtet. In dieser Arbeit wird deshalb, im Gegensatz zu Inglis und Nakabayasi, ein geschlossener Ausdruck für die Störung aufgestellt. Die Arbeit enthält gleichzeitig die Richtigstellung einiger in meiner früheren Arbeit enthaltenen Rechenfehler.

2. Ansatz.

In der nullten Näherung werden alle Teilchen als am Schwerpunkt elastisch gebunden gedacht¹⁾. Das i -te Teilchen schwingt also unter der Einwirkung der Kraft

$$V_i^{(0)} = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \alpha^2}{M} r_i^2, \quad (1)$$

harmonisch um den Koordinatenanfangspunkt als Gleichgewichtslage. Die Eigenfunktionen nullter Näherung sind also gegeben durch den Ausdruck

$$\left. \begin{aligned} \psi_n(\mathbf{r}) &= \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z), \quad (n = n_x + n_y + n_z) \\ \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{H_n(\sqrt{\alpha} x)}{\sqrt{2^n \cdot n!}} e^{-\frac{\alpha}{2} x^2}, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

wobei $H_n(\sqrt{\alpha} x)$ das n -te Hermitesche Polynom bedeutet. Als Hamilton-Operator der Störung wird der Unterschied der wirklichen Kräfte zwischen den Teilchen gegenüber der fiktiven Kraft (1) angesetzt:

$$H' = - \sum_i^{\text{alle Teilchen}} V_i^{(0)} + \sum_{i < k}^{\text{alle Teilchen}} V_{ik} - S + e^2 \sum_{i < k}^{\text{alle Protonen}} \frac{1}{r_{ik}}.$$

V_{ik} bedeutet hier die zwischen zwei Teilchen wirkende Kraft, S die Energie, die durch die Bewegung des gemeinsamen Schwerpunktes zustande kommt. Das letzte Glied bedeutet die Coulomb-Abstoßung zwischen den Protonen. Da diese eine große Reichweite hat, wird man erwarten können, daß ihr gesamter Beitrag zur Energie schon in der Hartree-Näherung mit guter Annäherung berechnet werden kann. Wir können also im folgenden das den höheren Ordnungen der Coulomb-Energie entsprechende Glied streichen, und die Coulomb-Energie erster Näherung aus der Arbeit von Heisenberg übernehmen. Für die Kernkräfte V_{ik} machen wir den üblichen Ansatz

¹⁾ W. Heisenberg, ZS. f. Phys. **96**, 459, 1935.

$V_{ik} = -a e^{-b^2(r_i - r_k)^2} J(i, k)$ ($a > 0$), wobei $J(i, k)$ einen auf die Spin- und Ladungsvariablen der Teilchen i und k wirkenden, noch zu besprechenden Operator bedeutet. Der Hamilton-Operator der Schwerpunktsbewegung lautet¹⁾:

$$S = -\frac{\hbar^2}{2(N+Z)M} \sum_{i,k}^{\text{alle Teilchen}} (V_i V_k).$$

(N ist hier die Anzahl der Neutronen, Z die Anzahl der Protonen, M ist die Masse eines schweren Teilchens.)

Für die Schwerpunktsbewegung erster Ordnung der Kerne von ${}^4_2\text{He}$ bis ${}^{16}_8\text{O}$ ist von Bethe-Rose²⁾ eine allgemeine Formel aufgestellt worden, aus der wir diese Größe entnehmen können. Da andererseits die Schwerpunktsenergie zweiter Ordnung nur eine geringe Rolle spielt, werden wir sie der Übersichtlichkeit halber in einem Anhang berechnen.

Wenn wir bis zur zweiten Ordnung in H' entwickeln, erhalten wir für die Energie $E = E_0 + E_1 + E_2$ nach den Formeln der Störungstheorie:

$$\begin{aligned} E_0 + E_1 &= +2 \frac{\hbar^2 \alpha}{M} \sum_n^{\text{bes.}} (n + \frac{1}{2}) \\ &\quad + \frac{1}{2} (1 - 2\gamma)^{3/2} \sum_{p,n}^{\text{bes.}} (c_1 U_{pn}^{pn} - c'_1 U_{pn}^{np}) - S^{(1)} + E_c, \\ E_2 &= \frac{1}{2} \frac{M}{\hbar^2 \alpha} (1 - 2\gamma)^3 \sum_{p,n}^{\text{bes.}} \sum_{p',n'}^{\text{unbes.}} \frac{U_{pn}^{p'n'} (c_2 U_{pn}^{*p'n'} - c'_2 U_{np}^{*p'n'})}{p + n - p' - n'} \\ &\quad + 4 \frac{M}{\hbar^2 \alpha} \sum_n^{\text{bes.}} \sum_{n'}^{\text{unbes.}} \frac{|\dot{U}_n^{n'}|^2}{n - n'} \\ &\quad - 2 \frac{M}{\hbar^2 \alpha} (1 - 2\gamma)^{3/2} \sum_{p,n}^{\text{bes.}} \sum_{p',n'}^{\text{unbes.}} \frac{\dot{U}_n^{n'} (c_3 U_{pn}^{*p'n'} - c'_3 U_{np}^{*p'n'})}{n - n'} \\ &\quad + \frac{M}{\hbar^2 \alpha} (1 - 2\gamma)^3 g \sum_n^{\text{bes.}} \sum_{n'}^{\text{unbes.}} \frac{|R_n^{n'}|^2}{n - n'} \\ &\quad + \frac{M}{\hbar^2 \alpha} (1 - 2\gamma)^3 g' \sum_n^{\text{bes.}} \sum_{n'}^{\text{unbes.}} \frac{|K_n^{n'}|^2}{n - n'} \\ &\quad - 2 \frac{M}{\hbar^2 \alpha} (1 - 2\gamma)^3 g'' \sum_n^{\text{bes.}} \sum_{n'}^{\text{unbes.}} \frac{K_n^{n'} R_n^{*n'}}{n - n'} - S^{(2)}. \quad (3) \end{aligned}$$

α und n bedeuten Abfallskonstante und Zustand der Eigenfunktionen nullter Näherung. $S^{(1)}$ bzw. $S^{(2)}$ bedeuten die Schwerpunktsenergie erster

¹⁾ Handb. d. Phys., Art. H. A. Bethe (XXIV/1, S. 371). — ²⁾ H. A. Bethe u. M. E. Rose, Phys. Rev. 51, 283, 1937.

bzw. zweiter Ordnung, E_c die Coulomb-Energie. Mit besetzten bzw. unbesetzten Zuständen sind hier nur die Bahnzustände (2) gemeint, die Summation über die Spin- und Ladungszustände ist in den Faktoren $c_1 \dots g''$ berücksichtigt, deren Größe durch die Spin-Ladungsabhängigkeit $J(i, k)$ $\frac{b^2}{\alpha + 2b^2}$ der Kraft bestimmt ist. γ ist eine Konstante, gegeben durch $\gamma = \frac{b^2}{\alpha + 2b^2}$, welche die Dichte des Kerns charakterisiert; $\gamma \sim 0$ bedeutet große, $\gamma \sim \frac{1}{2}$ bedeutet kleine Dichte. Die Matrixelemente $U_{pn}^{p'n'}$, $\hat{U}_n^{n'}$, $R_n^{n'}$ und $K_n^{n'}$ sind folgendermaßen definiert:

$$U_{pn}^{p'n'} = \frac{1}{(1 - 2\gamma)^{3/2}} \iint \psi_p^*(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') \psi_{p'}(\mathbf{r}) \psi_{n'}(\mathbf{r}') e^{-b^2(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2} d\mathbf{r} d\mathbf{r}',$$

$$R_n^{n'} = \frac{1}{(1 - 2\gamma)^{3/2}} \iint \varrho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_{n'}(\mathbf{r}') e^{-b^2(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = \sum_p^{\text{bes.}} U_{np}^{n'p},$$

$$\hat{U}_n^{n'} = \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_{n'}(\mathbf{r}) V^{(0)} d\mathbf{r},$$

$$K_n^{n'} = \frac{1}{(1 - 2\gamma)^{3/2}} \iint \varrho(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') \psi_{n'}(\mathbf{r}') e^{-b^2(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = \sum_p^{\text{bes.}} U_{np}^{n'p'}.$$

$\varrho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ bedeutet hier die Diracsche gemischte Dichte (wobei über Spin und Ladung nicht summiert ist), $\varrho(\mathbf{r})$ die gewöhnliche Dichte des Grundzustandes. n und p sind Gesamtquantenzahlen, $p = p_x + p_y + p_z$, $\mathbf{r} = (x, y, z)$, $d\mathbf{r} = dx dy dz$.

Die Matrixelemente sind Produkte der „eindimensionalen“ Matrixelemente:

$$U_{pn}^{p'n'} = \frac{1}{\sqrt{1 - 2\gamma}} \iint \psi_n^*(x) \psi_p^*(x') \psi_{n'}(x) \psi_{p'}(x') e^{-b^2(x-x')^2} dx dx',$$

$$\hat{U}_n^{n'} = \int \psi_n^*(x) \psi_{n'}(x) V^{(0)} dx.$$

Der konstante Faktor $(1 - 2\gamma)$ ist nur darum bei der Definition der Matrixelemente herausgenommen, um die späteren Rechnungen übersichtlicher zu gestalten.

Die Bedeutung von E_0 und E_1 ist unmittelbar ersichtlich. Der Ausdruck E_2 enthält Glieder, die anschaulich als Matrixelemente für den Übergang eines oder zweier Teilchen in einen angeregten Zustand und nachheriger Rückkehr in den Grundzustand gedeutet werden können. Hierbei

ist zu berücksichtigen, daß die Teilchen entweder unvertauscht oder vertauscht in den Grundzustand zurückkehren können. Die Unterteilung der diese Übergänge beschreibenden Matrixelemente in den drei Typen $U_{n p}^{p' n'}$, $R_n^{n'}$ und $K_n^{n'}$ geschah lediglich, um die Summation zu vereinfachen. Die Summen über $R_n^{n'}$ und $K_n^{n'}$ bilden (nach Nakabayasi) eine bequeme Zusammenfassung derjenigen Übergänge, in denen nur ein Teilchen im Zwischenzustand angeregt ist. Anregung und Rückkehr können dabei entweder durch eine Wechselwirkung mit demselben Teilchen im Grundzustand, oder mit verschiedenen im Grundzustande bleibenden Teilchen geschehen. Die erwähnten Übergänge hätten auch alle mit Hilfe der Matrixelemente $U_{p n}^{p' n'}$ geschrieben werden können. Die letztere Schreibweise ist in der Arbeit in Acta Soc. Scient. Fenn. benutzt worden, doch sind dabei einige Übergangsmöglichkeiten übersehen worden¹⁾.

3. Kräfte.

Seitdem durch die Streumessungen von Tuve, Heydenburg und Hafstad²⁾ gezeigt wurde, daß die Kraft zwischen zwei Protonen näherungsweise gleich der zwischen einem Proton und einem Neutron im entsprechenden Zustand ist, werden allgemein Kräfte angesetzt, die von der Ladung explizit unabhängig, und nur von der Symmetrie im Orts-, Spin- und Ladungsraum abhängig sind. Diese Kräfte werden ausgedrückt, indem der Operator $J(i, k)$ als eine Linearkombination der vier möglichen Vertauschungsoperatoren (Heisenberg-, Wigner-, Majorana- und Bartlett-Operatoren) geschrieben wurde. Durch gewisse Zusatzforderungen der Absättigung bei schweren Kernen³⁾ gelang ferner die Einschränkung des Wertbereiches der in diesem Ansatz auftretenden, zunächst frei verfügbaren drei Konstanten, und somit die Aufstellung von genaueren Ansätzen. Wir benutzen hier einen Kraftansatz in der von Volz gegebenen Form. Dieser lautet in einer von Feenberg⁴⁾ angegebenen Schreibweise:

$$J(i, k) = \frac{1}{8} \{ \sigma_i \sigma_k \} - \frac{7}{8} (Q_i Q_k) (\sigma_i \sigma_k), \quad (4)$$

¹⁾ Nämlich diejenigen, bei denen unter Einwirkung der Majorana-Kraft ein Teilchen aus einer besetzten Schale einen Übergang macht, und ein Teilchen aus einer anderen Schale in die Lücke springt. Solche Übergänge sind auch unter der Annahme einer Kraftwirkung nur zwischen Teilchen verschiedener Ladung infolge der Eigenschaften des Majorana-Operators möglich. — ²⁾ M. A. Tuve, N. P. Heydenburg u. L. R. Hafstad, Phys. Rev. **50**, 806, 1936.
³⁾ H. Volz, ZS. f. Phys. **105**, 537, 1937; N. Kemmer, Nature **140**, 192, 1937.
— ⁴⁾ E. Feenberg, Phys. Rev. **52**, 667, 1937.

wobei σ_i und σ_k die Paulischen Spinvektoren, angewandt auf die Teilchen i und k bedeutet, ϱ_i und ϱ_k die entsprechenden Vektoren für die Ladung¹⁾. Die Spin-Ladungsindizes bezeichnen wir mit $\mu = 1 \dots 4$ für den Anfangszustand, μ' für den Endzustand des Teilchens i , ν, ν' für das Teilchen k .

Da ein Teil der älteren Rechnungen mit der Annahme einer Majorana-Kraft nur zwischen Teilchen verschiedener Ladung ausgeführt sind, wollen wir, des Vergleichs halber, die folgenden Rechnungen auch unter dieser Annahme durchführen. In diesem Falle ist:

$$J_{\mu\nu}^{u\nu}(i, k) = -\frac{1}{2} \{ \delta_{\mu}^{\nu'} \delta_{\nu}^{u'} - \tilde{\varrho}_{\mu}^{\nu'} \tilde{\varrho}_{\nu}^{u'} \}. \quad (5)$$

Die Koeffizienten $c_1 \dots g''$ können also durch eine Summation über Spin und Ladung in dem Spin-Ladungsanteil der Übergangselemente berechnet werden. Wir erhalten für vollbesetzte Schalen das folgende Schema:

	Majorana-Kraft	Symmetrische Kräfte nach (4)
$c_1 = -a \sum J_{\mu\nu}^{u\nu}$	0	0
$c'_1 = -a \sum J_{\mu\nu}^{\nu\mu}$	$8a$	$9a$
$c_2 = a^2 \sum J_{\mu\nu}^{u'\nu'} J_{\mu\nu}^{*\mu'\nu'}$	$8a^2$	$13a^2$
$c'_2 = a^2 \sum J_{\mu\nu}^{u'\nu'} J_{\nu\mu}^{*\mu'\nu'}$	0	$\frac{11}{2}a^2$
$c_3 = -a \sum J_{\mu\nu}^{u\nu}$	0	0
$c'_3 = -a \sum J_{\mu\nu}^{\nu\mu}$	$8a$	$9a$
$g = a^2 \sum J_{\mu\nu}^{\nu\mu'} J_{\mu\lambda}^{*\lambda u'}$	$16a^2$	$\frac{81}{4}a^2$
$g' = a^2 \sum J_{\mu\nu}^{u'\nu'} J_{\mu\lambda}^{*\mu'\lambda}$	0	0
$g'' = a^2 \sum J_{\mu\nu}^{u'\nu'} J_{\mu\lambda}^{*\lambda u'}$	0	0

4. Berechnung der Energie beim ${}^4_2\text{He}$.

Beim ${}^4_2\text{He}$ lautet die Energie erster Näherung:

$${}^ME_0 + {}^ME_1 = \frac{9}{4} \frac{\hbar^2 \alpha}{M} - 4a (1 - 2\gamma)^{3/2} + 2e^2 \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}$$

für Majorana-Kraft,

$${}^AE_0 + {}^AE_1 = \frac{9}{4} \frac{\hbar^2 \alpha}{M} - \frac{9}{2} a (1 - 2\gamma)^{3/2} + 2e^2 \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}$$

für den Kraftansatz (4).

¹⁾ W. Heisenberg, ZS. f. Phys. 77, 1, 1932.

Im Grundzustand ist nur die s -Schale besetzt, was durch die beiden Hauptquantenzahlen 0, 0 charakterisiert ist. Die gemischte Dichte lautet (ohne Summation über Spin und Ladung):

$$\varrho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} e^{-\frac{\alpha}{2}(\mathbf{r}^2 + \mathbf{r}'^2)}.$$

Bei der Berechnung der Störungsenergie zweiter Ordnung sind also insgesamt nur vier Summen zu bilden. Wir bekommen für diese:

$$\sum_{\mathbf{p}, \mathbf{n}}^{\text{unbes.}} \frac{|U_{00}^{\mathbf{p}\mathbf{n}}|^2}{-\mathbf{p} - \mathbf{n}} = -1 - \frac{1}{\sqrt{1-4\gamma^2}} + \log \frac{1 + \sqrt{1-4\gamma^2}}{2} + \frac{2}{\sqrt{1-\gamma^2}} - 2 \log \frac{1 + \sqrt{1-\gamma^2}}{2},$$

$$\sum_{\mathbf{n}}^{\text{unbes.}} \frac{|R_0^{\mathbf{n}}|^2}{-\mathbf{n}} = 1 - \frac{1}{\sqrt{1-\gamma^2}} + \log \frac{1 + \sqrt{1-\gamma^2}}{2},$$

$$\sum_{\mathbf{n}}^{\text{unbes.}} \frac{|\hat{U}_0^{\mathbf{n}}|^2}{-\mathbf{n}} = -\frac{3}{4} \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{M}\right)^2, \quad \sum_{\mathbf{n}}^{\text{unbes.}} \frac{\hat{U}_0^{*\mathbf{n}} U_{00}^{\mathbf{n}}}{-\mathbf{n}} = -\frac{3}{2} \frac{\hbar^2 \alpha}{M} \gamma.$$

γ ist hier und in der Fortsetzung eine Abkürzung für die Größe $\frac{b^2}{\alpha + 2b^2}$.

Diese Summen setzen sich, da die Eigenfunktionen als Produkte von Eigenfunktionen in den drei Richtungen erscheinen, zusammen als Produkte aus identisch gebauten Summen über eindimensionale Matrixelemente. Bei der Summation wurde so verfahren, daß man die Summe über *alle* Zustände p und n ausführt, und dann die Übergänge, in denen das eine oder beide Teilchen in einen besetzten Zustand springen, abzieht. Die Ausrechnung der eindimensionalen Summen geschieht in der folgenden Weise:

Für die Eigenfunktionen wird eine Integraldarstellung eingesetzt:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{\sqrt{n!}}{2\pi i} \frac{e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}}{2^{n/2}} \oint e^{-\xi^2 + 2\xi\sqrt{\alpha}x} \frac{d\xi}{\xi^{n+1}}.$$

Der Resonanznenner wird dargestellt durch ein bestimmtes Integral:

$$\frac{1}{\mathbf{p} + \mathbf{n} - \mathbf{p}' - \mathbf{n}'} = - \int_0^1 \frac{dk}{k^{\mathbf{p} + \mathbf{n} + 1}} k^{p'_x + p'_y + p'_z + n'_x + n'_y + n'_z}.$$

So wird also, wenn wir auch für die Fakultät die übliche Integraldarstellung benutzen, da der Grundzustand für beide Teilchen ein s -Zustand ist:

$$\begin{aligned}
 J &= \sum_{\text{alle } p, n} |U_{00}^{pn}|^2 k^p + n \\
 &= \frac{\alpha^2}{4\pi^6} \frac{1}{(1-2\gamma)} \int_0^\infty e^{-u} du \int_0^\infty e^{-v} dv \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha(x^2+x'^2)-b^2(x-x')^2} dx \\
 &\quad \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x}' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha(\bar{x}^2+\bar{x}'^2)-b^2(\bar{x}-\bar{x}')^2} d\bar{x} \oint e^{-\xi_1^2+2\xi_1\sqrt{\alpha}x} d\xi_1 \\
 &\quad \oint e^{-\eta_1^2+2\eta_1\sqrt{\alpha}x'} d\eta_1 \oint e^{-\xi_2^2+2\xi_2\sqrt{\alpha}\bar{x}} d\xi_2 \oint e^{-\eta_2^2+2\eta_2\sqrt{\alpha}\bar{x}'} d\eta_2 \\
 &\quad \left\{ \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(vk)^p}{(2\eta_1\eta_2)^{p+1}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(uk)^n}{(2\xi_1\xi_2)^{n+1}} \right\} d\eta_2.
 \end{aligned}$$

ξ_1, ξ_2, η_1 und η_2 sind die in den Integraldarstellungen der Oszillatoreigenfunktionen gebrauchten Hilfsvariablen, u und v rühren von den Integraldarstellungen der Fakultät her; x und x' sind die Raumkoordinaten der beiden Teilchen bei der Anregung, \bar{x} und \bar{x}' die entsprechenden Koordinaten bei der Rückkehr.

Die Summationen können nunmehr leicht geometrisch ausgeführt werden, ebenso die Integrationen über den Raum sowie die komplexen Integrationen über ξ_2 und η_2 . So erhalten wir, indem wir gleichzeitig die Substitutionen $\xi = \sqrt{\frac{uk}{2}} \xi_1$ und $\eta = \sqrt{\frac{vk}{2}} \eta_1$ einführen:

$$\begin{aligned}
 J &= -\frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty e^{-u} du \int_0^\infty e^{-v} dv \\
 &\quad \oint \frac{d\xi}{\xi} \oint e^{-\gamma\left\{\frac{uk}{2}\left(\xi^2+\frac{1}{\xi^2}\right)+\frac{vk}{2}\left(\eta^2+\frac{1}{\eta^2}\right)-\sqrt{uk}\left(\xi\eta+\frac{1}{\xi\eta}\right)\right\}} \frac{d\eta}{\eta}.
 \end{aligned}$$

Um die übrigen Integrationen noch ausführen zu können, benutzen wir die neue Variable: $\zeta = \frac{\xi}{\eta \sqrt{u}}$. Wir können dann leicht über u integrieren, und erhalten, nach einer einfachen Umformung:

$$J = -\frac{1}{4\pi^2} \oint \frac{d\eta}{\eta} \int_0^\infty e^{-v \left[1 + \frac{\gamma k}{2} \left(\eta^2 + \frac{1}{\eta^2} \right) \right]} dv$$

$$\oint \frac{e^{\frac{\gamma k}{2} \sqrt{v} \left(\eta^2 + \frac{1}{\eta^2} \right)} \zeta \left[1 + \frac{\gamma k}{2} \left(\eta^2 + \frac{1}{\eta^2} \right) \right] - \frac{\gamma k}{2} \sqrt{v} \left(\eta^2 + \frac{1}{\eta^2} \right)}{d\zeta}.$$

Die Integration über ζ gelingt dann ebenfalls leicht. Also:

$$J = -\frac{i}{2\pi} \int_0^\infty e^{-v} dv \oint e^{-v \gamma k \left(\eta^2 + \frac{1}{\eta^2} \right)} \frac{d\eta}{\eta}.$$

Das komplexe Integral führt man am besten aus, indem man die Exponentialfunktion nach Potenzen von η entwickelt. Die Koeffizienten sind dann Bessel-Funktionen von dem Argument $2\gamma i v k$. Da nur das in η konstante Glied einen Beitrag zum Integral liefert, erhält man also:

$$J = \int_0^\infty e^{-v} J_0(2\gamma i v k) dv = \frac{1}{\sqrt{1 - 4\gamma^2 k^2}}.^1).$$

Es gelingt, alle in dieser Arbeit vorkommenden Summen nach diesem Verfahren exakt auszurechnen.

Für die gesamte Schwerpunktsenergie zweiter Ordnung bekommen wir (siehe den Anhang): $S^{(2)} = -\frac{3}{16} \frac{\hbar^2 \alpha}{M}$.

Durch Einsetzen in die Formel (3) unter Benutzung des Koeffizientenschemas (6) erhalten wir somit für die Energie des ${}^4\text{He}$ -Kerns:

$${}^M E = \frac{27}{16} \frac{\hbar^2 \alpha}{M} - 4a(1 - 2\gamma)^{3/2} \left(1 - \frac{3}{2}\gamma \right) - \frac{M \alpha^2}{\hbar^2 \alpha} (1 - 2\gamma)^3 \left\{ 4 \cdot \frac{1 - \sqrt{1 - 4\gamma^2}}{\sqrt{1 - 4\gamma^2}} \right.$$

$$- 4 \log \frac{1 + \sqrt{1 - 4\gamma^2}}{2} + 8 \cdot \frac{1 - \sqrt{1 - \gamma^2}}{\sqrt{1 - \gamma^2}}$$

$$\left. - 8 \log \frac{1 + \sqrt{1 - \gamma^2}}{2} \right\} + 2e^2 \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}$$

¹⁾ Dieses Integral gehört zu dem Typus der Weberschen unstetigen Integrale; vgl. z. B. Webster-Szegö, Partielle Differentialgleichungen der math. Physik, S. 430.

für den Fall einer Majorana-Kraft;

$$\begin{aligned}
 {}^A E = & \frac{27}{16} \frac{\hbar^2 \alpha}{M} - \frac{9a}{2} (1-2\gamma)^{3/2} \left(1 - \frac{3}{2}\gamma\right) - \frac{3}{4} \frac{M a^2}{\hbar^2 \alpha} (1-2\gamma)^3 \left\{ 5 \cdot \frac{1 - \sqrt{1-4\gamma^2}}{\sqrt{1-4\gamma^2}} \right. \\
 & - 5 \log \frac{1 + \sqrt{1-4\gamma^2}}{2} + 17 \frac{1 - \sqrt{1-\gamma^2}}{\sqrt{1-\gamma^2}} \\
 & \left. - 17 \log \frac{1 + \sqrt{1-\gamma^2}}{2} \right\} + 2e^2 \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}
 \end{aligned}$$

für den Kraftansatz (4).

Graphische Darstellung sowie Diskussion des Ergebnisses erfolgen in dem übernächsten Abschnitt.

5. Berechnung der Energie beim ${}^{16}_8\text{O}$.

Da beim ${}^{16}_8\text{O}$ im Grundzustand sowohl die s -Schale als auch die drei p -Schalen besetzt sind, wird die Abzählung der Übergangsmöglichkeiten hier etwas komplizierter als beim ${}^4_2\text{He}$. Denn es sind ja hier sämtliche Übergänge zwischen den s - und p -Zuständen bei der Summenbildung von der Summe über alle Zustände abziehen. Wenn wir also definieren (eindimensional):

$$\sum_{\text{alle } p' n'} |U_{pn}^{p' n'}|^2 k^{p+n} = T_{pn}^{**},$$

$$\sum_{\text{alle } p' n'} U_{pn}^{p' n'} U_{np}^{*p' n'} k^{p+n} = F_{pn}^{**},$$

so haben wir die folgenden Summen über die unbesetzten Zustände von p und n zu bilden:

$$\begin{aligned}
 \sum_{p, n}^{\text{unbes.}} \frac{|U_{pn}^{pn}|^2}{1-p-n} &= - \int_0^1 \frac{dk}{k} \{ (T_{00}^{**})^3 - 2 (T_{00}^{*0})^3 - 6 (T_{00}^{*1}) (T_{00}^{*0})^2 \\
 &\quad + (T_{00}^{00})^3 + 3 T_{00}^{11} (T_{00}^{00})^2 \}, \\
 2 \sum_{p, n}^{\text{unbes.}} \frac{|U_{10}^{pn}|^2}{1-p-n} &= - 6 \int_0^1 \frac{dk}{k^2} \{ T_{10}^{**} (T_{00}^{**})^2 - T_{10}^{1*} (T_{00}^{*0})^2 - T_{10}^{*0} (T_{00}^{*0})^2 \\
 &\quad - T_{10}^{*1} (T_{00}^{00})^2 - T_{01}^{*0} (T_{00}^{*0})^2 - 2 T_{10}^{*0} T_{00}^{*1} T_{00}^{*0} \\
 &\quad + T_{10}^{10} (T_{00}^{00})^2 + T_{10}^{01} (T_{00}^{00})^2 - 2 T_{10}^{10} T_{00}^{1*} T_{00}^{*1} \},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{p,n}^{\text{unbes.}} \frac{|U_{11}^{pn}|^2}{2-p-n} &= -3 \int_0^1 \frac{dk}{k^3} \{ T_{11}^{**} (T_{00}^{**})^2 + 2 (T_{10}^{**})^2 T_{00}^{**} - 2 T_{11}^{*1} (T_{00}^{*0})^2 \\
&\quad - 4 T_{10}^{*0} T_{01}^{*1} T_{00}^{*0} - 4 T_{11}^{*0} T_{00}^{*1} T_{00}^{*0} - 4 T_{10}^{*0} T_{00}^{*1} T_{01}^{*0} \\
&\quad - 2 T_{10}^{*0} (T_{00}^{*0})^2 - 4 T_{10}^{*0} T_{01}^{*0} T_{00}^{*0} + T_{11}^{00} (T_{00}^{00})^2 \\
&\quad + T_{11}^{11} (T_{00}^{00})^2 + 2 (T_{01}^{01})^2 T_{00}^{00} - 4 T_{01}^{1*} T_{01}^{*0} T_{00}^{00} \\
&\quad + 2 T_{11}^{00} T_{00}^{11} T_{00}^{00} + 2 (T_{01}^{10})^2 T_{00}^{00} \}, \\
2 \sum_{p,n}^{\text{unbes.}} \frac{U_{10}^{*pn} U_{01}^{pn}}{1-p-n} &= -6 \int_0^1 \frac{dk}{k^2} \{ F_{01}^{**} (T_{00}^{**})^2 - 2 F_{10}^{1*} (T_{00}^{*0})^2 - 4 F_{10}^{0*} T_{00}^{1*} T_{00}^{*0} \\
&\quad - 2 F_{10}^{*0} (T_{00}^{*0})^2 + 2 F_{10}^{10} (T_{00}^{00})^2 \}, \\
\sum_{p,n}^{\text{unbes.}} \frac{U_{11}^{*pn} U_{11}^{pn}}{2-p-n} &= -3 \int_0^1 \frac{dk}{k^3} \{ 2 (F_{01}^{**})^2 T_{00}^{**} - 4 F_{10}^{1*} F_{10}^{0*} T_{00}^{*0} \\
&\quad - 4 F_{10}^{0*} F_{01}^{1*} T_{00}^{*0} - 4 (F_{01}^{0*})^2 T_{00}^{1*} - 4 (F_{10}^{0*})^2 T_{00}^{0*} \\
&\quad + 4 (F_{10}^{10})^2 T_{00}^{00} + T_{11}^{**} (T_{00}^{00})^2 - 2 T_{11}^{*1} (T_{00}^{*0})^2 \\
&\quad + T_{11}^{11} (T_{00}^{00})^2 - 4 T_{11}^{*0} T_{00}^{*1} T_{00}^{*0} + 2 T_{11}^{00} T_{00}^{11} T_{00}^{00} \\
&\quad - 2 T_{10}^{*0} (T_{00}^{*0})^2 + T_{11}^{00} (T_{00}^{00})^2 \}, \\
\sum_n^{\text{bes.}} \sum_{n'}^{\text{unbes.}} \frac{|R_n^{n'}|^2}{n-n'} &= - \int_0^1 \frac{dk}{k} \left\{ \sum_{\text{allen } n} |R_0^n|^2 k^{n+3} \sum_{\text{allen } n} |R_1^n|^2 k^{n-1} - |R_0^0|^2 - 3 |R_1^1|^2 k^{-1} \right\}.
\end{aligned}$$

(letzteres dreidimensional).

Hierbei ist berücksichtigt, daß ein Matricelement $U_{pn}^{p'n'}$ dann und nur dann von Null verschieden ist, wenn $n + p + n' + p'$ eine gerade Zahl ist.

Ebenso ist ein Matricelement $R_n^{n'}$ nur dann $\neq 0$, wenn $n + n'$ eine gerade Zahl ist. Die zur Berechnung der Integranden notwendigen Summationen gelingen alle exakt mit der in dem vorigen Abschnitt auseinandergesetzten Methode. Die Rechnungen sind allerdings in einigen Fällen recht mühsam. Wir bekommen:

$$\begin{aligned}
T_{00}^{**} &= \frac{1}{\sqrt{1-4\gamma^2 k^2}}. \\
T_{10}^{**} &= k \frac{(1-2\gamma+2\gamma^2) - 2\gamma^2 k^2}{(1-4\gamma^2 k^2)^{3/2}}, \\
T_{11}^{**} &= \frac{\gamma^2 + (1-4\gamma+14\gamma^2-24\gamma^3+8\gamma^4) k^2 - \gamma^2 (3+8\gamma-16\gamma^2) k^2 + 8\gamma^4 k^4}{(1-4\gamma^2 k^2)^{5/2}},
\end{aligned}$$

¹⁾ Bei der Berechnung dieses Integrals in der Arbeit in Acta Soc. Scient. Fenn. 9, 1937 ist ein Rechenfehler begangen worden.

$$T_{00}^{*0} = \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma^2 k^2}},$$

$$\sum_{\text{alle } n} |R_0^n|^2 k^n = \frac{(1 + 3\gamma)^2 - 2\gamma^2(1 + 18\gamma - 3\gamma^2)k^2 + 16\gamma^4 k^4}{(1 - \gamma^2 k^2)^{7/2}},$$

$$T_{10}^{0*} = \frac{k\gamma^3}{(1 - \gamma^2 k^2)^{3/2}},$$

$$\begin{aligned} \sum_{\text{alle } n} |R_1^n|^2 k^{n-1} \\ = k \frac{(1 - \gamma + 5\gamma^3)^2 - 2\gamma^2(1 + 3\gamma - 4\gamma^2 + 30\gamma^3 - 5\gamma^4)k^2 + \gamma^4(1 + 4\gamma)^2}{(1 - \gamma^2 k^2)^{9/2}}, \end{aligned}$$

$$T_{00}^{*1} = \frac{\gamma^2 k^2}{(1 - \gamma^2 k^2)^{3/2}},$$

$$T_{10}^{*0} = \frac{k(1 - \gamma)^2}{(1 - \gamma^2 k^2)^{3/2}},$$

$$T_{10}^{1*} = k \cdot \frac{(1 - \gamma)^2 + 2\gamma^2(1 - \gamma - \gamma^2)k^2 + \gamma^4 k^4}{(1 - \gamma^2 k^2)^{5/2}},$$

$$T_{11}^{1*} = k^2 \frac{(1 - 2\gamma + 3\gamma^2)^2 - 2\gamma^2(1 - \gamma - 2\gamma^2 + 9\gamma^3 - 3\gamma^4)k^2 + \gamma^4(1 + \gamma)^2 k^4}{(1 - \gamma^2 k^2)^{7/2}},$$

$$T_{11}^{*0} = \frac{\gamma^3 + 2\gamma^2(1 - 3\gamma + \gamma^2)k^2 + \gamma^4 k^4}{(1 - \gamma^2 k^2)^{5/2}},$$

$$F_{01}^{*0} = \frac{k\gamma(1 - \gamma)}{(1 - \gamma^2 k^2)^{3/2}}, \quad F_{10}^{**} = 2k \frac{\gamma(1 - \gamma) - \gamma^2 k^2}{(1 - 4\gamma^2 k^2)^{3/2}},$$

$$F_{10}^{1*} = k \cdot \frac{\gamma(1 - \gamma) - \gamma^2(1 - 2\gamma + 2\gamma^2)k^2 + \gamma^4 k^4}{(1 - \gamma^2 k^2)^{3/2}},$$

$$T_{00}^{00} = 1,$$

$$T_{10}^{10} = (1 - \gamma)^2 k,$$

$$T_{10}^{01} = \gamma^2 k,$$

$$T_{11}^{11} = (1 - 2\gamma + 3\gamma^2)^2 k^2, \quad T_{11}^{00} = \gamma^2, \quad F_{10}^{10} = \gamma(1 - \gamma)k.$$

Die noch übrigbleibenden Integrationen über k gelingen leicht auf elementarem Wege. Es sei deshalb nur das Endergebnis angegeben:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\substack{\text{bes.} \\ \mathbf{p}, \mathbf{n}}} \sum_{\substack{\text{unbes.} \\ \mathbf{p}', \mathbf{n}'}} \frac{|U_{\mathbf{p} \mathbf{n}}^{\mathbf{p}' \mathbf{n}'}|^2}{\mathbf{p} + \mathbf{n} - \mathbf{p}' - \mathbf{n}'} \\
 &= -\frac{3}{4}(1-2\gamma)^4 \left(\frac{1}{(1-4\gamma^2)^{5/2}} - 1 \right) \\
 &\quad - (1-2\gamma)^2 (3-4\gamma+6\gamma^2) \left(\frac{1}{(1-4\gamma^2)^{3/2}} - 1 \right) \\
 &\quad - 2(8-24\gamma+51\gamma^2-60\gamma^3+42\gamma^4) \left(\frac{1}{\sqrt{1-4\gamma^2}} - 1 \right) \\
 &\quad + 2(8-24\gamma+51\gamma^2-60\gamma^3+45\gamma^4) \log \frac{1+\sqrt{1-4\gamma^2}}{2} \\
 &\quad + 30\gamma^2(1-\gamma)^2 \left(\frac{1}{(1-\gamma^2)^{7/2}} - 1 \right) \\
 &\quad + 6(1-4\gamma+6\gamma^2-6\gamma^3+4\gamma^4) \left(\frac{1}{(1-\gamma^2)^{5/2}} - 1 \right) \\
 &\quad + 2(4-16\gamma+30\gamma^2-30\gamma^3+21\gamma^4) \left(\frac{1}{(1-\gamma^2)^{3/2}} - 1 \right) \\
 &\quad + 4(8-24\gamma+45\gamma^2-45\gamma^3+33\gamma^4) \left(\frac{1}{\sqrt{1-\gamma^2}} - 1 \right) \\
 &\quad - (32-96\gamma+180\gamma^2-180\gamma^3+135\gamma^4) \log \frac{1+\sqrt{1-\gamma^2}}{2} \\
 &\quad + \frac{3}{2}\gamma^2(\sqrt{1-4\gamma^2}-2\sqrt{1-\gamma^2}+\gamma^2).
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\substack{\text{bes.} \\ \mathbf{p}, \mathbf{n}}} \sum_{\substack{\text{unbes.} \\ \mathbf{p}', \mathbf{n}'}} \frac{U_{\mathbf{p} \mathbf{n}}^{\mathbf{p}' \mathbf{n}'} U_{\mathbf{n} \mathbf{p}}^{*\mathbf{p}' \mathbf{n}'}}{\mathbf{p} + \mathbf{n} - \mathbf{p}' - \mathbf{n}'} \\
 &= -\frac{3}{4}(1-2\gamma)^4 \left(\frac{1}{(1-4\gamma^2)^{5/2}} - 1 \right) \\
 &\quad + (1-2\gamma)^2(1+4\gamma-6\gamma^2) \left(\frac{1}{(1-4\gamma^2)^{3/2}} - 1 \right) \\
 &\quad - 2(2+27\gamma^2-60\gamma^3+42\gamma^4) \left(\frac{1}{\sqrt{1-4\gamma^2}} - 1 \right) \\
 &\quad + 2(2+27\gamma^2-60\gamma^3+45\gamma^4) \log \frac{1+\sqrt{1-4\gamma^2}}{2} \\
 &\quad + 30\gamma^2(1-\gamma)^2 \left(\frac{1}{(1-\gamma^2)^{7/2}} - 1 \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + 12\gamma^2(1-\gamma)(1-2\gamma)\left(\frac{1}{(1-\gamma^2)^{5/2}}-1\right) \\
 & + 2\gamma^2(14-30\gamma+21\gamma^2)\left(\frac{1}{(1-\gamma^2)^{3/2}}-1\right) \\
 & + 4(2+21\gamma^2-45\gamma^3+33\gamma^4)\left(\frac{1}{\sqrt{1-\gamma^2}}-1\right) \\
 & - (8+84\gamma^2-180\gamma^3+135\gamma^4)\log\frac{1+\sqrt{1-\gamma^2}}{2} \\
 & + \frac{3}{2}\gamma^2(\sqrt{1-4\gamma^2}-2\sqrt{1-\gamma^2}+\gamma^2).
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathfrak{n}}^{\text{bes.}} \sum_{\mathfrak{n}'}^{\text{unbes.}} \frac{|R_{\mathfrak{n}}^{\mathfrak{n}'}|^2}{\mathfrak{n}-\mathfrak{n}'} \\
 = -15\gamma^2(1-\gamma)^2\left(\frac{1}{(1-\gamma^2)^{7/2}}-1\right) \\
 - 3(1-\gamma)(1-3\gamma-3\gamma^2-5\gamma^3)\left(\frac{1}{(1-\gamma^2)^{5/2}}-1\right) \\
 + (4-14\gamma^2+10\gamma^3-24\gamma^4)\left(\frac{1}{(1-\gamma^2)^{3/2}}-1\right) \\
 - (4+42\gamma^2-30\gamma^3+75\gamma^4)\left(\frac{1}{\sqrt{1-\gamma^2}}-1-\log\frac{1+\sqrt{1-\gamma^2}}{2}\right).
 \end{aligned}$$

Wir führen für diese Summen in der Fortsetzung die Bezeichnungen

$$-\frac{f_1(\gamma)}{(1-2\gamma)^3} - \frac{f_2(\gamma)}{(1-2\gamma)^3} \text{ und } -\frac{f_3(\gamma)}{(1-2\gamma)^3}$$

ein.

Für die Wirkung des fiktiven Potentials bekommen wir in der zweiten Näherung:

$$\begin{aligned}
 \frac{4M}{\hbar^2\alpha} \sum_{\mathfrak{n}}^{\text{bes.}} \sum_{\mathfrak{n}'}^{\text{unbes.}} \frac{|\bar{U}_{\mathfrak{n}}^{\mathfrak{n}'}|^2}{\mathfrak{p}-\mathfrak{n}'} - 2\frac{M}{\hbar^2\alpha}(1-2\gamma)^{3/2} \sum_{\mathfrak{p},\mathfrak{n}}^{\text{bes.}} \sum_{\mathfrak{n}'}^{\text{unbes.}} c'_3 \frac{\bar{U}_{\mathfrak{n}}^{\mathfrak{n}'} U_{\mathfrak{n}\mathfrak{p}}^{*\mathfrak{p}\mathfrak{n}'}}{\mathfrak{n}-\mathfrak{n}'} \\
 = -\frac{9}{2}\frac{\hbar^2\alpha}{M} + c'_3(1-2\gamma)^{3/2}\left(3\gamma-20\gamma^2+\frac{105}{4}\gamma^3\right).
 \end{aligned}$$

Die Energie erster Ordnung ist (in Übereinstimmung mit Heisenberg und Bethe-Rose):

$$E_1 = \frac{69}{4}\frac{\hbar^2\alpha}{M} - c'_1(1-2\gamma)^{3/2}\left(2+\frac{15}{2}\gamma^2\right) + 41,5e^3\sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}.$$

Als die Gesamtenergie des $^{16}_8\text{O}$ -Kerns bekommen wir also in der von uns betrachteten Näherung:

$${}^M E = \frac{51}{4} \frac{\hbar^2 \alpha}{M} - 2a (1 - 2\gamma)^{3/2} (8 - 12\gamma + 60\gamma^2 - 105\gamma^3) \\ - \frac{M a^2}{\hbar^2 \alpha} \{4f_1(\gamma) + 16f_3(\gamma)\} + 41,5 e^2 \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}},$$

für Majorana-Kraft;

$${}^A E = \frac{51}{4} \frac{\hbar^2 \alpha}{M} - \frac{9}{4} a (1 - 2\gamma)^{3/2} (8 - 12\gamma + 60\gamma^2 - 105\gamma^3) \\ - \frac{M a^2}{\hbar^2 \alpha} \left\{ \frac{13}{2} f_1(\gamma) - \frac{11}{4} f_2(\gamma) + \frac{81}{4} f_3(\gamma) \right\} \\ + 41,5 e^2 \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}, \text{ für den Kraftansatz (4).}$$

6. Diskussion der Ergebnisse.

Um die Güte des Verfahrens zu beurteilen, wird die übliche Methode verwendet: Die bei verschiedenen Reichweiten zur Erklärung der experimentellen Bindungsenergie notwendige Kraft a wird graphisch aufgetragen und mit der entsprechenden Darstellung für das exakt lösbare Problem des Deuterons verglichen. Die Größe α wird eliminiert durch die Forderung, daß die Gesamtenergie ein Minimum sein soll. Das Ergebnis dieses Vergleichs zeigen die Fig. 1 und 2. Da die Berechnung der Störungsenergie zweiter Ordnung nicht einem Variationsprinzip äquivalent ist, wurde dabei nur die Energie erster Näherung (deren Berechnung einem Variationsprinzip entspricht) variiert. Eine andere Methode, die Güte der Ergebnisse zu prüfen, besteht darin, daß man für ein plausibles Wertepaar a, b , Stärke und Reichweite der Kraft, die Bindungsenergie berechnet, und mit der experimentellen Bindungsenergie vergleicht. Das Ergebnis eines solchen Vergleichs zeigen die Fig. 3 und 4. Für die Reichweite b der Kraft wurde dabei der Wert $1,25 (\text{El. Rad.})^{-2}$ eingesetzt, der mit den verschiedenen diesbezüglichen Erfahrungen am besten im Einklang zu stehen scheint. Für a wurde der Wert $38,0 \text{ TME.}$ genommen, der aus dem erwähnten Wert von b und dem Massendefekt des Deuterons folgt.

Über den Verlauf der potentiellen Energie zweiter Ordnung, die durch etwas unübersichtliche Ausdrücke dargestellt ist, orientiert man sich am

besten, indem man diese Ausdrücke für die Grenzfälle sehr kleiner und sehr großer Dichte betrachtet, d. h. für γ nahe an den Wert $\frac{1}{2}$ bzw. nahe an den Wert 0. In dem ersten Fall bekommt man (sowohl für ${}^4_2\text{He}$ als auch

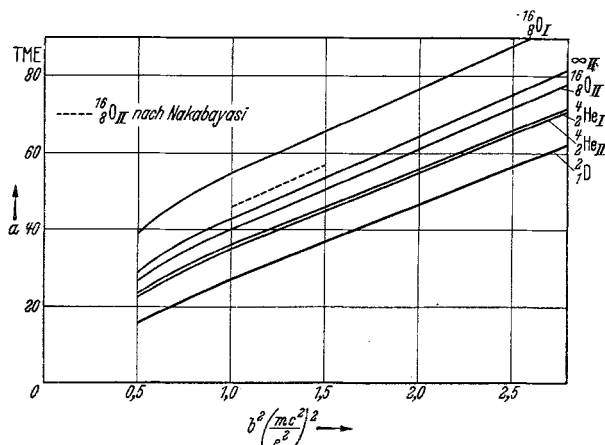


Fig. 1. Stärke a und Abfallskonstante b^2 der Kraft, welche den richtigen Massendefekt (${}^{16}_8\text{O}$: 136,8; ${}^4_2\text{He}$: 30,3) in der ersten und zweiten Näherung darstellt. Kraftansatz (5).

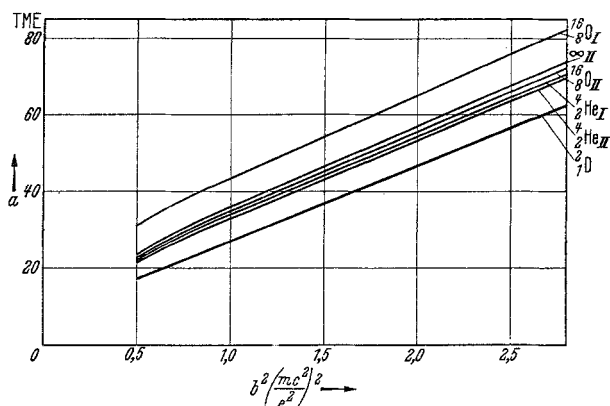


Fig. 2. Stärke a und Abfallskonstante b^2 der Kraft, welche den richtigen Massendefekt in der ersten und zweiten Näherung darstellt für den Kraftansatz (4).

für ${}^{16}_8\text{O}$) eine Reihenentwicklung in $(1 - 2\gamma)$, die mit $(1 - 2\gamma)^{5/2}$ anfängt. In dem zweiten Falle dagegen hat man eine Reihenentwicklung nach γ , die mit γ^2 anfängt. Für diese beiden Grenzfälle ist also die potentielle Energie zweiter Ordnung gleich 0.

Ein besonderes Interesse hat dabei die für *große* Dichten gültige Reihenentwicklung. Hierin müßten die ersten Glieder mit den von Inglis und

Nakabayasi berechneten übereinstimmen. Dies ist in der Tat der Fall betreffend ${}^4_2\text{He}$.

Bei ${}^{16}_8\text{O}$ stimmen nur die beiden ersten Glieder mit den von Nakabayasi berechneten überein, was auf einige Rechenfehler bei Nakabayasi zurückzuführen sein dürfte. Wir glauben uns zu diesem Schluß berechtigt, da unser Ergebnis nach zwei Richtungen hin kontrolliert werden konnte; einmal für $\gamma \sim 0$ und einmal für $\gamma \sim \frac{1}{2}$. Da die Ergebnisse, die für diese Grenzfälle in einfacher Weise (mit Hilfe anderer Methoden als der im Text angegebenen) ermittelt werden konnten, im Einklang mit unseren allgemeineren Resultaten stehen, und diese andererseits in geschlossener

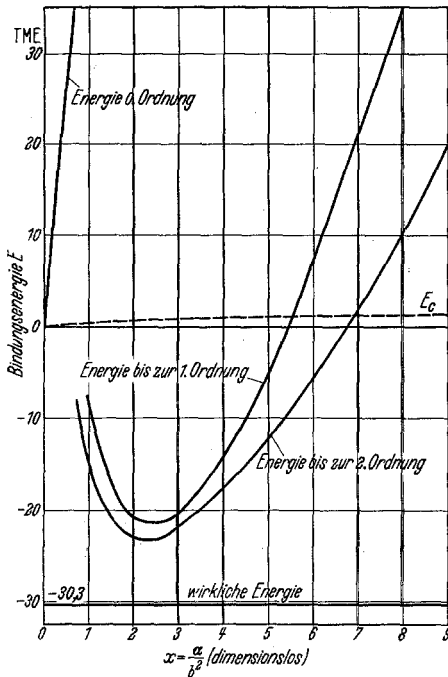


Fig. 3. Bindungsenergie des ${}^4_2\text{He}$ als Funktion der Dichte x^3 für eine Kraft (4): $a = 38 \text{ TME.}$, $b^2 = 1,56 (\text{El. Rad.})^{-2}$.
Bindungsenergie erster Näherung $\sim 70\%$ Exp.
„ zweiter Näherung $\sim 76\%$ Exp.

Form angegeben werden konnten, scheint ein Rechenfehler unwahrscheinlich. Um Irrtümer auszuschließen, wurde noch die Summe $\sum_{p,n}^{\text{unbes.}} \frac{|U_{00}^{pn}|^2}{-p-n}$ gliedweise berechnet (für große Dichte, also nach dem Vorgang von Nakabayasi). Wir erhielten:

$$\sum_{p,n}^{\text{unbes.}} \frac{|U_{00}^{pn}|^2}{-p-n} = - \left\{ \frac{45}{16} \gamma^4 + \dots \right\},$$

was in Übereinstimmung mit unserem exakten Ergebnis steht. Nakabayasi hat dagegen:

$$\sum_{p,n}^{\text{unbes.}} \frac{|U_{00}^{pn}|^2}{-p-n} = - \left\{ \frac{105}{16} \gamma^4 + \dots \right\}$$

erhalten. Zu dem letztgenannten Ergebnis gelangt man, indem man die nach dem Pauli-Prinzip verbotenen Übergänge, in denen *das eine Teilchen in eine p -Schale*, das andere dagegen in eine höhere Schale springt, in die Summe mit einbezieht.

Das Ergebnis von Nakabayasi enthält auch andere Abweichungen von unserem, jedoch wurde diesen in den anderen Fällen nicht im einzelnen nachgegangen.

Man sieht, daß diese Reihe bei den Werten von γ , die der Gleichgewichtslage entsprechen, im Falle ${}^{16}_8\text{O}$ sehr schlecht konvergiert. Die beiden ersten Terme für sich würden sogar einen negativen Beitrag liefern. Hierdurch erklärt sich das Ergebnis von Inglis¹⁾, der glaubte gezeigt zu haben, daß die Störungsrechnung beim ${}^{16}_8\text{O}$ nicht konvergiert, indem für die Störung zweiter Ordnung nur ein sehr kleiner Beitrag gefunden wurde, der noch kleiner war, als ein entsprechender Teil der Störung dritter Ordnung. Dieser Fehlschluß beruht darauf, daß bei den zugrunde gelegten Rechnungen nur die ersten Anregungsstufen mit berücksichtigt wurden, was etwa den ersten Gliedern in unserer Reihenentwicklung für große Dichten entspricht. Indessen zeigt unsere Rechnung, daß der Hauptbeitrag zur Störung von den höheren Anregungsstufen herrührt.

Den Verlauf der Funktionen $f_1(\gamma)$, $f_2(\gamma)$, $f_3(\gamma)$ zeigt die folgende Tabelle.

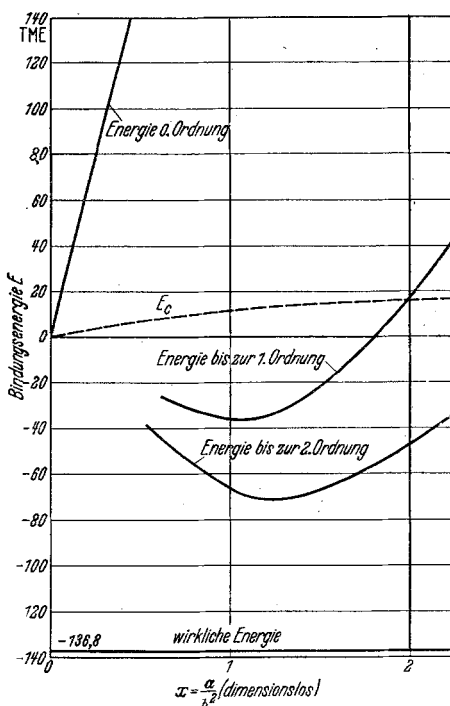


Fig. 4. Bindungsenergie des ${}^{16}_8\text{O}$ als Funktion der Dichte x^3 für eine Kraft (4): $a = 38 \text{ TME.}$, $b^2 = 1,56 (\text{El. Rad.})^{-2}$.

Bindungsenergie erster Näherung $\sim 26,5\%$ Exp.
 „ zweiter Näherung $\sim 61,5\%$ Exp.

¹⁾ D. R. Inglis u. W. J. Kroeger, Bericht eines Vortrages in Washington, Phys. Rev. **51**, 1003, 1937.

	$\gamma \sim 0$	$\gamma = 1/4$	$\gamma = 3/10$	$\gamma = 1/3$	$\gamma \sim 1/2$
$f_1(\gamma)$	$(1-2\gamma)^3(24\gamma^2 - 120\gamma^3 + 476\frac{1}{4}\gamma^4 \dots)$	0,0940	0,0710	0,0595	$\frac{31}{4}(1-2\gamma)^{5/2}$
$f_2(\gamma)$	$(1-2\gamma)^3(9\gamma^2 - 60\gamma^3 + 258\frac{3}{4}\gamma^4 \dots)$	0,0358	0,0340	0,0325	$\frac{31}{4}(1-2\gamma)^{5/2}$
$f_3(\gamma)$	$(1-2\gamma)^3(\frac{9}{2}\gamma^2 - 30\gamma^3 + 112\frac{1}{2}\gamma^4 \dots)$	0,0148	0,0132	0,0075	konst. $(1-2\gamma)^3$

Beim $^{16}_8\text{O}$ erhalten wir für a und b^2 die folgenden Werte (Fig. 1, 2):

	Majorana-Kraft				Kraftansatz (4)			
γ	0	$1/4$	$3/10$	$1/3$	0	$1/4$	$3/10$	$1/3$
a	0	31,4	50,0	85,5	0	35,0	44,3	77,0
b^2	0	0,73	1,47	3,12	0	1,00	1,48	3,18

Für die bei den Fig. 3 und 4 zugrunde gelegten Werte $a = 38,0$, $b^2 = 1,56$ erhalten wir das Maximum der Bindungsenergie beim $^{16}_8\text{O}$ für $\gamma = 0,31$, beim ^4_2He für $\gamma = 0,23$.

Die Kurven in den Fig. 1 bis 4 zeigen, daß für ^4_2He die zweite Näherung gegenüber der ersten nur eine sehr geringfügige Verbesserung bedeutet. Es scheint mithin, als könnte die noch bestehende Diskrepanz nicht mehr durch genauere Rechnungen behoben werden¹⁾, sondern als wäre hierzu die Einführung eines neuen Kraftansatzes notwendig.

Anhang. Über die Schwerpunktsenergie.

Die Schwerpunktsenergie erster Ordnung lautet:

$$S^{(1)} = 2 \sum_{p,n}^{\text{bes.}} (2S_{pn}^p + 4S_{pn}^{pn} - S_{pn}^{np})$$

$$\text{mit } S_p^{p'} = - \int \psi_{p'}(r) \frac{\hbar^2}{2(N+Z)} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi_p(r) dr,$$

$$S_{pn}^{p'n'} = - \iint \psi_p(r) \psi_n(r') \frac{\hbar^2}{2(N+Z)} \left(\frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r'} \right) \psi_{p'}(r) \psi_{n'}(r') dr dr'$$

(M = Masse des schweren Teilchens, N = Anzahl der Neutronen, Z = Anzahl der Protonen).

Nach dieser Formel bekommen wir sowohl für ^4_2He als auch für $^{16}_8\text{O}$

$$S^{(1)} = + \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 \alpha^2}{M}.$$

¹⁾ Dies wird auch bestätigt von einer Abschätzung der Störungsenergie dritter Ordnung von D. R. Inglis, Phys. Rev. **51**, 231, 1937. — ²⁾ Vgl. H. A. Bethe u. M. E. Rose, Phys. Rev. **51**, 283, 1937.

Betreffs der Schwerpunktsenergie höherer Ordnung ist folgendes zu bemerken. Wenn wir uns denken, daß die zwischen den Teilchen wirksame Kraft geändert wird, so kann hierdurch zwar der Impuls des einzelnen Teilchens geändert werden, dagegen nicht der Impuls des Gesamtsystems. Die Schwerpunktsenergie wird also in beliebiger Näherung nicht von α abhängig sein. Dies bedeutet, daß wir nicht diejenigen Glieder auszurechnen brauchen, in denen anschaulich ein Teilchen mit der Schwerpunktskraft angeregt wird und mit der Austauschkraft in den Grundzustand zurückkehrt und umgekehrt.

Wir bekommen also, indem wir das Matricelement $S_p^{p'} + \hat{U}_p^{p'}$ (Schwerpunktsenergie + fiktives Potential) mit $s_p^{p'}$ bezeichnen:

$$\begin{aligned} S^{(2)} = & \frac{1}{2} \frac{M}{\hbar^2 \alpha} \sum_{p, n}^{\text{bes.}} \sum_{p', n'}^{\text{unbes.}} \frac{s_p^{p'} n' (c_4 s_{p n}^{p' n'} - c'_4 s_{p n}^{n' p'})}{p + n - p' - n'} \\ & + \frac{M}{\hbar^2 \alpha} \sum_{p, m, l}^{\text{bes.}} \sum_{p'}^{\text{unbes.}} \frac{c_5 s_{p m}^{m p'} s_{p' l}^{l p} + c'_5 s_{p'}^{p'} S_p^{p'}}{p - p'} \\ & - 4 \frac{M}{\hbar^2 \alpha} \sum_p^{\text{bes.}} \sum_{p'}^{\text{unbes.}} \frac{|\hat{U}_p^{p'}|^2}{p - p'} - \frac{2M}{\hbar^2 \alpha} \sum_p^{\text{bes.}} \sum_{p'}^{\text{unbes.}} \frac{c_6 s_p^{n p'} s_{p'}^{p'}}{p - p'}. \end{aligned}$$

Wenn wir für den Spin-Ladungsanteil der Kraft 1 setzen, bekommen wir für die noch unbestimmten Koeffizienten:

$$\begin{aligned} c_4 &= 16, & c'_4 &= 4, & c_6 &= 4. \\ c'_4 &= 4, & c_5 &= 4, \end{aligned}$$

Die Ausrechnung der Summen ist sehr einfach, da mit s nur Übergänge stattfinden können, in denen die Gesamtquantenzahl um 2 geändert wird. Wir führen also die Berechnung nicht im einzelnen vor, sondern geben nur das Endergebnis an. Dieses lautet für ${}^4_2\text{He}$: $S^{(2)} = -\frac{3}{16} \frac{\hbar^2 \alpha}{M}$.

$S^{(2)}$ ist also hier von der Größenordnung etwa viermal so groß wie die Coulomb-Energie erster Ordnung. Für ${}^{16}_8\text{O}$ dagegen würde $S^{(2)}$ klein gegen die Coulomb-Energie erster Ordnung sein. $S^{(2)}$ ist deshalb in diesem Falle weggelassen worden.

Herrn Prof. Dr. W. Heisenberg, auf dessen Anregung diese Untersuchung geschah, gebührt mein herzlicher Dank für sein ständiges Interesse während der Durchführung. Ganz besonders möchte ich auch Herrn Dr. H. Euler danken für seine wertvolle Hilfe.