

Näherungen zur Hartree-Fock-Methode mit Paritätsmischung

Thèse

présentée à la Faculté des Sciences

de l'Université de Neuchâtel

pour obtenir le grade de Docteur ès Sciences physiques

par

Joachim Müller-Schwartz

Sonderdruck aus
Zeitschrift für Physik, Bd. 203, S. 389—419 (1967)
Springer-Verlag · Berlin · Heidelberg · New York

Meiner Frau und meinen Eltern
gewidmet

Näherungen zur Hartree-Fock-Methode mit Paritätsmischung

JOACHIM MÜLLER-SCHWARTZ

Institut für Physik der Universität Neuchâtel (Schweiz)

Eingegangen am 7. März 1967

We examine the quantitative behavior of parity-mixing in the approximation of Hartree-Fock using one-particle-functions without definite parity (PHF). With the aid of a variational method (at most one variation parameter for each particle and self-consistent treatment of the OPEP alone), we found that the mixing will be large if the mixing parameters are taken as pure imaginary (with our choice of phase), that is if the product wave function is time reversal invariant. In this case the parity-mixing will be produced by exchange terms alone and only long range forces can contribute substantially. Therefore the OPEP can be considered a good approximation of parity-mixing forces. We obtain the correct magnitude of the single-particle energy-splittings which are produced in the usual treatments by the LS-term of the shell model.

I. Einleitung

Die Hartree-Fock-Methode mit Einteilchenfunktionen nicht definierter Parität (PHF) wurde von AMIET und HUGUENIN¹ aus einer Idee von BLEULER² heraus entwickelt. Aus dieser Idee stammt zunächst die halbmesonentheoretische Arbeit von AMIET³, der wir noch wesentliche Züge unserer Arbeit verdanken. Erst danach entstand die Arbeit¹, in der endlich die Idee der Paritätsmischung auf eine solide theoretische Grundlage gestellt werden konnte.

AMIET und HUGUENIN konnten beweisen, daß ein auf definite Parität projiziertes Produkt von Einteilchenfunktionen nicht definierter Parität im Sinne eines Variationsprinzips eine tiefere Grundzustandsenergie liefern muß als ein Produkt von Schafenmodellfunktionen, daß also die paritätsgemischte Funktion besser ist als diejenige mit Einteilchenfunktionen definierter Parität. Die Frage, welche nun geklärt werden muß, ist die Frage nach der Größe der Paritätsmischung, das heißt: Ist die Mischung überhaupt für die Kerntheorie wesentlich, ist sie groß genug, daß sie interessant ist? Mit dieser Frage wollen wir uns hier beschäftigen.

¹ AMIET, J.-P., and P. HUGUENIN: *Nuclear Phys.* **46**, 171 (1963).

² BLEULER, K., u. CH. TERREAUX: *Helv. Phys. Acta* **30**, 183 (1957); s. Bemerkung S. 205. — BLEULER, K.: *International School of Physics "Enrico Fermi" Varenna* 26. 7.—14. 8. 65, Cours XXXVI (unveröffentlicht).

³ AMIET, J.-P.: *Suppl. Nuovo cimento* **7**, 794 (1958).

Eine große Paritätsmischung würde eine Alternative zum Spin-Bahn-Term des Schalenmodells von GÖPPERT-MAYER und JENSEN bieten, sie könnte außerdem über das Schalenmodell hinaus die Abweichung der magnetischen Momente von den Schmidtwerten und die l -verbotenen $M1$ -Übergänge erklären. Weiterhin sollte sie in vielen Phänomenen der Kerne eine Rolle spielen (z. B. für β -Übergänge, s. Ref. ⁴).

Andererseits gibt es aber auch Phänomene im Kern, wodie Paritätsmischung auf den ersten Blick katastrophal wirken sollte, in Wirklichkeit aber wenig ändern kann (z. B. die direkten Kernreaktionen, siehe Ref. ⁵)*. Bis jetzt ist noch keine experimentelle Tatsache entdeckt worden, die wirklich zwingend die Existenz einer großen Paritätsmischung beweisen könnte**. Im Falle, daß die PHF mit realistischen Kräften eine große Paritätsmischung ergibt, scheint es notwendig zu sein, die für viele kerntheoretische Untersuchungen benutzte HF-Basis durch die PHF-Basis zu ersetzen, da offenbar der durch die PHF beschriebene Effekt nur sehr schwer durch andere Näherungsverfahren zu erhalten wäre. Andererseits behält die PHF-Basis im wesentlichen die relativ einfache Struktur der HF-Basis, man kann sogar zeigen, daß in vielen Fällen die einfache Produktfunktion in ausgezeichneter Näherung dieselben Dienste tut wie die projizierte Produktfunktion, wenn die Paritätsmischung nicht klein ist.

Die ersten Rechnungen zur PHF wurden in Ref. ⁶ durchgeführt. Sie beruhen auf der Annahme, daß nur der OPEP zur Paritätsmischung beiträgt, die nicht paritätsmischenden Kräfte wurden durch ein phänomenologisches Einkörperpotential berücksichtigt. Es wurden nur die direkten Terme vom OPEP genommen. In diesem Fall werden die Mischungsparameter reell (für unsere Phasenwahl der Spinwinkelfunktionen) und die Matrixelemente sind ziemlich empfindlich von dem offenbar völlig falsch angenommenen inneren Teil der Kraft abhängig. Bei Verbesserung des benutzten Zweikörperpotentials werden die Chancen für die Existenz einer großen Paritätsmischung ziemlich schlecht.

* Weitere Arbeiten über Paritätsmischung: ARAKI, G.: Berichte vom Congrès International de Physique Nucléaire, Paris 1964. ARAKI, G.: Nuclear Phys. 78, 625 (1966).

** Eine solche Tatsache wäre die systematische Beobachtung von niedrigliegenden O^- -Zuständen bei $g-g$ -Kernen, die die PHF vorhersagt. Das einzige solche Niveau, das eindeutig O^- ist, ist bei ^{14}C (6,89 MeV) gefunden worden. Siehe REISS, F., u. W. TROST: Nuclear Phys. 78, 385 (1966).

⁴ AMIET, J.-P., W. EBENHÖH u. P. HUGUENIN: Wird veröffentlicht in Helv. Phys. Acta, 1967.

⁵ AMIET, J.-P., and P. HUGUENIN: Nuclear Phys. 80, 353 (1966).

⁶ MÜLLER, J.: Diplomarbeit am Inst. f. Theor. Kernphysik Bonn, 1963 (nicht veröffentlicht); vorgetragen bei der Tagung der Physikalischen Gesellschaft Bayern, Erlangen 20.—24. 4. 1963.

Anders wird die Situation, wenn wir den Austausch berücksichtigen. Wie EBENHÖH⁷ in einer Rechnung für leichte Kerne gezeigt hat, ist der Fall der rein imaginären Mischungsparameter günstiger als der der reellen*. Wir haben das unter den Annahmen von⁶ bestätigt. In diesem Fall sind aber diese Annahmen, nämlich daß die Paritätsmischung nur durch den OPEP geliefert wird, viel besser begründet. Die Mischungsmatrixelemente werden dann nur vom Austausch allein geliefert (bei lokalen Kräften), weshalb der Beitrag einer δ -Kraft exakt verschwindet. Die langreichweitigen Teile der Kraft, für die der OPEP eine gute Näherung darstellt, geben also im Fall der imaginären Mischungsparameter den Hauptbeitrag.

Wir finden in diesem Fall mit Hilfe eines Variationsverfahrens, in dem nur höchstens ein freier Parameter in jeder Einteilchenfunktion vorkommt (wir sprechen von der Näherung „ $n=n'$ “), bei der realistischen Kopplungskonstanten des OPEP $f=1$ ** eine große Paritätsmischung, welche die Spin-Bahn-Aufspaltung sehr gut liefert. Leichte und schwere Kerne wurden betrachtet und in unserer Arbeit nicht ein einziger Parameter angepaßt. Die Resultate stimmen erstaunlich gut mit den auf falschen Voraussetzungen beruhenden Ergebnissen von Ref.⁶ überein. Lediglich die relativen Phasen zwischen analogen Proton- bzw. Neutronparametern erweisen sich im Gegensatz zum reellen Fall als gleich, wie es auch in Ref.⁴ gefordert wird.

Unsere Ergebnisse machen die Existenz einer großen Paritätsmischung sehr wahrscheinlich. Zwar sind die bei der Variation benutzten Energienenner vermutlich zu klein. Dafür wissen wir ziemlich sicher, daß eine Vergrößerung der Anzahl der Variationsparameter die Paritätsmischung wesentlich vergrößert, da eine Reihe ziemlich großer Matrixelemente in unserer Näherung nicht berücksichtigt wird. (Für den reellen Fall und ohne Austausch hat RÖHL⁸ gezeigt, daß die Hinzunahme der von uns nicht berücksichtigten Matrixelemente wesentlich ist. Daß solche Matrixelemente auch für unseren Fall groß sind, haben wir selbst gezeigt.)

Im nächsten Kapitel werden die Grundgleichungen und Grundeigenschaften der PHF angegeben. Kapitel III behandelt die erwähnte Näherung ($n=n'$). Diese Näherung hat zwei Varianten: a) Selbstkonsistenz-

* Für die auf die Parität projizierte Produktfunktion fordert die Bedingung der Zeitumkehrinvarianz nur reelle oder nur rein imaginäre Mischungsparameter. Abgesehen davon scheint uns der Fall der wesentlich komplexen Mischungsparameter keine Verbesserung zu bringen, wie wir an einem vereinfachten Modell gezeigt haben. Bei unserer Phasenwahl der Schalenmodellfunktionen φ_{ljm} gilt bei Anwendung des Zeitumkehroperators $T \varphi_{ljm} = (-1)^{l+j-m} \varphi_{lj-m}$.

** $f=1$ entspricht $g^2=f^2/4\pi=0,08$.

⁷ EBENHÖH, W.: Z. Physik **195**, 171 (1966).

⁸ RÖHL, W.: Z. Physik **195**, 389 (1966).

rechnung mit Benutzung von Einteilchenstörungsrechnung (diese wurde für die Rechnung in Ref. ⁶ benutzt), b) Variationsrechnung im Rahmen eines Ritz-Prinzips, die wir hier ausschließlich rechnerisch behandelt haben. Kapitel IV gibt ein ausführliches Beispiel der Rechnung bei einem ausgewählten Kern (²⁸Si). In Kapitel V werden die allgemeinen Ergebnisse dargestellt. Kapitel VI gibt eine Zusammenfassung.

Im Anhang beschreiben wir, wie die Matrixelemente des OPEP berechnet wurden (partielle Integration und Multipolentwicklung). Die Rechnungen wurden teilweise auf der IBM 7090 des Instituts für Instrumentelle Mathematik der Universität Bonn, teilweise auf der IBM 7040 der Ecole Polytechnique de l'Université de Lausanne durchgeführt.

II. Theorie der PHF-Methode

a) Zusammenhang mit der HF-Methode

Die Hartree-Fock-Methode liefert im Rahmen eines Ritzschen Prinzips die beste Wellenfunktion, die die Form eines antisymmetrischen Produktes hat. Sei

$$\Psi = A \prod_{i=1}^A \chi_i(x_i) \quad (1)$$

die Gesamtwellenfunktion mit den Einteilchenfunktionen χ_i und dem Antisymmetrisierungsoperator A. Die Bedingung

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \text{Min} \quad \text{mit} \quad \langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \quad (2)$$

führt auf die HF-Einteilchengleichungen

$$-\frac{1}{2m} \Delta \chi_i(x) + V_d(x) \chi_i(x) + [V_a \chi_i](x) = \epsilon_i \chi_i(x). \quad (3)$$

Dabei ist

$$V_d(x) = \sum_{k=1}^A \int \chi_k^*(x') U(x-x') \chi_k(x') d^3 x' \quad (4)$$

das lokale HF-Potential, das im direkten Term erscheint. Der im Austauschterm vorkommende Integraloperator V_a ist definiert durch

$$[V_a \chi_i](x) = - \sum_{k=1}^A \int \chi_k^*(x') U(x-x') \chi_i(x') d^3 x' \chi_k(x). \quad (5)$$

In einer anderen Notation schreiben wir für (3)

$$(T + V_d + V_a) |I\rangle = \epsilon_i |I\rangle, \quad (6)$$

wobei wir $\chi_i(x)$ durch den „ket“ $|I\rangle$ ersetzt haben. T ist der Operator der kinetischen Energie:

$$T = -\frac{1}{2m} \Delta.$$

Die fundamentale Idee der PHF ist es, Einteilchenwellenfunktionen zu benutzen, die keine definite Parität haben. Die Einteilchenfunktionen sollen jedoch wie beim Schalenmodell zu definitem j und m gehören, bzw. Eigenfunktionen von J^2 und J_z sein. Das ist gleichbedeutend mit der Annahme eines sphärischen Einteilchenpotentials. Wir behalten ebenfalls die Forderung bei, daß die Einteilchenfunktionen Eigenfunktionen von τ_3 , also reine Proton- bzw. Neutronfunktionen sind. Sei Π der Paritätsoperator im Hilbertraum mit

$$\Pi \Psi(\mathbf{x}) = \Psi(-\mathbf{x}) \equiv \tilde{\Psi}(\mathbf{x}). \quad (7)$$

Es gilt $\Pi \Pi = 1$ und $\Pi \Phi_{ijm} = (-1)^l \Phi_{ijm}$. Wir führen ein

$$|\pm i\rangle = \frac{1}{2}(|I\rangle \pm \Pi |I\rangle). \quad (8)$$

Auf diese Weise erhalten wir eine Zerlegung von $|I\rangle$ durch

$$|I\rangle = |+i\rangle + |-i\rangle \quad (9)$$

mit

$$\Pi |\pm i\rangle = \pm |\pm i\rangle \quad (10)$$

und

$$\langle +i|+i\rangle + \langle -i|-i\rangle = 1. \quad (11)$$

Wir definieren nun Operatoren (Potentiale) V^+ und V^- durch

$$V^\pm = \frac{1}{2}(V \pm \Pi V \Pi), \quad (12)$$

wobei $V = V_d + V_a$ sei. Mit dieser Definition haben wir

$$V^+ + V^- = V \quad (13)$$

und

$$\Pi V^\pm = \pm V^\pm \Pi. \quad (14)$$

Wenden wir den Operator Π auf (6) an und addieren bzw. subtrahieren die resultierende Gleichung von (6), bekommen wir mit (9), (10), (13) und (14)

$$\begin{aligned} (T + V^+) | +i\rangle + V^- | -i\rangle &= \varepsilon_i | +i\rangle \\ (T + V^+) | -i\rangle + V^- | +i\rangle &= \varepsilon_i | -i\rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

Dies sind die PHF-Einteilchengleichungen, die den HF-Gleichungen (6) sehr ähnlich sind und im Prinzip genauso selbstkonsistent gelöst werden sollten. Das System enthält doppelt soviel Gleichungen und Funktionen wie (6). (In einer Näherung, leider ohne Austausch, wurde dieses System von RÖHL⁸ direkt numerisch behandelt.)

Neu für die Kernstruktur ist das bei der PHF-Theorie auftretende Potential V^- , das die Kopplung der Gleichungen bewirkt. Im Gegensatz zu den üblichen Einteilchenpotentialen antikommutiert V^- mit Π . Als Folge davon kommutiert der Einteilchenhamiltonoperator bei $V^- \neq 0$ nicht mehr mit L^2 , d. h., er verursacht Paritätsmischung.

b) Projektionen

Die Transformation $|+i\rangle \rightarrow |+i\rangle$ und $|-i\rangle \rightarrow -|-i\rangle$ für alle i läßt das System (15) invariant, da V^- in $-V^-$ übergeht, aber V^+ nicht geändert wird. Dadurch erhält man im Falle von Paritätsmischung aus jeder Lösung Ψ eine neue Lösung $\tilde{\Psi} = \Pi \Psi$, die zu derselben Energie gehört. Beide Lösungen sind nicht Eigenfunktionen von Π , was man wegen der Paritätsinvarianz von H für einen nichtentarteten Zustand verlangen muß. Wir können aber aus Ψ und $\tilde{\Psi}$ durch Linearkombination neue Zustände bilden, die diese Eigenschaft besitzen

$$\Psi^\pm = \frac{1}{N^\pm} (\Psi \pm \tilde{\Psi}). \quad (16)$$

N^+ und N^- sind Normierungsnenner:

$$N^\pm = \sqrt{2} \sqrt{1 \pm \langle \Pi \rangle}. \quad (17)$$

Ψ^+ und Ψ^- sind wegen

$$2\Psi = N^+ \Psi^+ + N^- \Psi^- \quad \text{und} \quad 2\tilde{\Psi} = N^+ \Psi^+ - N^- \Psi^-$$

die Projektionen von Ψ bzw. $\tilde{\Psi}$ auf die Parität.

Die berechnete Funktion Ψ können wir auf diese Weise, um die richtige Parität zu erhalten, projizieren. Ein besseres Verfahren wäre es, im Rahmen eines Ritzprinzips Ψ^+ und Ψ^- einzeln zu variieren. Leider ist der zweite Weg wesentlich komplizierter.

Der Unterschied zwischen beiden Verfahren ist jedoch sehr gering, wenn die Paritätsmischung nicht zu klein ist. Im ersten Fall ist die zu variierende Energie

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle, \quad (18)$$

im zweiten Fall

$$E^\pm = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle \pm \langle \Psi | H \Pi | \Psi \rangle}{1 \pm \langle \Psi | \Pi | \Psi \rangle}. \quad (19)$$

Der Unterschied zwischen beiden Ausdrücken ist

$$\Delta E^\pm = E^\pm - E = \pm \frac{\langle \Psi | H \Pi | \Psi \rangle - \langle \Pi \rangle \langle \Psi | H | \Psi \rangle}{1 \pm \langle \Pi \rangle} \quad (20)$$

und stellt sich bei nicht zu kleiner Paritätsmischung als ein sehr kleiner Wert heraus. Das kommt daher, daß $\langle \Pi \rangle = \langle \Psi | \Pi | \Psi \rangle$ dann sehr klein wird und $\langle \Psi | H \Pi | \Psi \rangle$ ebenfalls bei größerer Teilchenzahl etwa proportional zu $\langle \Pi \rangle$ ist. Das gibt uns die Berechtigung dazu, bei nicht zu kleiner Paritätsmischung mit der nichtprojizierten Funktion Ψ zu rechnen.

Wir können sogar beweisen, daß die Paritätsmischung bei Variation der projizierten Funktion genau dann groß (klein) ist, wenn sie sich bei

Variation der Produktfunktion als groß (klein) erweist. Sei nämlich die Paritätsmischung der Produktfunktion groß. Dann ist $\langle \Pi \rangle$ klein und wir haben, wenn wir jetzt projizieren, für diese Funktion ebenfalls einen großen Energiegewinn durch die Paritätsmischung. Variation der projizierten Funktion kann diesen Energiegewinn aber nicht verkleinern. Sei andererseits der Energiegewinn bei Variation der projizierten Funktion groß, so muß sich wiederum $\langle \Pi \rangle$ als klein erweisen, die Produktfunktion liefert also einen großen Energiegewinn. Die Paritätsmischung für diese Funktion ist ebenfalls groß. Damit ist der Beweis geführt. Eine genauere Diskussion dieser Fragen ist an Hand eines einfachen Modells in Ref.⁹ durchgeführt.

Mit den obigen Argumenten haben wir

$$\langle \Psi^\pm | H | \Psi^\pm \rangle \approx \langle \Psi | H | \Psi \rangle. \quad (21)$$

Für den Mittelwert eines beliebigen Einteilchen- oder Zweiteilchenoperators haben wir aus denselben Gründen wie oben

$$\langle \Psi^\pm | Q | \Psi^\pm \rangle \approx \langle \Psi | Q | \Psi \rangle, \quad (22)$$

genauso für beliebige Matrixelemente. Die Beziehung ist i.a. für beliebige Vielteilchenoperatoren falsch, z. B. für Π .

Im Falle, daß die analogen Einteilchenfunktionen für Protonen und Neutronen bezüglich der Raum- und Spinkoordinaten nicht gleich sind, besitzt Ψ auch keinen definiten Isospin. Man kann zeigen, daß im Falle der entgegengesetzten Phasen der Beimischung für analoge Einteilchenfunktionen für Kerne mit geringem Neutronenüberschuß die magnetischen Momente eine zum Teil große Korrektur bekommen müssen (s. Ref.⁴).

Im Fall der imaginären Mischungsparameter, der offenbar bei weitem der günstigere ist, hat sich jedoch herausgestellt, daß die Phasen der Beimischung gleich sein müssen, die Mischungsparameter werden näherungsweise gleich (s. auch Ref.⁷). In diesem Fall macht eine Projektion auf den Isospin wenig aus, genau wie bei der HF-Methode mit Schalenmodellfunktionen. Für schwere Kerne ist der Isospin ohnehin keine gute Quantenzahl. Wir betrachten daher die Frage der Isospinprojektion nicht weiter und benutzen die nichtprojizierten Wellenfunktionen.

III. Näherungen der PHF-Methode

a) Selbstkonsistenzrechnung mit Einteilchenstörungsrechnung

Wir beschreiben nun ein Verfahren, mit dem es möglich ist, die Selbstkonsistenzrechnung näherungsweise durchzuführen. Das Potential V^+ wird fest angenommen als das phänomenologisch bestimmte

⁹ AGASSI, D., H. J. LIPKIN, and N. MESHKOV: Nuclear Phys. **86**, 321 (1966).

Schalenmodellpotential¹⁰, wobei wir den Spin-Bahn-Term weglassen, da wir seinen Effekt eben durch die Paritätsmischung beschreiben wollen. V^+ ist also spinunabhängig und kommutiert mit Π , J und τ_3 . Als Basis für die Störungsrechnung nehmen wir die Eigenfunktionen des Operators H^0 :

$$H^0 = T + V^+, \quad H^0 |i\rangle = \varepsilon_i^0 |i\rangle. \quad (23)$$

$|i\rangle$ sei hier so normiert, daß $\langle i|i'\rangle = \delta_{ii'}$ ist. i bedeutet die Zusammenfassung der Quantenzahlen n_i, l_i, j_i, m_i, t_i . Wir führen dazu ein $\bar{i} = (n_i \bar{l}_i j_i m_i t_i)$ mit $\bar{l}_i = 2j_i - l_i = l_i \pm 1$. Wir beginnen die Selbstkonsistenz mit Funktionen der Form

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+|\xi_i|^2}} (|i\rangle + \xi_i |\bar{i}\rangle). \quad (24)$$

Mit Hilfe dieser Funktionen können wir das Potential V^- berechnen. Dieses Potential benutzen wir als Störung zu H^0 . Wir bekommen in erster Näherung als Lösung der Eigenwertgleichung

$$(H^0 + V^-) |K\rangle = \varepsilon_k |K\rangle, \quad (25)$$

$$|K\rangle = \frac{1}{N_k} \left(|k\rangle + \sum_{k' \neq k} \frac{\langle k'|V^-|k\rangle}{\varepsilon_k^0 - \varepsilon_{k'}^0} |k'\rangle \right). \quad (26)$$

Der Normierungsnenner N_k soll $|K\rangle$ auf 1 normieren, was für die Weiterbehandlung der Funktion in der Selbstkonsistenzrechnung wesentlich ist. Für ein sphärisches Potential V^- ist $\langle k'|V^-|k\rangle = 0$, wenn nicht $j_k = j_{k'}$ und $m_k = m_{k'}$ ist. Außerdem muß wegen Isospinerhaltung $t_k = t_{k'}$ sein.

Als Näherung führen wir jetzt ein, daß nur solche Matrixelemente berücksichtigt werden sollen, bei denen $n_k = n_{k'}$ ist. Diese Matrixelemente sind wegen der günstigen Überlappung der Wellenfunktionen die größten, wie auch durch Rechnungen mit dem OPEP gezeigt wurde, jedoch sind die anderen Matrixelemente nicht klein (s. auch Ref.⁸ am Fall der reellen Parameter ohne Austausch). Wir behaupten daher nicht, daß die Näherung gut ist, sie ist allerdings für die rechnerische Behandlung von schwereren Kernen ausgesprochen nützlich (und auch bisher notwendig).

In der Summe von (26) bleibt nur noch ein einziger Term stehen, nämlich der mit $k' = \bar{k}$. Mit (24), (4), (5) und (12) bekommen wir

$$\begin{aligned} \langle \bar{k}|V^-|k\rangle = \sum_i \frac{1}{1+|\xi_i|^2} & (\xi_i \langle i, \bar{k}|U|i, k\rangle + \xi_i^* \langle i, \bar{k}|U|i, k\rangle - \\ & - \xi_i \langle i, \bar{k}|U|k, \bar{i}\rangle - \xi_i^* \langle i, \bar{k}|U|k, \bar{i}\rangle). \end{aligned} \quad (27)$$

Wegen der Paritätserhaltung und der Zeitumkehrinvarianz der Wechselwirkung sind bei unserer Phasenwahl die Energiematrixelemente reell.

¹⁰ BEINER, M.: Forschungsberichte des Landes Nordrhein-Westfalen Nr. 1407 (1964).

Dann können wir auch schreiben

$$\langle \bar{k} | V^- | k \rangle = \sum_i \frac{1}{1 + |\xi_i|^2} (\xi_i \langle \bar{i}, k | U | i, \bar{k} \rangle + \xi_i^* \langle i, k | U | \bar{i}, \bar{k} \rangle - \xi_i \langle \bar{i}, k | U | \bar{k}, i \rangle - \xi_i^* \langle i, k | U | \bar{k}, \bar{i} \rangle). \quad (28)$$

In (26) haben wir mit $k' = \bar{k}$ als einzigen Summanden die Form (24) zurückerhalten. Das Selbstkonsistenzproblem ist damit auf die Lösung des folgenden Gleichungssystems zurückgeführt (nach Einsetzen von (28)):

$$\xi_i = \frac{1}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_i^0} \sum_k \frac{1}{1 + |\xi_k|^2} (\xi_k \langle i, \bar{k} | U | \bar{i}, k \rangle + \xi_k^* \langle i, k | U | \bar{i}, \bar{k} \rangle - \text{Austausch}). \quad (29)$$

Wir erhalten aus (29) unter Benutzung der Realität der Matrixelemente

$$\xi_{\bar{i}} = -\xi_i^*. \quad (30)$$

Diese fundamentale Eigenschaft garantiert die Orthogonalität der Zustände $|I\rangle$ und $|\bar{I}\rangle$. Außerdem ergibt sich mit (30) aus (29), daß Niveaus, bei denen die Zustände i und \bar{i} beide besetzt sind, für die Mischung überhaupt nicht beitragen. Wir brauchen nur besetzte Niveaus i zu berücksichtigen, bei denen der „Paritätspartner“ \bar{i} nicht besetzt ist.

Unsere Form der projizierten Gesamtwellenfunktion ist genau in folgenden Fällen zeitumkehrinvariant: 1. alle ξ_i reell, 2. alle ξ_i rein imaginär (s. Ref. ⁷). Für den Fall reeller $\xi_i \equiv x_i$ erhalten wir aus (29)

$$x_i = -\frac{1}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_i^0} \sum_k \frac{x_k}{1 + x_k^2} (\langle i, \bar{k} | U | \bar{i}, k \rangle + \langle i, k | U | \bar{i}, \bar{k} \rangle - \text{Austausch}). \quad (31)$$

Für den Fall rein imaginärer $\xi_i \equiv iy_i$ erhalten wir

$$y_i = -\frac{1}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_i^0} \sum_k \frac{y_k}{1 + y_k^2} (\langle i, \bar{k} | U | \bar{i}, k \rangle - \langle i, k | U | \bar{i}, \bar{k} \rangle - \text{Austausch}). \quad (32)$$

Der Unterschied zwischen (31) und (32) ist gerade das Vorzeichen vor dem zweiten Matrixelement.

Lösungen der obigen Gleichungssysteme können durch Iteration gefunden werden. Man setzt beliebige Werte in die rechte Seite ein, bekommt dadurch neue Werte, die man wieder rechts einsetzt, usw. Nur wenn die Matrixelemente auf der rechten Seite eine kritische Größe erreicht haben, die von dem Grad der Kohärenz abhängt, gibt es eine Lösung mit $\xi_i \neq 0$. Sonst gibt es nur die immer mögliche triviale Lösung: alle $\xi_i = 0$.

b) Variationsrechnung

Wir schreiben den Hamiltonoperator in der Form

$$H = H^0 + W. \quad (33)$$

Dabei bedeutet W die Einpionenaustauschkraft (OPEP). H^0 enthält die kinetische Energie und – als eine Näherung – das phänomenologische Schalenmodellpotential¹⁰ ohne LS -Term. Die Gründe, die zu dem Modellhamiltonoperator (33) geführt haben, sind die folgenden:

1. Der Beitrag des OPEP zur Paritätsmischung ist groß.
2. H^0 kann die Reihenfolge der Niveaus bis auf die Spin-Bahn-Aufspaltung gut wiedergeben, gibt aber keinen Beitrag zur Paritätsmischung.
3. Man darf annehmen, daß das Zweikörper-Kernpotential bei großem Abstand in den aus der Feldtheorie erhaltenen OPEP übergeht, der OPEP scheint also wesentlicher Bestandteil der effektiven Kernkraft zu sein.
4. Die Matrixelemente des OPEP lassen sich relativ leicht berechnen (s. Anhang).

Es ist klar, daß gewisse Beiträge von W bereits in der phänomenologischen Anpassung von H^0 berücksichtigt sind. Diese Beiträge heben sich in der Variationsenergie von selbst heraus, bei den Einteilchenenergien wird ein durch sie verursachter Fehler später korrigiert.

Die Ergebnisse von a) legen für eine Variationsrechnung den Ansatz (24) nahe

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+|\xi_i|^2}} (|i\rangle + \xi_i |\bar{i}\rangle), \quad (34)$$

wo die $|i\rangle$ wieder als Eigenfunktionen von H^0 angenommen werden. Die Forderung der Orthogonalität von $|I\rangle$ und $|\bar{I}\rangle$ ergibt (30): $\xi_{\bar{i}} = -\xi_i^*$.

Für die Variation berechnen wir den Erwartungswert des Operators (33)

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle \quad (35)$$

bezüglich

$$\Psi = A \prod_i |I\rangle. \quad (36)$$

Wir haben

$$E = \sum_i \langle I | H^0 | I \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,k} (\langle I, K | W | I, K \rangle - \langle I, K | W | K, I \rangle). \quad (37)$$

Drücken wir $|I\rangle$ durch (34) aus, erhalten wir

$$\langle I | H^0 | I \rangle = \frac{1}{1+|\xi_i|^2} (\langle i | H^0 | i \rangle + |\xi_i|^2 \langle \bar{i} | H^0 | \bar{i} \rangle) \quad (38)$$

und

$$\begin{aligned} &\langle I, K | W | I, K \rangle \\ &= \frac{1}{1+|\xi_i|^2} \frac{1}{1+|\xi_k|^2} (\langle i, k | W | i, k \rangle + |\xi_k|^2 \langle i, \bar{k} | W | i, \bar{k} \rangle + \\ &\quad + |\xi_i|^2 \langle \bar{i}, k | W | \bar{i}, k \rangle + |\xi_i|^2 |\xi_k|^2 \langle \bar{i}, \bar{k} | W | \bar{i}, \bar{k} \rangle + \\ &\quad + 2 \operatorname{Re}(\xi_i^* \xi_k) \langle i, \bar{k} | W | \bar{i}, k \rangle + 2 \operatorname{Re}(\xi_i \xi_k) \langle i, k | W | \bar{i}, \bar{k} \rangle). \end{aligned} \quad (39)$$

Dabei wurde die Hermitizität und Paritätserhaltung von W und die Realität der Matrixelemente $\langle i, k | W | i, k \rangle$ etc. ausgenutzt. Einen analogen Ausdruck erhält man für das Austauschmatrixelement. Wir führen folgende Abkürzungen ein:

$$\begin{aligned} \varepsilon_i^0 &= \langle i | H^0 | i \rangle, & \varepsilon_{\bar{i}}^0 &= \langle \bar{i} | H^0 | \bar{i} \rangle \\ A_{ik}^1 &= \langle i, \bar{k} | W | \bar{i}, k \rangle - \langle i, \bar{k} | W | k, \bar{i} \rangle \\ A_{ik}^2 &= \langle i, k | W | \bar{i}, \bar{k} \rangle - \langle i, k | W | \bar{k}, \bar{i} \rangle \\ C_{ik} &= [\langle i, k | W | i, k \rangle] - \langle i, k | W | k, i \rangle \\ Q_{ik} &= C_{ik} - C_{i\bar{k}} - C_{i\bar{k}} + C_{i\bar{k}} \\ P_i &= \sum_k (C_{ik} - C_{i\bar{k}}). \end{aligned} \quad (40)$$

Im sphärischen Fall verschwinden die direkten Terme von C_{ik} für den OPEP. Mit (37), (38), (39) und (40) erhalten wir

$$\begin{aligned} E &= \sum_i \frac{1}{1+|\xi_i|^2} (\varepsilon_i^0 + |\xi_i|^2 \varepsilon_i^0) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{1}{1+|\xi_i|^2} \frac{1}{1+|\xi_k|^2} (C_{ik} + |\xi_k|^2 C_{i\bar{k}} + |\xi_i|^2 C_{ik} + \\ &\quad + |\xi_i|^2 |\xi_k|^2 C_{i\bar{k}} + 2 \operatorname{Re}(\xi_i^* \xi_k) A_{ik}^1 + 2 \operatorname{Re}(\xi_i \xi_k) A_{ik}^2) \end{aligned} \quad (41)$$

oder nach Einführung von

$$E^0 = \sum_i \varepsilon_i^0 + \frac{1}{2} \sum_{i,k} C_{ik},$$

welcher Ausdruck die Energie des Kerns ohne Paritätsmischung darstellt und nicht von ξ_i abhängt

$$\begin{aligned} E &= E^0 + \sum_i (\varepsilon_i^0 - \varepsilon_i^0 + P_i) \frac{|\xi_i|^2}{1+|\xi_i|^2} + \sum_{i,k} \frac{1}{1+|\xi_i|^2} \frac{1}{1+|\xi_k|^2} \times \\ &\quad \times (\frac{1}{2} |\xi_i|^2 |\xi_k|^2 Q_{ik} + \operatorname{Re}(\xi_i^* \xi_k) A_{ik}^1 + \operatorname{Re}(\xi_i \xi_k) A_{ik}^2). \end{aligned} \quad (42)$$

Wir stellen fest, daß wegen

$$\xi_i = -\xi_i^*, \quad P_i = -P_i, \quad Q_{ik} = -Q_{ik} = -Q_{i\bar{k}} = Q_{i\bar{k}}, \quad A_{ik}^1 = A_{ik}^2 = A_{i\bar{k}}^2 = A_{i\bar{k}}^1$$

die Variationsenergie E nur von solchen ξ_i abhängt, bei denen i zu einem besetzten und \bar{i} zu einem unbesetzten Niveau gehört. Das Innere des Kerns trägt in unserer Näherung nicht zur Paritätsmischung bei. Wir wollen besetzte Niveaus i , bei denen der Paritätspartner \bar{i} nicht besetzt ist, nach der Bezeichnungswiese der feldtheoretischen Arbeit von AMIET³ als „Quellen“ oder „Quellniveaus“ bezeichnen und schreiben $i \in Q$, wenn i ein Quellniveau ist. Wir variieren jetzt nach ξ_i mit $i \in Q$, wobei wir bemerken, daß für diese ξ_i keine Nebenbedingungen vorhanden sind. Wir erhalten als Variationsgleichung

$$\left(\varepsilon_i^0 - \varepsilon_i^0 + P_i + \sum_k \frac{|\xi_k|^2}{1 + |\xi_k|^2} Q_{ik} \right) \xi_i + \sum_k \frac{1}{1 + |\xi_k|^2} [(\xi_k - \xi_i^2 \xi_k^*) A_{ik}^1 + (\xi_k^* - \xi_i^2 \xi_k) A_{ik}^2] = 0. \quad (43)$$

Wir betrachten die Fälle der reellen und rein imaginären ξ_i einzeln. Wir erhalten

$$1. \quad \frac{x_i}{1 - x_i^2} = - \frac{\sum_k \frac{x_k}{1 + x_k^2} (A_{ik}^1 + A_{ik}^2)}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_i^0 + P_i + \sum_k \frac{x_k^2}{1 + x_k^2} Q_{ik}} \quad (44)$$

für alle $\xi_i = x_i$ reell,

$$2. \quad \frac{y_i}{1 + y_i^2} = - \frac{\sum_k \frac{y_k}{1 + y_k^2} (A_{ik}^1 - A_{ik}^2)}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_i^0 + P_i + \sum_k \frac{y_k^2}{1 + y_k^2} Q_{ik}} \quad (45)$$

für alle $\xi_i = iy_i$ rein imaginär.

Wir können (44) bzw. (45) mit den entsprechenden Systemen (31) bzw. (32) vergleichen und finden eine bemerkenswerte Ähnlichkeit zwischen den Ergebnissen der Einteilchenstörungsrechnung erster Ordnung und den Ergebnissen der Variationsrechnung. In den Variationsgleichungen erscheinen lediglich Zusatzterme, nämlich der Nenner auf der linken Seite der Gleichungen und die Terme mit P_i und Q_{ik} im Nenner auf der rechten Seite. Sonst sind die Gleichungen identisch.

Bemerkenswert ist weiterhin, daß sich wie bei der Störungsrechnung die Gleichungen (44) und (45) nur durch das Vorzeichen von A_{ik}^2 unterscheiden.

Wir wollen nun noch Ausdrücke für die Einteilchenenergien angeben. Aus (33) und (6) finden wir

$$\varepsilon_i = \langle I | H^0 | I \rangle + \sum_k (\langle I, K | W | I, K \rangle - \langle I, K | W | K, I \rangle). \quad (46)$$

Daraus erhalten wir mit (38) und (39) für die Verschiebung der Niveaus i und \bar{i} durch die Paritätsmischung

$$\varepsilon'_i = \frac{|\xi_i|^2}{1+|\xi_i|^2} (\varepsilon_i^0 - \varepsilon_i^0) + \sum_k \frac{1}{1+|\xi_i|^2} \frac{1}{1+|\xi_k|^2} (C_{ik} + |\xi_k|^2 C_{i\bar{k}} + |\xi_i|^2 C_{ik} + |\xi_i|^2 |\xi_k|^2 C_{i\bar{k}} + 2 \operatorname{Re} (\xi_i^* \xi_k) A_{ik}^1 + 2 \operatorname{Re} (\xi_i \xi_k) A_{i\bar{k}}^2) \quad (47)$$

und

$$\varepsilon'_i = \frac{|\xi_i|^2}{1+|\xi_i|^2} (\varepsilon_i^0 - \varepsilon_i^0) + \sum_k \frac{1}{1+|\xi_i|^2} \frac{1}{1+|\xi_k|^2} (C_{ik} + |\xi_k|^2 C_{i\bar{k}} + |\xi_i|^2 C_{ik} + |\xi_i|^2 |\xi_k|^2 C_{i\bar{k}} - 2 \operatorname{Re} (\xi_i \xi_k) A_{i\bar{k}}^2 - 2 \operatorname{Re} (\xi_i^* \xi_k) A_{ik}^1). \quad (48)$$

Aus diesen Ausdrücken wollen wir noch einen Schönheitsfehler entfernen. Wir dürfen nämlich annehmen, daß eine gemeinsame Verschiebung der Niveaus i und \bar{i} schon bei der phänomenologischen Anpassung in H^0 berücksichtigt wurde. Diese gemeinsame Verschiebung ist

$$\delta \varepsilon_i = \frac{\varepsilon'_i + \varepsilon'_i}{2} = \frac{1}{2} \sum_k \frac{1}{1+|\xi_k|^2} (C_{ik} + |\xi_k|^2 C_{i\bar{k}} + C_{i\bar{k}} + |\xi_k|^2 C_{ik}). \quad (49)$$

Wir ziehen diese Energie von ε'_i und ε'_i ab und erhalten

$$\begin{aligned} \varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \varepsilon'_i - \delta \varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \frac{|\xi_i|^2}{1+|\xi_i|^2} (\varepsilon_i^0 - \varepsilon_i^0) + \frac{1}{1+|\xi_i|^2} \sum_k \frac{1}{1+|\xi_k|^2} \times \\ \times [\frac{1}{2}(1-|\xi_i|^2) (C_{ik} + |\xi_k|^2 C_{i\bar{k}} - C_{i\bar{k}} - |\xi_k|^2 C_{ik}) + \\ + 2 \operatorname{Re} (\xi_i^* \xi_k) A_{ik}^1 + 2 \operatorname{Re} (\xi_i \xi_k) A_{i\bar{k}}^2] \end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned} \varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \frac{|\xi_i|^2}{1+|\xi_i|^2} (\varepsilon_i^0 - \varepsilon_i^0) - \frac{1}{2} \left(P_i + \sum_k \frac{|\xi_k|^2}{1+|\xi_k|^2} Q_{ik} \right) \frac{1-|\xi_i|^2}{1+|\xi_i|^2} + \\ + 2 \frac{1}{1+|\xi_i|^2} \sum_k \frac{1}{1+|\xi_k|^2} (\operatorname{Re} (\xi_i^* \xi_k) A_{ik}^1 + \operatorname{Re} (\xi_i \xi_k) A_{i\bar{k}}^2). \end{aligned} \quad (50)$$

Genauso ist

$$\begin{aligned} \varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \varepsilon'_i - \delta \varepsilon_i, \\ \varepsilon_i = \varepsilon_i^0 - \frac{|\xi_i|^2}{1+|\xi_i|^2} (\varepsilon_i^0 - \varepsilon_i^0) + \frac{1}{2} \left(P_i + \sum_k \frac{|\xi_k|^2}{1+|\xi_k|^2} Q_{ik} \right) \frac{1-|\xi_i|^2}{1+|\xi_i|^2} - \\ - 2 \frac{1}{1+|\xi_i|^2} \sum_k \frac{1}{1+|\xi_k|^2} (\operatorname{Re} (\xi_i^* \xi_k) A_{ik}^1 + \operatorname{Re} (\xi_i \xi_k) A_{i\bar{k}}^2). \end{aligned} \quad (51)$$

Die Ausdrücke für reelle bzw. rein imaginäre ξ_i lassen sich aus (50) bzw. (51) leicht ableiten. Sie unterscheiden sich wieder nur durch das Vorzeichen vor A_{ik}^2 .

Wir wollen eine Diskussion der Gln. (44) und (45) und der Gl. (50), (51) anschließen. Dabei nehmen wir teilweise Ergebnisse der numerischen Rechnungen vorweg, die in Kapitel IV ausführlich diskutiert wird.

Wir betrachten in unserer Rechnung nur Kerne mit abgeschlossenen j -Schalen. Dadurch werden $\sum_{m_k} A_{ik}^{1,2}$, P_i und $\sum_{m_k} Q_{ik}$ von m_i unabhängig und wir erhalten Lösungen mit $\xi(n l j m t) = \xi(n l j m' t)$ für alle $m' \neq m$. Wir ordnen daher jeder j -Schale nur einen einzigen universellen Parameter ξ_i zu, was auch der angenommenen Kugelsymmetrie der betrachteten Kerne entspricht.

Wir haben uns darauf beschränkt, die Matrizen $\sum_{m_k} A_{ik}^{1,2}$, $\sum_{m_k} Q_{ik}$ und die Vektoren P_i nur für die Quellniveaus $i, k \in Q$ zu berechnen (i und k besetzt, \bar{i} und \bar{k} unbesetzt). Wir erhalten dann die ξ_i und ε_i , die zu diesen Niveaus gehören. Die zu anderen Niveaus gehörigen ξ_i , die zur Gesamtenergie nicht beitragen, jedoch innerhalb der PHF-Theorie wohldefiniert sind, wurden wie die dazugehörigen ε_i aus Gründen der Rechenzeiterparnis nicht bestimmt.

Die eigentlichen paritätsmischenden Matrixelemente sind die A_{ik}^1 und A_{ik}^2 . Im Falle, daß sie groß genug und kohärent sind, liefern sie Paritätsmischung und dann die gewünschte Abstoßung der Niveaus i und \bar{i} . Für die direkten Terme ist $A_{ik}^1 = A_{ik}^2$, so daß im Fall der imaginären Mischungsparameter nur Austauschsterme stehenbleiben.

Für den OPEP haben wir gezeigt, daß die Austauschsterme sehr groß sind, und daß der Fall der imaginären ξ weitaus günstiger für die Paritätsmischung als der Fall der reellen ξ ist. Es ist hierbei ein ganz wesentlicher Punkt, daß im ersten Fall eine δ -Kraft überhaupt nicht zur Paritätsmischung beiträgt, da für sie wieder $A_{ik}^1 = A_{ik}^2$ ist. Wir sind daher in diesem Fall sicher, daß der Hauptanteil der Paritätsmischung von langreichweitigen Kräften geliefert wird, für die der OPEP eine gute Näherung darstellt.

Das phänomenologische Potential von H^0 geht außer in der Bestimmung der Basisfunktionen nur in den Energien ε_i^0 in der Nähe der Fermigrenze ein. Da die phänomenologische Anpassung sich hauptsächlich auf diese Werte stützt, dürfte H^0 für die Wellenfunktionen und die Energien hier die besten Werte liefern. Trotzdem werden vermutlich die Energienenner zu klein geliefert (s. z. B. Ref.¹¹), was die Paritätsmischung zu sehr begünstigen würde.

¹¹ DAVIES, K. T. R., S. J. KRIEGER, and M. BARANGER: Nuclear Phys. **84**, 545 (1966).

Die Terme mit P_i und Q_{ik} ändern das Problem nicht wesentlich und können als Korrekturen betrachtet werden. Das ist deshalb wichtig, weil für diese Terme kurzreichweitige Kräfte und für P_i auch die tieferen Zustände eingehen. Trotzdem haben wir der Konsistenz halber diese Terme mitgenommen, obwohl der OPEP wahrscheinlich für sie keine gute Näherung ist. P_i gibt auch bei verschwindender Paritätsmischung einen Beitrag zur Aufspaltung der Niveaus. In vielen Fällen und besonders bei hohem Spin ergab sich für den OPEP P_i als negativ, was einen falschen Beitrag zur gewünschten Spin-Bahn-Aufspaltung bewirkt. Die Terme mit Q_{ik} ergaben sich durchweg als positiv, haben also die Tendenz, bei wachsender Paritätsmischung den Einfluß von negativen P_i zu kompensieren. Die Terme $A_{ik}^{1,2}$ liefern dann die gewünschte LS-Aufspaltung. Negative P_i begünstigen die Paritätsmischung, wogegen die Q_{ik} sie hemmen. Zusammen stellen die Terme einen stabilisierenden Effekt dar, der allerdings in unserer Näherung „ $n=n$ “ nicht besonders wirksam ist.

Lösungen des Systems (44) bzw. (45) können wieder wie bei (31) bzw. (32) durch Iteration gefunden werden. Man setzt einen Satz Werte in die rechte Seite der Gleichung ein, löst nach x_i bzw. y_i auf, setzt den neuen Satz wieder rechts ein, usw. Besonderheiten von (44), (45) gegenüber (31), (32) haben sich nicht gezeigt.

IV. Die Durchführung der numerischen Rechnung am Beispiel von ^{28}Si

a) *Das phänomenologische spinunabhängige Potential und die Berechnung seiner Eigenfunktionen*

Nach Kapitel III benutzen wir für unsere Rechnung ein festes spinunabhängiges Potential. Ein solches Potential bekommen wir durch die phänomenologische Anpassung von BEINER^{10*}. Das Potential von BEINER beschreibt die Separationsenergien, Reihenfolge der Spins von Einteilchenzuständen in der Nähe des Grundniveaus und die Ladungsverteilung der Kerne nach Anpassung von 5 Parametern im ganzen periodischen System. Das Potential hat die folgende Gestalt:

$$V = V_K + V_{LS} + V_c. \quad (52)$$

Dabei ist

$$V_K = - \frac{U_0}{1 + e^{\frac{r-r_0}{v}}}. \quad (53)$$

* Wir benutzen die Tatsache, daß das phänomenologische spinunabhängige Potential sich kaum ändern würde, wenn man die Anpassung statt mit LS-Term mit Paritätsmischung gemacht hätte. Auch die Einteilchenfunktionen hängen nicht empfindlich von diesem Potential ab.

Das Coulombpotential V_c wurde als statische Näherung aus einer Wood-Saxon-Verteilung der Ladung berechnet und wirkt nur auf Protonen. Weiterhin ist

$$U_0 = \left(56 \pm 30 \frac{N-Z}{A} \right) \text{ MeV}$$

(„+“ für Protonen und „-“ für Neutronen)

$$r_0 = 1,20 A^{1/3} \text{ fm} \quad (54)$$

und

$$v = 0,6 \text{ fm} \text{ für alle Kerne}^*$$

Für das Spin-Bahn-Potential wurde die folgende Form angenommen:

$$V_{LS} = -0,8 \frac{1}{r} \frac{dV_K}{dr} (LS) \text{ [MeV]}, \quad r \text{ in fm.} \quad (55)$$

Für unsere Rechnung haben wir den Spin-Bahn-Term weggelassen. Wir berechneten die Eigenfunktionen des Operators $H^0 = T + V$ mit der Methode des IBM-Programms SCHR auf der IBM 7090, bzw. IBM 7040.

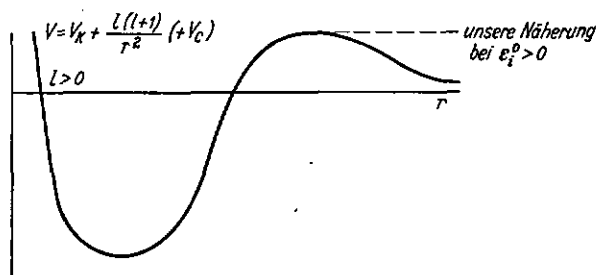


Fig. 1. Näherung für positive Einteilchenenergien

Die benötigten Zustände des Kontinuums haben wir dadurch behandeln können, daß wir durch Abänderung des radialen Potentials mit Zentrifugalterm nach dem Schema der Fig. 1 diskrete Zustände bekommen haben (s. ⁶). Mit dieser Methode konnten alle benötigten Fälle erfaßt werden. Der durch diese Näherung verursachte Fehler darf als sehr klein angenommen werden.

b) Der Gang der Rechnung

Um die numerischen Resultate anschaulicher zu machen, geben wir eine Reihe von numerischen Zwischenergebnissen für das Beispiel von

* Dieser Wert entspricht einer älteren Anpassung, der bessere Wert $v = 0,7 \text{ fm}$ ändert die Ergebnisse nur unwesentlich (M. BEINER, private Mitteilung).

^{28}Si an. Dieser Kern hat 14 Protonen und 14 Neutronen, die jeweils die unteren vier Schalen $1s_{\frac{1}{2}}$, $1p_{\frac{3}{2}}$, $1p_{\frac{1}{2}}$ und $1d_{\frac{5}{2}}$ füllen sollen. In unserer Näherung kompensiert sich der Beitrag der Niveaus $1s_{\frac{1}{2}}$ und $1p_{\frac{1}{2}}$, so daß wir für Protonen und Neutronen jeweils die zwei Niveaus $1p_{\frac{3}{2}}$ und $1d_{\frac{5}{2}}$ zu betrachten haben. Wir unterscheiden nun $t_i = 1$ von $t_i = -1$ durch ein den anderen Quantenzahlen nachgestelltes P bzw. N . Wir erhalten für die direkten Matrixelemente von $A_{ik}^{1,2}$ für den Fall reeller ξ_i und der realistischen Kopplungskonstanten $f=1,0$:

$$-\sum_{m_k} (A_{ik}^1 + A_{ik}^2), \text{ direkter Anteil [MeV]}$$

$i \backslash k$	$1 p_{\frac{3}{2}} P$	$1 d_{\frac{5}{2}} P$	$1 p_{\frac{3}{2}} N$	$1 d_{\frac{5}{2}} N$
$1 p_{\frac{3}{2}} P$	3,19	2,65	-3,34	-3,03
$1 d_{\frac{5}{2}} P$	1,77	2,05	-1,80	-2,27
$1 p_{\frac{3}{2}} N$	-3,34	-2,69	2,51	3,09
$1 d_{\frac{5}{2}} N$	-2,02	-2,27	2,06	2,49

(56)

Nehmen wir den Austausch hinzu, erhalten wir

$$-\sum_{m_k} (A_{ik}^1 + A_{ik}^2), \text{ Gesamtbeitrag [MeV]}$$

$i \backslash k$	$1 p_{\frac{3}{2}} P$	$1 d_{\frac{5}{2}} P$	$1 p_{\frac{3}{2}} N$	$1 d_{\frac{5}{2}} N$
$1 p_{\frac{3}{2}} P$	3,31	3,55	-3,09	-1,09
$1 d_{\frac{5}{2}} P$	2,37	2,88	-0,59	-0,54
$1 p_{\frac{3}{2}} N$	-3,09	-0,88	3,65	4,07
$1 d_{\frac{5}{2}} N$	-0,73	-0,54	2,71	3,39

(57)

Für die Rechnung brauchen wir weiterhin die Energiedifferenzen

$$\begin{aligned} \epsilon_{1dP}^0 - \epsilon_{1pP}^0 &= 13,45 \text{ MeV}, & \epsilon_{1dN}^0 - \epsilon_{1pN}^0 &= 14,00 \text{ MeV}, \\ \epsilon_{1fP}^0 - \epsilon_{1dP}^0 &= 13,00 \text{ MeV}, & \epsilon_{1fN}^0 - \epsilon_{1dN}^0 &= 13,74 \text{ MeV}, \end{aligned} \quad (58)$$

den Vektor

$$P_i \text{ [MeV]}$$

i	$1 p_{\frac{3}{2}} P$	$1 d_{\frac{5}{2}} P$	$1 p_{\frac{3}{2}} N$	$1 d_{\frac{5}{2}} N$
	-3,88	-2,92	-4,16	-3,57

(59)

und die Matrix

$$\sum_{m_k} Q_{ik} \text{ [MeV]}$$

$i \backslash k$	$1 p_{\frac{3}{2}} P$	$1 d_{\frac{5}{2}} P$	$1 p_{\frac{3}{2}} N$	$1 d_{\frac{5}{2}} N$
$1 p_{\frac{3}{2}} P$	3,73	4,46	7,75	9,68
$1 d_{\frac{5}{2}} P$	2,97	4,18	6,10	9,00
$1 p_{\frac{3}{2}} N$	7,75	9,15	4,03	4,97
$1 d_{\frac{5}{2}} N$	6,45	9,00	3,31	4,85

(60)

Mit den Werten (57)–(60) gehen wir in (44) ein und finden, daß nur die triviale Lösung $\xi_i=0$ existiert. Wir müssen die paritätsmischende Wechselwirkung künstlich erhöhen, d.h. die Matrix (57) mit einem Faktor $\approx 2,3$ multiplizieren, um die gewünschte LS-Aufspaltung zu bekommen. Das ist nicht von vornherein unvernünftig, weil 1. die Näherung „ $n=n$ “ ziemlich schlecht ist und eine Verbesserung der Näherung den Effekt wesentlich vergrößern kann. 2. Andere Teile der Wechselwirkung außer dem OPEP zur Paritätsmischung beitragen. Für schwere Kerne muß man allerdings die Matrixelemente noch mehr – bis um einen Faktor 4–5 – vergrößern. Damit wird die Existenz einer großen Paritätsmischung mit reellen Phasen sehr unwahrscheinlich.

Darüber hinaus haben AMIET und HUGUENIN durch Untersuchung der experimentellen β -Übergangswahrscheinlichkeiten im Hinblick auf die Paritätsmischung gefunden, daß die Phasen der Beimischung für analoge Protonen- und Neutronenfunktionen gleich sein sollten. Für reelle Parameter finden wir aber für leichte Kerne (z.B. mit Hilfe von (57) für ^{28}Si), daß die relativen Phasen von Protonen- und Neutronenbeimischung entgegengesetzt sind.

Das Bild ändert sich jedoch völlig, wenn wir den Fall der imaginären Parameter betrachten. In diesem Falle ist schon die nicht auf die Parität projizierte Produktfunktion zeitumkehrinvariant. Wir müssen jetzt die Matrix $\sum_{m_k} (A_{ik}^1 - A_{ik}^2)$ betrachten, für die nur langreichweitige Kräfte durch den Austausch beitragen. Wir finden

$$-\sum_{m_k} (A_{ik}^1 - A_{ik}^2) [\text{MeV}]$$

$i \backslash k$	$1 p \frac{3}{2} P$	$1 d \frac{5}{2} P$	$1 p \frac{3}{2} N$	$1 d \frac{5}{2} N$
$1 p \frac{3}{2} P$	4,43	4,06	9,20	8,89
$1 d \frac{5}{2} P$	2,71	3,95	5,49	8,44
$1 p \frac{3}{2} N$	9,20	8,23	4,78	4,52
$1 d \frac{5}{2} N$	5,93	8,44	3,01	4,52

(61)

Mit den Werten von (61), (58), (59), (60) lösen wir das System (45). Außer der trivialen Lösung finden wir nun eine Lösung mit $y_i \neq 0$:

$$y_{1p \frac{3}{2} P} = 0,525, \quad y_{1d \frac{5}{2} P} = 0,449, \quad y_{1p \frac{3}{2} N} = 0,520, \quad y_{1d \frac{5}{2} N} = 0,460. \quad (62)$$

Die Lösung (62) ist um 25,9 MeV energetisch günstiger als die Lösung ohne Paritätsmischung, wie man aus (42) erhalten kann. Die relativen Phasen der Beimischung für Protonen und Neutronen sind nun gleich. Weitere Ergebnisse erscheinen im nächsten Kapitel.

Die Frage nach der Eindeutigkeit der Lösungen ist nicht leicht zu beantworten. Es scheint aber so, daß für das System (45) mit imaginären

ξ_i , die Lösung im wesentlichen (d. h. bis auf ein gemeinsames Vorzeichen und die triviale Lösung) eindeutig ist. Das hängt offenbar mit der relativ einfachen Struktur von (61) zusammen, nämlich daß alle Matrixelemente positiv sind. Auch für schwere Kerne bleibt diese Eigenschaft erhalten. Für eine solche Matrix scheint es vernünftig zu sein, als vereinfachtes Modell alle Matrixelemente gleichzusetzen, was sich für spezielle Strukturuntersuchungen empfiehlt (s. z. B. Ref.⁹). Dagegen wird die Matrix (57) für schwerere Kerne ziemlich kompliziert, so daß man nach proportionaler Vergrößerung der Matrixelemente tatsächlich mehrere verschiedene Lösungen finden kann.

V. Darstellung der Ergebnisse im ganzen periodischen System der Kerne

Wir berichten hier nur über den Fall der imaginären Mischungsparameter ξ_i . Der reelle Fall ist im ganzen periodischen System ungünstiger (am ungünstigsten für schwere Kerne), so daß er nicht weiter interessant ist. Wir haben Rechnungen durchgeführt für die Grundzustände von 13 g - g -Kernen, für die wir mit mehr oder weniger Berechtigung annehmen konnten, daß sie nur vollständig besetzte j -Schalen besitzen. (In diesem Fall wird das Problem kugelsymmetrisch, wie wir es vorher für unsere Rechnung verlangt haben. Selbstverständlich ist das bei nicht magischer Besetzung wegen der restlichen Wechselwirkung eine Näherung.) Es wird nur über Variationsrechnungen nach Kapitel III b) berichtet.

Die Tabelle enthält eine Zusammenfassung von numerischen Ergebnissen. In Spalten 1–3 sind die Daten des untersuchten Kerns enthalten. Ein gutes Maß für die Wirksamkeit der Paritätsmischung ist der im Rahmen eines Ritzprinzips durch Einführung der Paritätsmischung erhaltene Energiegewinn gegenüber der alten HF-Lösung (Spalte 4). Er berechnet sich aus Gl. (42) mit (63)

$$\Delta E = E^0 - E. \quad (63)$$

Wir finden, daß die Paritätsmischung nur eine Korrektur zur bisher erhaltenen Bindungsenergie beiträgt. Der größte Beitrag pro Teilchen ist 1,0 MeV bei ^{32}S , das sind 12% der Gesamtbindungsenergie. Bei ^4He , ^{16}O und ^{40}Ca finden wir keine Paritätsmischung, dagegen ist sie beispielsweise bei dem doppelt magischen Kern ^{208}Pb groß.

Spalte 5 enthält eine Auswahl von Niveaus mit $n=1$ in der Nähe der Fermigrenze, die für die betreffenden Kerne Quellniveaus sind, die also bei der Rechnung berücksichtigt wurden. „ $n=1$ “ wurde deshalb genommen, weil wir nicht glauben, daß die erhaltenen Werte bei höheren n im Hinblick auf unsere Näherung „ $n=n$ “ sinnvoll sind.

Spalte 6 enthält die mit $f=1$ berechneten Mischungsparameter y_i für die erwähnten Niveaus i . Mit diesen y_i erhält man Einteilchenwellenfunktionen

$$\chi_i = \frac{1}{\sqrt{1+y_i^2}} (\varphi_i + i y_i \varphi_i), \quad (64)$$

wobei φ_i Eigenfunktion von L^2 , J^2 , J_z und τ_3 ist mit den dazugehörigen Quantenzahlen l_i , j_i , m_i , t_i und der Hauptquantenzahl n_i . φ_i hat als Bahndrehimpulsquantenzahl $\bar{l}_i = 2j_i - l_i = l_i \pm 1$. Es ist wichtig, daß bei unserer Phasenwahl bei Anwendung des Zeitumkehroperators T auf φ_i gilt

$$T \varphi_{n_i l_i j_i m_i t_i} = (-1)^{l_i + j_i - m_i} \varphi_{n_i l_i j_i - m_i t_i}. \quad (65)$$

Mit der Funktion (64) ist die Produktfunktion bei abgeschlossenen j -Schalen zeitumkehrinvariant.

Unsere Ergebnisse können in vielen Punkten nicht über das Schalenmodell hinausgehen, da wir keine Korrelationen (außer dem Austausch für den OPEP) berücksichtigt haben, im Grunde ist unsere Behandlung ein Modell unabhängiger Teilchen. So halten wir uns bei dem Vergleich mit experimentellen Werten ganz an das Schalenmodell und die phänomenologische Anpassung von BEINER.

Wir können der Einteilchenfunktion (64) magnetische Momente zuordnen (Spalte 7) vermöge

$$\mu_{PM} = \frac{1}{1+y_i^2} \mu_{\text{Schm}}(i) + \frac{y_i^2}{1+y_i^2} \mu_{\text{Schm}}(\bar{i}), \quad (66)$$

wobei μ_{Schm} die Schmidtwerte darstellt.

Spalte 8 gibt, wenn möglich, einen ungeraden Vergleichskern an, der sich in der Nähe des berechneten Kerns befindet und dessen Zustand man dem betrachteten Einteilchenzustand zuordnen kann. Dabei wird angenommen, daß sich die y_i von Kern zu Kern nicht viel ändern. Spalte 8 enthält das experimentelle magnetische Moment dieses Kerns, Spalte 9 den dazugehörigen Schmidtwert.

Die Fig. 2–4 zeigen berechnete Einteilchenenergieniveaus verglichen mit den entsprechenden Niveaus des Einteilchenpotential von BEINER mit LS-Term. a) gibt die Eigenwerte zu diesem Potential ohne LS-Term an. Nehmen wir nun den OPEP (d.h. seinen Beitrag zur Aufspaltung durch den Austausch) dazu, bekommen wir eine Aufspaltung der Niveaus, die in den meisten Fällen, besonders bei hohen j , die falsche Richtung hat. Erst wenn wir die Paritätsmischung einschalten, bekommen wir eine vernünftige Aufspaltung (c). d) zeigt im Vergleich dazu

die Niveaus mit der Spin-Bahn-Aufspaltung des Schalenmodells. (Kurze Striche sind hier Niveaus, die wir nicht mit Paritätsmischung berechnet haben.) Die gestrichelte Linie in der Mitte gibt die Fermigrenze an, die bei uns diskontinuierlich ist.

Es ist interessant, daß im Fall von ^{40}Ca , bei dem die Paritätsmischung verschwindet, der OPEP schon in diesem Fall eine Aufspaltung in der richtigen Richtung ergibt. Dasselbe Verhalten zeigt sich bei ^4He und ^{16}O . Diese Kerne sind also zum Beweis der Nichtexistenz der großen Paritätsmischung ungeeignet. Das exakte Verschwinden der Paritätsmischung für diese drei Beispiele kommt natürlich nur bei Variation der

Tabelle

Z	N	A	ΔE [MeV]	i	γ_i	μ_{PM} [nm]	Ver- gleichs- Kern	μ_{exp} [nm]	μ_{Schm} [nm]	
1.	2	2	^4He	0	$\left\{ \begin{array}{l} 1s \frac{1}{2} N \\ 1s \frac{1}{2} P \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 0,00 \\ 0,00 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,91 \\ 2,79 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} {}^3\text{He}_1 \\ {}^3\text{H}_2 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -2,13 \\ 2,98 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,91 \\ 2,79 \end{array} \right.$
2.	6	6	^{12}C	8,6	$\left\{ \begin{array}{l} 1p \frac{3}{2} N \\ 1p \frac{3}{2} P \\ 1p \frac{1}{2} N \\ 1p \frac{1}{2} P \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 0,37 \\ 0,36 \\ 0,50 \\ 0,50 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,54 \\ 3,37 \\ 0,13 \\ 0,35 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} {}^9\text{Be}_5 \\ {}^{11}_5\text{B}_6 \\ {}^{13}_6\text{C}_7 \\ {}^{13}_7\text{N}_6 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,18 \\ 2,69 \\ 0,70 \\ (-)0,32 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,91 \\ 3,79 \\ 0,64 \\ -0,26 \end{array} \right.$
3.	8	8	^{16}O	0						
4.	14	14	^{28}Si	25,9	$\left\{ \begin{array}{l} 1d \frac{5}{2} N \\ 1d \frac{5}{2} P \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 0,46 \\ 0,45 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,34 \\ 4,13 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} {}^{25}_{12}\text{Mg}_{13} \\ {}^{27}_{13}\text{Al}_{14} \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -0,86 \\ 3,64 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,91 \\ 4,79 \end{array} \right.$
5.	14	16	^{30}Si	29,4						
6.	16	16	^{32}S	32,0	$1d \frac{3}{2} N$	0,54	0,46	${}^{33}_{16}\text{S}_{17}$	0,64	1,15
7.	16	20	^{36}S	4,4	$1d \frac{3}{2} P$	0,32	0,46	${}^{37}_{17}\text{Cl}_{20}$	0,68	0,12
8.	20	20	^{40}Ca	0						
9.	20	28	^{48}Ca	5,6	$1f \frac{7}{2} N$	0,26	-1,70	${}^{48}_{22}\text{Ti}_{27}$	-1,10	-1,91
10.	28	28	^{56}Ni	45,5	$\left\{ \begin{array}{l} 1f \frac{7}{2} P \\ 1f \frac{5}{2} N \\ 1f \frac{5}{2} P \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 0,49 \\ 0,54 \\ 0,54 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 5,00 \\ 0,63 \\ 1,76 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} {}^{57}_{27}\text{Co}_{30} \\ {}^{65}_{30}\text{Zn}_{35} \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 4,65 \\ 0,77 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 5,79 \\ 1,37 \\ 0,86 \end{array} \right.$
11.	38	50	^{88}Sr	12,9	$\left\{ \begin{array}{l} 1g \frac{9}{2} N \\ 1g \frac{7}{2} N \\ 1g \frac{7}{2} P \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 0,33 \\ 0,36 \\ 0,45 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,58 \\ 1,09 \\ 2,41 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} {}^{87}_{38}\text{Sr}_{49} \\ {}^{115}_{49}\text{In}_{66} \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,09 \\ 5,53 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,91 \\ 6,79 \end{array} \right.$
12.	58	82	^{140}Ce	10,2	$\left\{ \begin{array}{l} 1h \frac{11}{2} N \\ 1h \frac{9}{2} N \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 0,30 \\ 0,33 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,62 \\ 1,22 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} {}^{137}_{58}\text{Ce}_{79}^* \\ {}^{137}_{58}\text{Ce}_{79}^* \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -0,96 \\ 1,57 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,91 \\ 1,57 \end{array} \right.$
13.	82	126	^{208}Pb	59,1	$\left\{ \begin{array}{l} 1h \frac{11}{2} P \\ 1i \frac{13}{2} N \\ 1h \frac{9}{2} P \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 0,54 \\ 0,48 \\ 0,55 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 6,85 \\ -1,25 \\ 3,58 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} {}^{197}_{80}\text{Hg}_{117}^* \\ {}^{209}_{83}\text{Bi}_{126} \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,03 \\ 4,08 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1,91 \\ 2,62 \end{array} \right.$

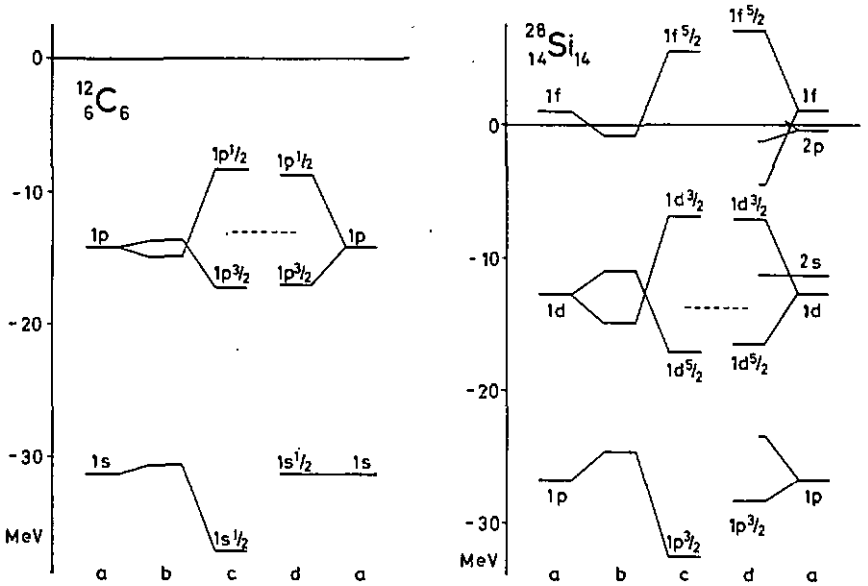


Fig. 2

Figs. 2—4. Einteilchenenergieniveaus. a Mit phänomenologischem Einteilchenpotential ohne LS-Term; b bei Hinzunahme der Aufspaltung durch den OPEP ohne Paritätsmischung; c Aufspaltung durch OPEP mit Paritätsmischung; d Aufspaltung durch phänomenologischen LS-Term (kurze Striche sind Niveaus, die rechnerisch nicht behandelt wurden). Die gestrichelte Linie bezeichnet die Fermigrenze

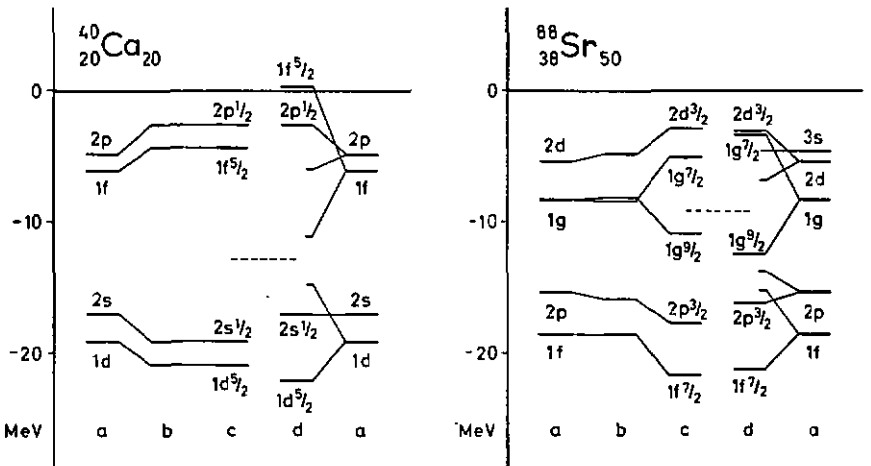


Fig. 3

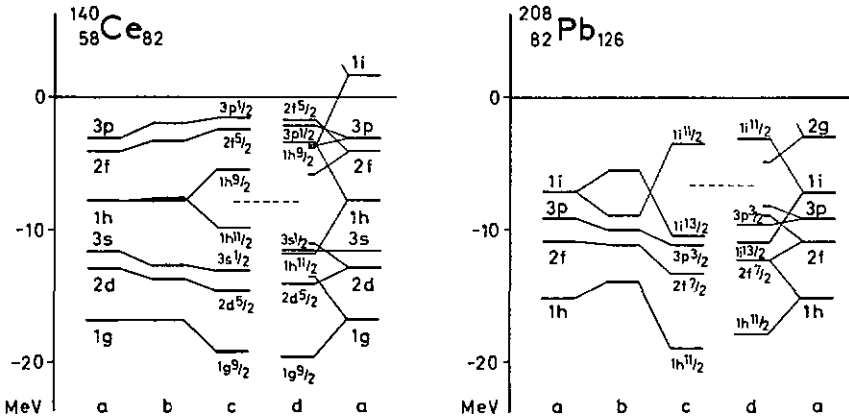


Fig. 4

Produktfunktion. Wenn man die projizierten Funktionen variiert, wird man eine von null verschiedene, sicher aber kleine (Kapitel IIb), Paritätsmischung finden.

In Fig. 5 haben wir magnetische Momente für Kerne in der Nähe von ^{40}Ca dargestellt. Die Kreise bedeuten experimentelle, die Kreuze berechnete Werte. Sie wurden aufgetragen gegen Z bei dem Protonenniveau, gegen N bei den beiden Neutronenniveaus. Die kleinen Zahlen

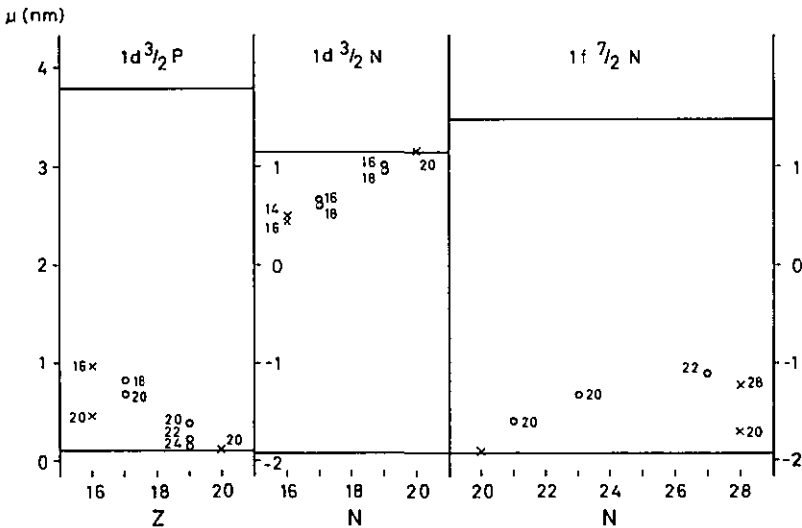


Fig. 5. Magnetische Momente für Kerne in der Nähe von ^{40}Ca . Kreise bedeuten experimentelle, Kreuze berechnete Werte. Aufgetragen gegen Z (bzw. N). Die kleinen Zahlen neben den Punkten bedeuten dann N (bzw. Z). Die horizontalen Linien sind die Schmidtwerte

neben den Punkten bedeuten dann N bzw. Z . Die horizontalen Linien oben und unten bedeuten die Schmidtwerte. Wir sehen, daß der Gang der theoretischen Werte mit Z und N sehr gut mit dem der experimentellen Werte übereinstimmt, was die Paritätsmischungstheorie unterstützt. Insbesondere weist das Experiment darauf hin, daß die Paritätsmischung für ^{40}Ca wirklich sehr klein ist. Ebenso sind die magnetischen Momente von Kernen in der Nähe von ^4He und ^{16}O nicht weit von den Schmidtwerten.

VI. Zusammenfassung

Die Annahme von reellen Mischungsparametern (in den von uns gewählten Phasen), wie sie die direkten Terme liefern würden, führt wahrscheinlich nicht zu einer merklichen Paritätsmischung. Für imaginäre Mischungsparameter machen dagegen unsere Ergebnisse eine große Paritätsmischung sehr wahrscheinlich. In diesem Fall wird die Mischung bei lokalen Kräften vom Austausch allein geliefert, und langreichweitige Kräfte liefern den Hauptanteil. Damit scheint unsere Annahme, daß nur der OPEP selbstkonsistent behandelt wird und alle anderen Kräfte durch ein phänomenologisches Einkörperpotential ohne LS-Term simuliert werden, eine annehmbare Näherung zu sein.

Im Rahmen eines Variationsverfahrens bestimmten wir für leichte und schwere Kerne die Amplituden der Mischung von Einteilchenzuständen mit derselben Hauptquantenzahl $n' = n$ (ebenso $j' = j$, $m' = m$, $l' = l$), aber verschiedener Parität ($l' = l = 2j - l \pm 1$).

Die ausschließliche Zulassung der Beimischung mit $n' = n$ in der gewählten Basis ist sicher keine gute Näherung. Sie genügt aber, um wesentliche Folgerungen zu ziehen, da eine größere Freiheit der Mischung die Paritätsmischung lediglich vergrößern kann.

Wir finden bei der realistischen Kopplungskonstanten des OPEP $f = 1$ eine Aufspaltung der Energieniveaus, die qualitativ und quantitativ der LS-Aufspaltung des Schalenmodells gut entspricht. Die Abweichung der magnetischen Momente von den Schmidtwerten wird nur teilweise quantitativ geliefert. Wir glauben, daß eine Verbesserung der Näherung „ $n = n'$ “ auch diese Werte zum Teil beträchtlich verbessern könnte. Im Gegensatz zum reellen Fall finden wir durchweg näherungsweise gleiche Ortspinfunktionen für analoge Protonen und Neutronen. Für die Kerne ^4He , ^{16}O , ^{40}Ca fanden wir als Ausnahme keine Paritätsmischung. Für diese Kerne würde man nur dann eine kleine bzw. sehr kleine Mischung finden, wenn die auf definite Parität projizierte Produktfunktion variiert wird. Von diesen Ausnahmen (und vermutlich benachbarten Kernen) abgesehen glauben wir, daß der Effekt im ganzen periodischen System kontinuierlich verläuft und überall die Paritäts-

mischung groß ist. Dann ist auch die nicht projizierte Produktfunktion eine sehr gute Näherung, um Matrixelemente von Einteilchen- und Zweiteilchenoperatoren zu bestimmen.

Ich möchte meinen Dank ausdrücken Herrn Prof. BLEULER, weil ich diese Arbeit seiner Initiative verdanke, und Herrn Prof. HUGUENIN, der mir die Möglichkeit gegeben hat, sie zu einem erfolgreichen Abschluß zu bringen.

Dem IIM Bonn und der École Polytechnique Lausanne sei gedankt für die Erlaubnis zur Benutzung ihrer Rechenmaschinen.

Anhang A. Definitionen und Hilfsrelationen für die Behandlung der Matrixelemente

a) Einpion austauschkraft und Multipolentwicklung

Die Mehrzahl der vorkommenden Relationen steht in den gängigen Büchern für Quantenmechanik und Kernstruktur (z.B. DE SHALIT-TALMI und DAWYDOW) oder lassen sich leicht herleiten.

Wir haben für die Einpion austauschkraft (OPEP):

$$\begin{aligned} W(\mathbf{x}-\mathbf{x}') &= \frac{1}{4\pi} f^2 \mu \frac{1}{3} (\boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\tau}') \left[(\boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\sigma}') + S_{12} \left(1 + \frac{3}{y} + \frac{3}{y^2} \right) \right] \frac{e^{-y}}{y} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{f^2}{\mu^2} (\boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\tau}') (\boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{V}) (\boldsymbol{\sigma}' \boldsymbol{V}') \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

mit

$$S_{12} = \frac{3(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}-\mathbf{x}'))(\boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{x}-\mathbf{x}'))}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2} - (\boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\sigma}')$$

und

$$y = \mu |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|.$$

Dabei ist $\mu = 0,7067 \text{ fm}^{-1}$ die Masse des π -Mesons in natürlichen Einheiten ($c = \hbar = 1$). f ist die rationalisierte Kopplungskonstante der Pion-Nukleon-Wechselwirkung. Dem Wert

$$g^2 = \frac{f^2}{4\pi} = 0,08$$

entspricht $f = 1,0$.

Wir führen eine Multipolentwicklung durch:

$$\begin{aligned} \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} &= \sum_L w_L(r, r') P_L(\cos \omega) \\ &= \sum_L \frac{4\pi}{2L+1} w_L(r, r') \sum_M Y_{LM}^*(\Omega) Y_{LM}(\Omega'). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Nach WATSON¹², S. 366, ist

$$w_L(r, r') = \begin{cases} \frac{2L+1}{\sqrt{rr'}} I_{L+\frac{1}{2}}(\mu r) K_{L+\frac{1}{2}}(\mu r') & \text{für } r \leq r' \\ \frac{2L+1}{\sqrt{rr'}} I_{L+\frac{1}{2}}(\mu r') K_{L+\frac{1}{2}}(\mu r) & \text{für } r' \leq r. \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Wir definieren die Funktionen i_L und k_L durch

$$i_L(r) = \frac{1}{\sqrt{r}} I_{L+\frac{1}{2}}(\mu r) \quad \text{und} \quad k_L(r) = \frac{1}{\sqrt{r}} K_{L+\frac{1}{2}}(\mu r) \quad (\text{A.4})$$

und erhalten

$$w_L(r, r') = \begin{cases} (2L+1) i_L(r) k_L(r') & \text{für } r \leq r' \\ (2L+1) i_L(r') k_L(r) & \text{für } r' \leq r. \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Man erhält explizit (s. WATSON¹², S. 80)*

$$\begin{aligned} i_L(r) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\mu}} \frac{1}{r} \left[e^{\mu r} \sum_{j=0}^L \frac{(-1)^j (L+j)!}{j! (L-j)! (2\mu r)^j} + \right. \\ &\quad \left. + (-1)^{L+1} e^{-\mu r} \sum_{j=0}^L \frac{(L+j)!}{j! (L-j)! (2\mu r)^j} \right] \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi\mu}} \frac{1}{r} 2^L \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(L+j)!}{(2L+2j+1)! j!} (\mu r)^{L+2j+1} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

und

$$k_L(r) = \sqrt{\frac{\pi}{2\mu}} \frac{1}{r} e^{-\mu r} \sum_{j=0}^L \frac{(L+j)!}{j! (L-j)! (2\mu r)^j}. \quad (\text{A.7})$$

Weiterhin haben wir

$$(\sigma \nabla) = \sigma \frac{\partial}{\partial r} - 2 \frac{\sigma}{r} (LS) = \sigma \left\{ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} (J^2 - L^2 - S^2) \right\} \quad (\text{A.8})$$

mit

$$\sigma = \frac{(\sigma x)}{r}.$$

b) Winkelfunktionen und Spin

Wir benützen Spin-Winkelfunktionen Φ_{ljm} , definiert durch

$$\Phi_{ljm}(\vartheta, \varphi) = \sum_{s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{2} s \mid l m - s \mid j m \right) Y_{l m - s}(\vartheta, \varphi) \chi_s. \quad (\text{A.9})$$

* Der zweite Ausdruck für $i_L(r)$ ist für höhere L erheblich günstiger für die numerische Rechnung.

¹² WATSON, G. N.: A treatise on the theory of Bessel functions. Cambridge: University Press 1958.

Die Y_{lm} sind die Kugelfunktionen von CONDON und SHORTLEY und die χ_s Spinfunktionen. In der zweikomponentigen Schreibweise für den Spin haben wir

$$\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

Es gilt

$$L^2 \Phi_{ljm} = l(l+1) \Phi_{ljm}, \quad J^2 \Phi_{ljm} = j(j+1) \Phi_{ljm}, \quad J_z \Phi_{ljm} = m \Phi_{ljm}. \quad (\text{A.11})$$

Weiterhin gilt

$$\oint \Phi_{ljm}^*(\Omega) \Phi_{l'j'm'}(\Omega) d\Omega = \delta_{l'l'} \delta_{j'j'} \delta_{m'm'}$$

und

$$T \Phi_{ljm} = (-1)^{j+l-m} \Phi_{lj-m}. \quad (\text{A.12})$$

Wir definieren die Projektion von σ auf x

$$\sigma = \frac{(\sigma \mathbf{x})}{r} = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & e^{-i\varphi} \sin \vartheta \\ e^{i\varphi} \sin \vartheta & -\cos \vartheta \end{pmatrix}. \quad (\text{A.13})$$

Für σ gilt

$$\sigma \sigma = 1, \quad (\sigma \sigma \sigma) = -\sigma, \quad (\text{A.14})$$

$$\Pi \sigma + \sigma \Pi = 0, \quad (\text{A.15})$$

$$\sigma \Phi_{ljm} = \Phi_{\bar{l}jm} \quad (\text{A.16})$$

mit $\bar{l} = 2j - l = l \pm 1$.

Für die Φ_{ljm} haben wir folgende Ausdrücke hergeleitet, die für abgeschlossene Schalen wichtig sind [die Ausdrücke (A.17) bis (A.22) gelten für gleiche Argumente von Φ und Φ^*]:

$$\sum_{m=-j}^j \Phi_{ljm}^* \Phi_{ljm} = \frac{j+\frac{1}{2}}{2\pi}, \quad (\text{A.17})$$

$$\sum_{m=-j}^j \Phi_{ljm}^* \Phi_{l'jm} = 0. \quad (\text{A.18})$$

In Produktausdrücken von Φ wie die obigen, die gleiche Argumente Ω enthalten, soll i. a. Spinsummutation verstanden werden. Wenn keine Spinsummutation angenommen werden soll, schreiben wir ein Zeichen \wedge . Die folgenden Ausdrücke brauchen wir für die einfache Berechnung von Austausch-Delta-Matrixelementen:

$$\sum_{m=-j}^j \Phi_{ljm} \wedge \Phi_{ljm}^* = \frac{j+\frac{1}{2}}{4\pi} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

und

$$\sum_{m=-j}^j \Phi_{ljm} \wedge \Phi_{l'jm}^* = \frac{j+\frac{1}{2}}{4\pi} \sigma. \quad (\text{A.20})$$

Weiterhin haben wir

$$\sum_{m=-j}^j \Phi_{ljm}^* \sigma \Phi_{ljm} = 0 \quad (\text{A.21})$$

und

$$\sum_{m=-j}^j \Phi_{ljm}^* \sigma \Phi_{l'jm} = \frac{x}{r} \frac{j+\frac{1}{2}}{2\pi}. \quad (\text{A.22})$$

Wir erhalten für das Matrixelement der Kugelfunktionen

$$\int \Phi_{l' j' m'}^*(\Omega) Y_{LM}(\Omega) \Phi_{l j m}(\Omega) d\Omega \\ = (-1)^{j-m'} \sqrt{\frac{(2j'+1)(2L+1)(2j+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} j' & L & j \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j' & L & j \\ -m' & M & m \end{pmatrix} \quad (\text{A.23})$$

für $l+l'+L$ gerade, sonst $=0$.

Wir benutzen die folgenden Relationen für die Wignerkoeffizienten

$$\sum_m (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & L & j \\ -m & M & m \end{pmatrix} = \sqrt{2j+1} \delta_{L0} \delta_{M0}, \quad (\text{A.24})$$

$$\sum_{M, m_1} \begin{pmatrix} j_2 & L & j_1 \\ -m_2 & M & m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & L & j_1 \\ -m_3 & M & m_1 \end{pmatrix} = \delta_{j_2 j_3} \delta_{m_2 m_3} \frac{1}{2j_2+1} \quad (\text{A.25})$$

und

$$\begin{pmatrix} j & 0 & j \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} = (-1)^{j-m} \frac{1}{\sqrt{2j+1}}. \quad (\text{A.26})$$

c) Isospin

Wir benutzen Isospinfunktionen θ_i . t nimmt den Wert 1 für Protonen und -1 für Neutronen an. In der zweikomponentigen Schreibweise für den Isospin haben wir

$$\theta_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \theta_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \theta_t = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+t \\ 1-t \end{pmatrix}. \quad (\text{A.27})$$

Mit diesen Funktionen ist

$$\theta_i^* \tau_\alpha \theta_{i'} = \begin{cases} \frac{1}{2} (1-tt') & \text{für } \alpha=1 \\ -\frac{i}{2} (t-t') & \text{für } \alpha=2 \\ \frac{1}{2} (t+t') & \text{für } \alpha=3, \end{cases} \quad (\text{A.28})$$

wobei τ_α die Paulimatrizen für den Isospin darstellt. Bei der HF-Methode brauchen wir für die direkten Terme

$$\sum_{\alpha=1}^3 (\theta_{t_i}^* \tau_\alpha \theta_{t_i}) (\theta_{t_k}^* \tau_\alpha \theta_{t_k}) = t_i t_k \delta_{t_i t_k}, \quad (\text{A.29})$$

und für die Austauschsterme

$$\sum_{\alpha=1}^3 (\theta_{t_i}^* \tau_\alpha \theta_{t_k}) (\theta_{t_k}^* \tau_\alpha \theta_{t_i}) = \frac{1}{2} (3-t_i t_k) \delta_{t_i t_k}. \quad (\text{A.30})$$

d) Die partielle Integration

Um die Matrixelemente des OPEP zu berechnen, benutzen wir eine Relation, die einer partiellen Integration entspricht, d. h. wir bringen durch Anwendung der Greenschen Formel die Gradienten von der Kraft auf die Wellenfunktionen. Wegen der Singularität der Kraft bei $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = 0$ sind die beim Matrixelement vorkommenden Integrale uneigentlich. Wir definieren das uneigentliche Integral wie üblich dadurch, daß wir im Integrationsgebiet eine Kugel um die Singularität mit $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| < R$, $R > 0$ ausschneiden und dann R gegen 0 gehen lassen. Es erscheint ein charakteristischer Zusatzterm, der dem Matrixelement einer δ -Kraft entspricht. Im Falle des OPEP ist sie negativ gleich der bei HULTHÉN¹³ erscheinenden δ -Kraft. Für imaginäre Parameter ξ_i hebt sich der Zusatzterm weg, genauso wie jede δ -Kraft in diesem Fall keinen Beitrag zur Paritätsmischung liefert. Vektoren schreiben wir nun in Komponentenform und benutzen die Einsteinsche Summenkonvention.

Wir beweisen die folgende Formel

$$\begin{aligned} \iint A_i(\mathbf{x}) B_k(\mathbf{x}') \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x'_k} \frac{F(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3 x' d^3 x \\ = \iint \frac{\partial A_i(\mathbf{x})}{\partial x_i} \frac{\partial B_k(\mathbf{x}')}{\partial x'_k} \frac{F(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3 x' d^3 x - \\ - \frac{4\pi}{3} F(0) \int A_i(\mathbf{x}) B_i(\mathbf{x}) d^3 x. \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Beweis. Wir betrachten zunächst Integrale über den ganzen Raum mit Ausnahme einer endlichen Kugel mit dem Radius R . Mit Hilfe von zweimaliger Anwendung der Greenschen Formel, zunächst bezüglich \mathbf{x}' , dann bezüglich \mathbf{x} erhalten wir:

$$\begin{aligned} \iint_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \geq R} A_i(\mathbf{x}) B_k(\mathbf{x}') \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x'_k} \frac{F(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3 x' d^3 x \\ = \iint_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \geq R} \frac{\partial A_i(\mathbf{x})}{\partial x_i} \frac{\partial B_k(\mathbf{x}')}{\partial x'_k} \frac{F(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3 x' d^3 x - \\ - \iint_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = R} A_i(\mathbf{x}) B_k(\mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{F(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d f'_k d^3 x + \\ + \iint_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = R} A_i(\mathbf{x}) \frac{\partial B_k}{\partial x'_k} \frac{F(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d f_i d^3 x', \quad R > 0. \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

Dabei soll die Flächennormale, die wir unten mit n_i bezeichnen, immer vom Mittelpunkt der Kugel nach außen zeigen.

Wir haben

$$\begin{aligned} \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = R} A_i(\mathbf{x}) B_k(\mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{F(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d f'_k \\ = A_i(\mathbf{x}) (F(R) - R F'(R)) \oint B_k(\mathbf{x}') n_i n_k d\Omega' \\ \xrightarrow{R \rightarrow 0} F(0) A_i(\mathbf{x}) B_k(\mathbf{x}) \oint n_i n_k d\Omega' = \frac{4\pi}{3} F(0) A_i(\mathbf{x}) B_i(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

¹³ HULTHÉN, L., and M. SUGAWARA: Encyclopedia of Physics, Bd. XXXIX, S. 19. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer 1957.

und

$$\begin{aligned} & \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|=R} A_i(\mathbf{x}) \frac{\partial B_k(\mathbf{x}')}{d\mathbf{x}'_k} \frac{F(|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|)}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} d\mathbf{f}_i \\ &= \frac{\partial B_k(\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{x}'_k} R F(R) \oint A_i(\mathbf{x}) n_i d\Omega \\ &\xrightarrow{R \rightarrow 0} \frac{\partial B_k(\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{x}'_k} R \cdot F(R) A_i(\mathbf{x}') \oint n_i d\Omega = 0. \end{aligned}$$

Durch Grenzübergang mit $R \rightarrow 0$ geht also (A.32) in (A.31) über, q.e.d.

Bei dem Beweis haben wir vorausgesetzt, daß $F(r)$ überall stetig und zweimal stetig differenzierbar ist. Weiterhin seien die Vektorfelder $A_i(\mathbf{x})$ und $B_k(\mathbf{x})$ stetig und einmal stetig differenzierbar. Diese Voraussetzungen sind bei unseren Anwendungen erfüllt.

Anhang B. Matrixelemente des OPEP

i sei eine Zusammenfassung der Quantenzahlen n_i, l_i, j_i, m_i, t_i . Weiterhin sei $\bar{i} = (n_i, \bar{l}_i, j_i, m_i, t_i)$ mit $\bar{l}_i = 2j_i - l_i = l_i \pm 1$. Die Zustände $|i\rangle$ entsprechen den Wellenfunktionen

$$\varphi_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{r} g_{n_i, l_i, t_i}(r) \Phi_{i, j_i, m_i}(\vartheta, \varphi) \theta_{t_i}, \quad (\text{B.1})$$

wobei $g_{n_i, l_i, t_i}(r) \equiv g_i(r)$ die mit $\int g_i^2(r) = 1$ normierten Radialfunktionen darstellen. (Entsprechendes wie für i gilt für k .) Zusätzlich zu den Definitionen von Anhang A führen wir ein:

$$\bar{g}_i(r) = \frac{\partial}{\partial r} g_i(r) - (j_i - l_i) (2j_i + 1) \frac{1}{r} g_i(r) \quad (\text{B.2})$$

und

$$\begin{aligned} D_{ik}(r) &= g_i(r) \bar{g}_k(r) + g_k(r) \bar{g}_i(r) \\ &= \frac{\partial}{\partial r} (g_i(r) g_k(r)) - \\ &\quad - \frac{1}{r} [(j_i - l_i) (2j_i + 1) + (j_k - l_k) (2j_k + 1)] g_i(r) g_k(r). \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Mit den Formeln von Anhang A bekommen wir für die PHF-Matrixelemente des OPEP

$$1. \sum_{m_i} \langle i, k | W | i, k' \rangle = 0, \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned} 2. \sum_{m_i} \langle i, k | W | k', i \rangle &= -\frac{f^2}{\mu^2} \frac{2j_i + 1}{4\pi} \times \\ &\times \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} t_i t_k \right) \delta_{l_k, l_k'} \delta_{j_k, j_k'} \delta_{m_k, m_k'} \delta_{t_k, t_k'} \times \\ &\times \left\{ \sum_{\substack{L \\ l_i + l_k + L \\ \text{ungerade}}} \left[\iint D_{ik'}(r) D_{ik}(r') w_L(r, r') dr' dr \begin{pmatrix} j_k & L & j_i \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 \right] - \right. \\ &\left. - \frac{1}{2} \int \frac{1}{r^2} g_i^2(r) g_k(r) g_{k'}(r) dr \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned}
 3. \quad \sum_{m_i} \langle i, k | W | \bar{i}, k' \rangle &= -\frac{f^2}{\mu^2} \frac{2j_i+1}{4\pi} t_i t_k \delta_{i_k i_{k'}} \delta_{j_k j_{k'}} \delta_{m_k m_{k'}} \delta_{i_k t_{k'}} \times \\
 &\times \left\{ \iint \frac{\partial}{\partial r} (g_i(r) g_i(r)) \frac{\partial}{\partial r'} (g_k(r') g_k(r')) w_0(r, r') dr' dr - \right. \quad (B.6) \\
 &\left. - \frac{1}{3} \int \frac{1}{r^2} g_i(r) g_i(r) g_k(r) g_k(r) dr \right\}, \\
 4. \quad \sum_{m_i} \langle i, k | W | k', \bar{i} \rangle &= -\frac{f^2}{\mu^2} \frac{2j_i+1}{4\pi} \times \\
 &\times \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} t_i t_k \right) \delta_{i_k i_{k'}} \delta_{j_k j_{k'}} \delta_{m_k m_{k'}} \delta_{i_k t_{k'}} \times \\
 &\times \left\{ \sum_{\substack{L \\ \text{gerade}}} \left[\iint D_{i_{k'}}(r) D_{i_k}(r') w_L(r, r') dr' dr \begin{pmatrix} j_k & L & j_i \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 \right] + \right. \quad (B.7) \\
 &\left. + \frac{1}{6} \int \frac{1}{r^2} g_i(r) g_i(r) g_k(r) g_k(r) dr \right\}.
 \end{aligned}$$

Im Falle der imaginären Parameter bleiben für die paritätsmischenden Matrixelemente nur Austauschterme stehen. Zugleich verschwinden die Summanden mit den einfachen Integralen, die als Matrixelement einer δ -Kraft gedeutet werden können. Wir erhalten mit der Definition (40) für die in Gl. (32) und (45) vorkommenden Ausdrücke

$$\begin{aligned}
 \sum_{m_i} (A_{ik}^1 - A_{ik}^2) &= -\sum_{m_i} (\langle i, \bar{k} | W | k, \bar{i} \rangle - \langle i, k | W | \bar{k}, \bar{i} \rangle) \\
 &= \frac{f^2}{\mu^2} \frac{2j_i+1}{4\pi} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} t_i t_k \right) \times \\
 &\times \left\{ \sum_{\substack{L \\ \text{ungerade}}} \left[\iint D_{i_k}(r) D_{i_{\bar{k}}}(r') w_L(r, r') dr' dr \begin{pmatrix} j_k & L & j_i \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 \right] - \right. \quad (B.8) \\
 &\left. - \sum_{\substack{L \\ \text{gerade}}} \left[\iint D_{i_{\bar{k}}}(r) D_{i_k}(r') w_L(r, r') dr' dr \begin{pmatrix} j_k & L & j_i \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

Die Doppelintegrale lassen sich wegen

$$w_L(r, r') = \begin{cases} (2L+1) i_L(r) k_L(r') & \text{für } r \leq r' \\ (2L+1) i_L(r') k_L(r) & \text{für } r' \leq r \end{cases}$$

auf einfache Integrale reduzieren. Es ist nämlich

$$\begin{aligned}
 &\int_0^\infty \int_0^\infty D_1(r) D_2(r') w_L(r, r') dr' dr \\
 &= \int_0^\infty D_1(r) \left[k_L(r) \int_0^r D_2(r') i_L(r') dr' + i_L(r) \int_r^\infty D_2(r') k_L(r') dr' \right] dr. \quad (B.9)
 \end{aligned}$$