

# Über die Anregung von Molekül- und Gitterschwingungen durch den Rückstoß bei Kernprozessen an chemisch gebundenen Atomen

Von HELMUT STEINWEDEL und J. HANS D. JENSEN

Aus dem Institut für theoretische Physik der Technischen Hochschule Hannover

(Z. Naturforschg. 2a, 125—132 [1947]; eingegangen am 21. Mai 1946)

*Hermann Braune zum 60. Geburtstag gewidmet*

Die Verteilungsfunktionen für die Molekül- und Gitteranregungen werden berechnet, insbesondere wird der Doppler-Effekt bei tiefen Temperaturen erörtert. Mittelwerte und Streuungen der Energieaufnahmen von Molekül und Gitter ergeben sich bei der quantentheoretischen Rechnung nur unwesentlich geändert gegenüber den Werten, die man bei der sehr einfachen klassischen Behandlung des Problems erhält. Anwendungen auf chemisch-reaktionskinetische Experimente mit radioaktiven Kernen sollen a. a. O. besprochen werden.

## § 1. Fragestellung und klassische Behandlung

Es sollen folgende Fragen erörtert werden:

1. Ein Kern mit der Masse  $m_1$  sende ein Teilchen aus ( $\gamma$ -Quant, Elektron, Neutron usw.) bzw. absorbiere ein solches Teilchen. Dabei nimmt der Kern den Impuls  $\pi$  dieses Teilchens auf und damit auch einen entsprechenden Energiebetrag, der im Falle der Absorption aus der Energie des einfallenden Teilchens bzw. aus der Bindungswärme entnommen wird; das Entsprechende gilt bei der Emission, hier wird die Rückstoßenergie aus der freiwerdenden Energie, auf Kosten der Energie des emittierten Teilchens, entnommen. Hat der Kern einen Anfangsimpuls  $\vec{p}_1$ , so ist die Energieaufnahme:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{(\vec{p}_1 + \vec{\pi})^2}{2 m_1} - \frac{p_1^2}{2 m_1} \\ &= \left( \frac{p_1}{m_1} \vec{\pi} \right) + \frac{\pi^2}{2 m_1} = D + R. \end{aligned} \quad (1)$$

Den konstanten Anteil  $R = \pi^2/2 m_1$  wollen wir die mittlere „Rückstoßenergie“ oder auch einfach Rückstoßenergie nennen, er stellt die Rückstoßenergie bei anfangs ruhendem Kern dar. Den anderen Anteil schreiben wir

$$D = \left( \frac{p_1}{m_1} \vec{\pi} \right) = (\vec{v}_1, \vec{\pi}), \quad (1a)$$

worin  $\vec{v}_1 = \vec{p}_1/m_1$  die Anfangsgeschwindigkeit des Teilchens ist.  $D$  nennen wir den Doppler-Anteil. In der Tat stellt ja bekanntlich bei der Emission eines Strahlungsquants  $\hbar \omega$ , mit dem Impuls  $\vec{\pi} = \frac{\hbar \omega}{c}$ , der Anteil  $D$  die korpuskulare Beschreibung des Doppler-Effekts dar:

$$D = \hbar \Delta \omega = \left( \vec{v}_1 \frac{\hbar \omega}{c} \right), \text{ also } \frac{D}{\hbar \omega} = \frac{\Delta \omega}{\omega} = \frac{v_{\parallel}}{c}, \quad (1b)$$

wobei  $v_{\parallel}$  die Komponente der Anfangsgeschwindigkeit in der Strahlungsrichtung bedeutet.

2. Der Kern  $m_1$  sei jetzt in einem Molekülverband chemisch gebunden. Wir fragen dann nach der Aufteilung der Energie  $\Delta E$  in Translationsenergie  $\Delta E_{\text{transl}}$  des Gesamtmoleküls und in innere Energie der Relativbewegung der Molekülbausteine gegeneinander,  $\Delta E_{\text{rel}}$ , die schließlich zur Dissoziation des Molekülverbandes führen könnte. Eine einfache klassische Überlegung, die auf der Gültigkeit des Impulssatzes basiert, liefert dann folgendes Resultat<sup>1</sup> für den Fall eines anfangs ruhenden und schwingungsfreien Moleküls: der Impuls  $\vec{\pi}$  muß schließlich vom Gesamtmolekül, dessen Gesamtmasse wir  $M$  nennen, aufgenommen werden, also wird die Translationsenergie  $\Delta E_{\text{transl}} = \vec{\pi}^2/2 M$  und demgemäß die innere Energie:

<sup>1</sup> H. Suess, Z. physik. Chem. (B) 45, 297 [1939].

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{rel}} &= \Delta E - \Delta E_{\text{transl}} = \frac{\overset{\rightarrow}{\pi}}{2m_1} - \frac{\overset{\rightarrow}{\pi}}{2M} \\ &= \frac{\overset{\rightarrow}{\pi}}{2m_1} \frac{M-m_1}{M} = \frac{M-m_1}{M} R. \end{aligned} \quad (2)$$

Wenn also, wie z. B. im HBr, der Faktor  $(M-m_1)/M$  klein gegen 1 ist, so steht für die Dissoziation nur ein kleiner Anteil der Rückstoßenergie zur Verfügung.

Entsprechend teilt sich der Doppler-Anteil auf: wir bezeichnen mit  $\overset{\rightarrow}{v}_2$ ,  $m_2$  und  $\overset{\rightarrow}{p}_2$  Anfangsgeschwindigkeit, Masse und Anfangsimpuls des Molekülrestes und führen wie üblich Schwerpunktsimpuls  $\overset{\rightarrow}{P}$  und Impuls  $\overset{\rightarrow}{p}$  der Relativbewegung ein durch die Beziehungen:

$$\begin{aligned} \overset{\rightarrow}{P} &= \overset{\rightarrow}{p}_1 + \overset{\rightarrow}{p}_2 = M \overset{\rightarrow}{V}; \\ \overset{\rightarrow}{p} &= \frac{m}{m_1} \overset{\rightarrow}{p}_1 - \frac{m}{m_2} \overset{\rightarrow}{p}_2 = m (\overset{\rightarrow}{v}_1 - \overset{\rightarrow}{v}_2) = m \overset{\rightarrow}{v}, \end{aligned} \quad (3)$$

worin  $m$  die reduzierte Masse angibt,  $m = m_1 m_2 / M$ , und  $\overset{\rightarrow}{V}$  bzw.  $\overset{\rightarrow}{v}$  Schwerpunkts- bzw. Relativgeschwindigkeit bedeuten. So ergibt sich, wenn das Teilchen 1 einen Zusatzimpuls  $\Delta \overset{\rightarrow}{p}_1 = \overset{\rightarrow}{\pi}$  bekommt:

$$\Delta \overset{\rightarrow}{P} = \overset{\rightarrow}{\pi}, \quad \Delta \overset{\rightarrow}{p} = \frac{m}{m_1} \overset{\rightarrow}{\pi}, \quad (4)$$

und für die Änderung der Energien folgt:

$$\left. \begin{aligned} \Delta E^{\text{transl}} &= \left( \frac{\overset{\rightarrow}{P}}{M} \overset{\rightarrow}{\pi} \right) + \frac{\overset{\rightarrow}{\pi}}{2M} \\ &= (\overset{\rightarrow}{V}, \overset{\rightarrow}{\pi}) + \frac{\overset{\rightarrow}{\pi}}{2M} = D^{\text{transl}} + R^{\text{transl}}, \\ \Delta E^{\text{rel}} &= \frac{m_2}{M} \left\{ \left( \frac{\overset{\rightarrow}{p}}{m} \overset{\rightarrow}{\pi} \right) + \frac{\overset{\rightarrow}{\pi}}{2m_1} \right\} \\ &= \frac{m_2}{M} \left\{ (\overset{\rightarrow}{v}, \overset{\rightarrow}{\pi}) + \frac{\overset{\rightarrow}{\pi}}{2m_1} \right\} = D^{\text{rel}} + R^{\text{rel}}. \end{aligned} \right\} (5)$$

Natürlich gilt, wie man leicht nachprüft,  $D^{\text{transl}} + D^{\text{rel}} = D$ , ebenso wie  $R^{\text{transl}} + R^{\text{rel}} = R$ .

3. Weiter ist für ein zweiatomiges Molekül die Frage wichtig, welcher Anteil von  $\Delta E^{\text{rel}}$  auf die

Rotationsbewegung entfällt und welcher auf die Radialbewegung. Nur letzterer trägt ja wesentlich zur Dissoziation bei, während ersterer nur indirekt durch die Zentrifugalkraft einen kleinen Beitrag liefert. Die Antwort ist in unserem klassischen Bilde sehr einfach: da der Rückstoßimpuls  $\overset{\rightarrow}{\pi}$  relativ zur Molekülachse isotrop gerichtet ist, entfällt im Mittel von  $\Delta E^{\text{rel}}$  nur ein Drittel auf die Radialkomponente und zwei Drittel auf die beiden Tangentialkomponenten; der Doppler-Anteil ist im Mittel natürlich Null, im Einzelfall wäre  $\overset{\rightarrow}{v}$  in  $\overset{\rightarrow}{v}_{\text{rad}} + \overset{\rightarrow}{v}_{\text{tang}}$  zu zerlegen. Wir erhalten also

$$\overline{\Delta E_{\text{rad}}^{\text{rel}}} = \frac{1}{3} R^{\text{rel}}, \quad \overline{\Delta E_{\text{rot}}^{\text{rel}}} = \frac{2}{3} R^{\text{rel}}.$$

4. Neben den Mittelwerten sind noch die Streuungen von Interesse:

$$\sigma = \overline{(\Delta E - \overline{\Delta E})^2}, \quad (6)$$

wobei an  $\Delta E$  die entsprechenden Indices anzubringen sind. Wir betrachten zunächst den Translationsanteil. Den Winkel zwischen den Richtungen von  $\overset{\rightarrow}{\pi}$  und  $\overset{\rightarrow}{P}$  nennen wir  $\alpha$ , dann ergibt sich

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{transl}} &= \frac{(\overset{\rightarrow}{P}, \overset{\rightarrow}{\pi})^2}{M^2} = 4 \frac{P^2}{2M} \frac{\overset{\rightarrow}{\pi}}{2M} \overline{\cos^2 \alpha} \\ &= \frac{4}{3} \overline{E^{\text{transl}}} \overline{\Delta E^{\text{transl}}}. \end{aligned} \quad (7)$$

Der Faktor  $1/3$  rührt daher, daß die Mittelung von  $\cos^2 \alpha$  über den Raumwinkel vorzunehmen ist; in diesem Falle gilt  $\overline{\cos^2 \alpha} = 1/3$  und  $\overline{\sin^2 \alpha} = 2/3$ . Ist die Translationsenergie thermisch verteilt,  $E^{\text{transl}} = \frac{3}{2} kT$ , so folgt

$$\sigma^{\text{transl}} = 2 k T \Delta E^{\text{transl}}. \quad (7a)$$

Diese Formel ist aus der Korpuskulartheorie des Doppler-Effekts wohlbekannt.

Für den Anteil, der auf die Relativbewegungen fällt, ergeben sich einfache Ausdrücke in jener Näherung, in der sich die Relativbewegung als Überlagerung von harmonischer Oscillation und starrer Rotation darstellen läßt. In diesem Fall ergibt sich nach einfacher Rechnung,

$$\text{mit } R^{\text{rel}} = \frac{m_2}{M} \frac{\overset{\rightarrow}{\pi}}{2m_1}:$$

$$\left. \begin{aligned} \overline{\Delta E_{\text{osc}}} &= \frac{1}{3} R^{\text{rel}}, \\ \sigma_{\text{osc}} &= \frac{4}{45} (R^{\text{rel}})^2 + 2 E_{\text{osc}} \overline{\Delta E_{\text{osc}}} \\ &= \frac{4}{5} (\overline{\Delta E_{\text{osc}}})^2 + 2 E_{\text{osc}} \overline{\Delta E_{\text{osc}}}, \\ \overline{\Delta E_{\text{rot}}} &= \frac{2}{3} R^{\text{rel}}, \\ \sigma_{\text{rot}} &= \frac{4}{45} (R^{\text{rel}})^2 + 2 E_{\text{rot}} \overline{\Delta E_{\text{rot}}} \\ &= \frac{1}{5} (\overline{\Delta E_{\text{rot}}})^2 + 2 E_{\text{rot}} \overline{\Delta E_{\text{rot}}}. \end{aligned} \right\} (8)$$

Darin sind  $E_{\text{rot}}$  und  $E_{\text{osc}}$  jeweils der Energieinhalt der Rotations- und Schwingungsbewegung vor dem Rückstoß. Der erste Anteil der Streuungen rührt jedesmal von der Unbestimmtheit des Winkels zwischen Rückstoßrichtung und Molekülachse her, der zweite vom Doppler-Effekt.

Wenn die Energien nicht vorgegeben, sondern selbst statistisch verteilt sind, so folgt aus bekannten statistischen Sätzen — weil die mittleren Energieaufnahmen  $\overline{\Delta E_{\text{osc}}}$  und  $\overline{\Delta E_{\text{rot}}}$  unabhängig von den Werten  $E_{\text{osc}}$  bzw.  $E_{\text{rot}}$  sind —, daß die Streuungen sich überlagern und dementsprechend  $E_{\text{osc}}$  und  $E_{\text{rot}}$  in (8) einfach durch ihre statistischen Mittelwerte zu ersetzen sind.

Je nachdem, ob  $E_{\text{osc}}$  bzw.  $E_{\text{rot}}$  klein oder groß gegen  $R^{\text{rel}}$  ist, spielt also die Winkelstreuung oder der Doppler-Effekt für die „Verbreiterung“ die ausschlaggebende Rolle.

Betrachtet man, was freilich für die Beurteilung experimenteller Fragen im allgemeinen weniger interessiert, nicht die Energieaufnahmen in Oscillations- und Schwingungsanteil einzeln, sondern die gesamte Energieaufnahme in die Relativbewegung,  $\Delta E^{\text{rel}} = \Delta E_{\text{osc}} + \Delta E_{\text{rot}}$ , so hebt sich die Unbestimmtheit der Rückstoßrichtung gegen die Molekülachse heraus,

$$\overline{\Delta E^{\text{rel}}} = R^{\text{rel}}, \quad (8a)$$

und es bleibt für die Streuung nur die Verbreiterung durch den Doppler-Effekt übrig

$$\sigma_{\text{rel}} = 2 (E_{\text{osc}} \overline{\Delta E_{\text{osc}}} + E_{\text{rot}} \overline{\Delta E_{\text{rot}}}). \quad (8b)$$

5. Befindet sich der Kern in einem Kristallgitter eingebaut, ein Fall, der für die Resonanzprozesse

bei langsamen Neutronen von großem Interesse ist, so fällt wegen der großen Masse des Gitterverbandes der Translationsanteil der Energieaufnahme fort. Die Bewegung des Massenpunktes können wir nach Normalschwingungen zerlegen, die etwa in einem Debye-Spektrum verteilt sind.

Wir setzen  $\vec{v} = \sum_{\omega} \vec{v}_{\omega}$  und erhalten

$$\Delta E_{\text{gitter}} = (\vec{\pi}, \sum_{\omega} \vec{v}_{\omega}) + \frac{\pi^2}{2m}. \quad (9)$$

Zur Berechnung der Mittelwerte haben wir über alle Bewegungsphasen und außerdem über alle Richtungen des Rückstoßimpulses  $\vec{\pi}$  zu mitteln. Es wird dann

$$\overline{\Delta E_{\text{gitter}}} = \frac{\pi^2}{2m} = R \quad (10)$$

und

$$\sigma_{\text{gitter}} = \overline{\left\{ \sum_{\omega} (\vec{\pi}, \vec{v}_{\omega}) \right\}^2} = \sum_{\omega} \sum_{\omega'} \overline{(\vec{\pi}, \vec{v}_{\omega}) (\vec{\pi}, \vec{v}_{\omega'})}. \quad (10a)$$

Bei der Phasenmittlung geben die Summanden nur einen Beitrag für  $\omega' = \omega$ ; also

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{gitter}} &= \sum_{\omega} \overline{(\vec{\pi}, \vec{v}_{\omega})^2} \\ &= \sum_{\omega} \pi^2 v_{\omega}^2 \overline{\cos^2 a} = \frac{1}{3} \pi^2 \sum_{\omega} v_{\omega}^2, \end{aligned}$$

aus demselben Grunde wie oben, und weil nach dem Virialsatz für die Oscillatoren  $m \overline{v_{\omega}^2} = E_{\omega}$  gilt, folgt:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{gitter}} &= \frac{2}{3} \frac{\pi^2}{2m} \sum_{\omega} m v_{\omega}^2 \\ &= \frac{2}{3} R \sum_{\omega} E_{\omega} = \frac{2}{3} R E_{\text{gitter}}, \end{aligned} \quad (11)$$

worin  $E_{\text{gitter}}$  die Gitterenergie pro Teilchen ist; für diese kann auch wieder ihr statistischer Mittelwert eingesetzt werden. Bei hohen Temperaturen ist  $E_{\text{gitter}} = 3 kT$ , also

$$\sigma_{\text{gitter}} = 2 R k T \quad (T \gg \text{Debye-Temperatur}), \quad (11a)$$

d. h. die Doppler-Breite im Gitter ist bei hoher Temperatur dieselbe wie beim freien Teilchen, was natürlich auch unmittelbar daraus folgt, daß

bei hoher Temperatur die statistische Geschwindigkeitsverteilung unabhängig von der Bindung ist.

## § 2. Quantentheoretische Behandlung. Zusammenfassung und Diskussion der Resultate

Die klassischen Überlegungen des vorigen Paragraphen haben wir so ausführlich gebracht, weil in bezug auf Mittelwerte und Streuungen alle Resultate bei der quantentheoretischen Rechnung fast unverändert bleiben, obwohl im einzelnen die physikalische Situation natürlich wesentlich verändert ist. Z. B. ist beim Molekül die innere Energie gequantelt, und der Wert der Gleichung (2)

$\Delta E^{\text{rel}} = \frac{m_2}{M} \frac{\pi}{2m_1} \xrightarrow{2}$  braucht keinem Quantensprung zu entsprechen, so daß dieser Energiewert genau gar nicht aufgenommen werden kann. An Stelle der Formel (5) tritt jetzt die Frage nach der Wahrscheinlichkeit dafür, daß beim Rückstoß das Molekül einen bestimmten Quantensprung macht, und die Mittelwerte in den Formeln (6) bis (11) sind als Mittelwerte über diese Wahrscheinlichkeiten zu verstehen. Mit dieser Interpretation liefern dann die in den nachfolgenden Paragraphen mitgeteilten Rechnungen fast unverändert die Gleichungen (7), (8) und (11), wobei folgende Ersetzungen vorzunehmen sind:

1. **Zweiatomiges Molekül:** Im Ausgangszustand möge es die Oscillationsquantenzahl  $n$  und Rotationsquantenzahl  $l$  haben; die „Richtung“ der Molekülachse sei isotrop zur Rückstoßrichtung, d. h. in der Eigenfunktion seien alle Zustände mit den möglichen magnetischen Quantenzahlen  $m$  mit gleicher Amplitude vertreten. Dann gilt (8), wenn man setzt

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad \text{an Stelle von } E_{\text{osc}},$$

$$\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \left\{ l(l+1) + 1 \right\} \quad \text{an Stelle von } E_{\text{rot}} \quad (12)$$

bzw. deren Mittelwerte, falls  $n$  und  $l$  statistisch verteilt sind. Ist insbesondere der Oscillator anfangs im Grundzustand  $n=0$ , so ist die „Doppler-Breite“ gerade durch die Nullpunktsenergie  $\hbar \omega/2$  bestimmt; man könnte also geneigt sein, diese Verbreiterung direkt als Doppler-Effekt der Nullpunktsbewegung anzusehen; jedoch ist es wohl unvernünftig, die Korrespondenz so weit zu

treiben, aus zwei Gründen: die Energieaufnahmen sind diskret, in Vielfachen von  $\hbar \omega$ ; die Verteilung ist, falls nicht  $R^{\text{rel}} \gg \hbar \omega$  ist, unsymmetrisch um  $\overline{\Delta E}_{\text{osc}} = \frac{1}{3} R^{\text{rel}}$ ; insbesondere können keine Energieabgaben des Oscillators stattfinden, und die größte Wahrscheinlichkeit besteht dafür, daß gar keine Energie aufgenommen wird. Immerhin ist es beachtlich, daß wenigstens zur Berechnung der Mittelwerte und Streuungen das klassische Bild ausreicht. Wenn außerdem die Rückstoßenergie groß gegen  $\hbar \omega$  ist, so daß der Oscillator im Mittel hoch angeregt wird, so wird auch die Verteilung symmetrisch um diesen Mittelwert. Noch deutlicher wird die Sachlage im Falle des Rotators, der ja keine Nullpunktsenergie hat; trotzdem bleibt für  $l=0$  eine endliche Streuung in der Energieaufnahme übrig, die im korrespondenzmäßig-klassischen Bilde ganz unverständlich wäre, in der quantentheoretischen Darstellung aber ganz natürlich und zwangsläufig herauskommt.

2. **Kristallgitter<sup>2</sup>:** Hier ist besonders interessant die unter Kernphysikern viel diskutierte Frage der Doppler-Verbreiterung der Resonanzlinien beim Einfang langsamer Neutronen. Es wurde die Ansicht geäußert, daß bei Abkühlung des Gitters unter die Debye-Temperatur  $\Theta$  die Absorptionslinie bis auf die natürliche Breite schmal werden würde, da dann der Rückstoß nicht ausreichte, um die Gitterschwingungen anzuregen. Dies wäre auch der Fall, wenn die Gitterschwingungen nach dem Einsteinschen Modell mit nur einer Frequenz  $\omega_0$  vorhanden wären; dann hätte man in der Tat nur die unverschobene Resonanzlinie in ihrer natürlichen Breite zu erwarten und daneben eine Folge von ebenso schmalen Linien in Abständen  $\hbar \omega_0$ , deren Intensität um so rascher abklingt, je kleiner die Rückstoßenergie  $R$  gegen  $\hbar \omega_0$  ist. Da jedoch die Gitterfrequenzen praktisch ein Kontinuum ausmachen, das auch beliebig kleine Frequenzen enthält, so ergibt sich immer noch ein verbreitertes Spektrum mit der mittleren Linienverschiebung  $R$  aus Gleichung (10) und der Ver-

<sup>2</sup> Das im folgenden besprochene Problem ist bereits vollständig behandelt bei W. E. Lamb, Physic. Rev. 55, 190 [1939]. Wir erlauben uns trotzdem, noch einmal kurz darauf einzugehen, einesteils wegen der Erörterung der korrespondenzmäßigen Fragen und weil die wichtigsten Resultate in einfacherer Rechnung zu bekommen sind, zum anderen, weil wir feststellen mußten, daß von vielen Physikern die Lamb'sche Arbeit leider ebenso wie von uns übersehen wurde, und wir bei dieser Gelegenheit nochmals auf diese interessante Arbeit hinweisen möchten.

breiterung (11), worin  $E_{\text{gitter}}$  den Energieinhalt des Gitters pro Teilchen darstellt.  $E_{\text{gitter}}$  wird durch die Debye-Funktion gegeben und hat die Grenzwerte  $3kT$  für  $T \gg \Theta$  bzw.  $\frac{1}{8}k\Theta$  für  $T \ll \Theta$ . Die Grenzverbreiterung  $\sigma_{\text{gitter}} = 2R \cdot \frac{1}{8}k\Theta$  kann also nicht unterschritten werden. Wir haben hier wiederum einen Doppler-Effekt der Nullpunktbewegungen des Gitters vor uns, in demselben eingeschränkten anschaulichen Sinne wie oben: die Linienform wird um so unsymmetrischer um die mittlere Linienverschiebung  $R$ , je kleiner das Verhältnis  $R: \hbar\omega_0 = R:k\Theta$  ist; insbesondere bricht die Verteilung bei der Verschiebung Null scharf ab. Die Unsymmetrie ist temperaturunabhängig, solange  $T \ll \Theta$  ist. Die genaue Linienform ist bei Lamb, l. c.<sup>2</sup>, für zwei typische Fälle numerisch berechnet und graphisch dargestellt.

### § 3. Quantentheoretische Behandlung. Durchführung der Rechnungen

1. Wir betrachten als einfachstes Beispiel den  $\beta$ -Zerfall, wobei der aktive Kern mit der Masse  $m_1$  und Schwerpunktskoordinate  $X_1$  im Molekül eingebaut ist; der Molekülrest habe die Koordinate  $X_2$  und Masse  $m_2$ . Die „inneren“ Koordinaten des aktiven Kerns nennen wir  $x_i$ , dabei sei  $x_0$  die Koordinate des sich umwandelnden Nucleons relativ zum Kernschwerpunkt. Anfangs- und Endzustände indizieren wir mit  $a$  bzw.  $f$ . Die Zustandsfunktion können wir dann schreiben als Produkt der Eigenfunktionen  $\Psi(X_1, X_2)$  und  $u(x_i)$ . Das Wechselwirkungspotential hat für den  $\beta$ -Zerfall die Form  $V = g \varphi_e \varphi_\nu Q$ , worin  $g$  die Fermi-Konstante und  $\varphi$  die Wellenfunktionen des emittierten Elektrons und Neutrinos am Ort des Nucleons bedeuten; für beide können wir ebene Wellen ansetzen

$$\varphi_e = \exp[i(\vec{k}_e, \vec{X}_1 + \vec{x}_0)];$$

$$\varphi_\nu = \exp[i(\vec{k}_\nu, \vec{X}_1 + \vec{x}_0)].$$

$\vec{k}_e$  und  $\vec{k}_\nu$  sind die zugehörigen Wellenvektoren; der Rückstoßimpuls ist demnach  $\hbar\vec{k} = \hbar(\vec{k}_e + \vec{k}_\nu)$ ; durch das Coulomb-Feld des Kerns wird  $\varphi_e$  noch moduliert sein, also einen Faktor  $F(x_0)$  erhalten, was für das folgende unwichtig ist;  $Q$  ist der Operator, der das Nucleon von einem Neutronenzustand in einen Protonenzustand überführt. Die Übergangswahrscheinlichkeit ist dann proportional zum Absolutquadrat des Matrixelements

$$M_{af} = \int d\vec{X}_1 d\vec{X}_2 \prod_i d\vec{x}_i \cdot \Psi_f^*(\vec{X}_1, \vec{X}_2) u_f^*(\vec{x}_i) V \Psi_a(\vec{X}_1, \vec{X}_2) u_a(\vec{x}_i). \quad (13)$$

Beim Einsetzen von  $V$  ergibt sich

$$M_{af} = M_{af}^{\text{Molekül}} M_{af}^{\text{Kern}}, \text{ mit}$$

$$M_{af}^{\text{mol}} = \int d\vec{X}_1 x_0 d\vec{X}_2 \Psi_f^*(\vec{X}_1, \vec{X}_2) \exp[i(\vec{k}, \vec{X}_1)] \Psi_a(\vec{X}_1, \vec{X}_2), \quad (13a)$$

$$M_{af}^{\text{Kern}} = g \int d\vec{x}_i u_f^*(\vec{x}_i) \exp[i(\vec{k}, \vec{x}_0)] F(\vec{x}_0) Q u_a(\vec{x}_i). \quad (13b)$$

Die Indices  $a$  und  $f$  stehen für eine ganze Reihe von Quantenzahlen: Schwerpunktsbewegung des Moleküls, Oscillations- und Rotationsquanten, innere Zustände

des Kerns. Die Vektoren  $\vec{k}_e$  und  $\vec{k}_\nu$  müssen so gewählt werden, daß der Energiesatz erfüllt ist; deshalb sind sie etwas verschieden, je nachdem, welche Quantenzahlen des Moleküls im Endzustand angenommen werden. Da jedoch die Energieaufnahme des Moleküls sehr klein ist, verglichen mit der  $\beta$ -Zerfallsenergie, so

schwanken die Werte von  $\vec{k}$  nur wenig, und da außerdem  $(\vec{k}, x_0) \ll 1$  ist im ganzen Kern, so können wir  $M_{af}^{\text{Kern}}$  als Konstante behandeln, unabhängig von den Quantenzahlen des Moleküls.

Die Matrixelemente  $M_{af}^{\text{mol}}$  können wir auffassen als Entwicklungskoeffizienten der Entwicklung von

$$\Phi^{\text{mol}} = \exp[i(\vec{k}, \vec{X}_1)] \Psi_a(\vec{X}_1, \vec{X}_2)$$

nach den Eigenzuständen des Moleküls:

$$\begin{aligned} \Phi^{\text{mol}} &= \exp[i(\vec{k}, \vec{X}_1)] \Psi_a(\vec{X}_1, \vec{X}_2) \\ &= \sum_f M_{af}^{\text{mol}} \Psi_f(\vec{X}_1, \vec{X}_2). \end{aligned} \quad (14)$$

Wegen Orthogonalität der Eigenfunktionen, wenn sie auf 1 normiert angenommen werden, folgt:

$$\begin{aligned} \int |\Phi^{\text{mol}}|^2 d\vec{X}_1 d\vec{X}_2 &= \int |\Psi_a|^2 d\vec{X}_1 d\vec{X}_2 \\ &= \sum_f |M_{af}^{\text{mol}}|^2 = 1. \end{aligned} \quad (14a)$$

Demgemäß bestimmt  $\sum_f |M_{af}^{\text{mol}}|^2 = |M_{af}^{\text{Kern}}|^2$  die Gesamtwahrscheinlichkeit des  $\beta$ -Zerfalls mit den Impulsen  $\hbar\vec{k}_e$  und  $\hbar\vec{k}_\nu$ , bei gleichzeitiger beliebiger Anregung des Moleküls, und die  $|M_{af}^{\text{mol}}|^2$  einzeln sind dementsprechend die relativen Wahrscheinlichkeiten für die Anregung eines bestimmten Molekülzustandes  $f$ . Diese allein sind für unser Problem von Interesse.

Bei anderen Kernprozessen wie  $\gamma$ -Strahlung, „internal conversion“, Neutroneneinfang usw. ergeben sich ganz dieselben Matrixelemente  $M_{af}^{\text{mol}}$  für die Molekülan-

regung, wo  $\vec{k}$  jedesmal den Wellenvektor des emittierten bzw. absorbierten Teilchens bedeutet. Der Faktor  $\exp i(\vec{k} \vec{X}_1)$  rührt bei der  $\gamma$ -Strahlung vom Vektorpotential in der Wechselwirkungsenergie mit dem Strahlungsfelde her; bei der internal conversion und beim Neutroneneinfang kommt er von der Eigenfunktion des Teilchens im freien Zustand in das Matrixelement. Beim Neutroneneinfang brauchen wir ferner nur das Matrixelement für den ersten Schritt: Bildung des Compound-Kerns, zu berücksichtigen; das Matrixelement für die nachfolgende Aussendung der „Einfangstrahlung“ dürfen wir, ebenso wie  $M_{af}^{\text{kern}}$ , als Konstante behandeln.

Zur Abspaltung des Translationsanteils in  $M_{af}^{\text{mol}}$  führen wir wie üblich Schwerpunkts- und Relativkoordinaten ein:

$$\begin{aligned} m_1 \vec{X}_1 + m_2 \vec{X}_2 &= (m_1 + m_2) \vec{X} = M \vec{R} \\ \vec{X}_1 - \vec{X}_2 &= \vec{r} \\ \vec{X}_1 &= \vec{R} + \frac{m_2}{M} \vec{r}; \quad \vec{X}_2 = \vec{R} - \frac{m_1}{M} \vec{r}, \end{aligned}$$

und entsprechend werden die Eigenfunktionen (mit dem Schwerpunktsimpuls  $\vec{\hbar} \vec{k}$ )

$$\begin{aligned} \psi &= N \exp [i(\vec{k} \vec{R})] \psi(\vec{r}) \\ (N &= \text{Normierungsfaktor}). \end{aligned}$$

Das Matrixelement  $M_{af}^{\text{mol}}$  schreibt sich dann:

$$M_{af}^{\text{mol}} = M_{af}^{\text{transl}} M_{af}^{\text{rel}} \quad (15)$$

mit

$$M_{af}^{\text{transl}} = N \int \vec{d}r \exp [i(\vec{k}_a - \vec{k}_f + \vec{k}, \vec{R})]$$

und

$$M_{af}^{\text{rel}} = \int \vec{d}r \psi_f^*(\vec{r}) \exp [i \frac{m_2}{M} (\vec{k}, \vec{r})] \psi_a(\vec{r}). \quad (15a)$$

$M_{af}^{\text{transl}}$  ist nur dann von Null verschieden, wenn der Impulssatz erfüllt ist:

$$\vec{k}_f = \vec{k}_a + \vec{k},$$

und hat dann bei richtiger Wahl des Normierungsfaktors den Wert 1. Es bleibt also als einzig interessierender Faktor das Matrixelement für die Änderung der Quantenzustände der inneren Bewegung des Moleküls übrig. Die Quantenzustände charakterisieren wir durch die Indices  $n, l$  für den Anfangs- und  $\nu, \lambda$  für den Endzustand (evtl. kommen noch die magnetischen Quantenzahlen hinzu).

$$M_{af}^{\text{rel}} = M_{\nu\lambda}^n = \int \vec{d}r \psi_{\nu\lambda}^*(\vec{r}) \exp [i(\vec{\alpha} \vec{r})] \psi_{n l}(\vec{r}) \quad (16)$$

$\alpha$  haben wir als Abkürzung  $\alpha = \frac{m_2}{M} \vec{k}$  geschrieben.

Die zugehörigen Energiewerte des Moleküls heißen  $E_{\nu, \lambda}$ . Für die Matrixelemente (16) gelten wieder die zu (14) und (14a) analogen Entwicklungs- und Sumsätze.

2. Vor der Berechnung der einzelnen Übergangs-

wahrscheinlichkeiten wollen wir mittels dieser Sumsätze zunächst die Mittelwerte und Streuungen bestimmen. Zu diesem Ende führen wir den Operator ein:

$$\Omega = - \left( \frac{\hbar}{2m} \Delta - V \right) - E_{n l}, \quad (17)$$

und schreiben wie bei (14) zur Abkürzung  $\Phi =$

$$\exp i(\vec{\alpha} \vec{r}) \psi_{n l}(\vec{r}). \text{ Dann gilt nach dem Entwicklungssatz: } \Omega \Phi = \sum M_{\nu\lambda}^n \{ E_{\nu\lambda} - E_{n l} \} \psi_{\nu\lambda}$$

und wegen der Orthogonalität der Eigenfunktionen, nach der Deutung der  $|M|^2$  als Übergangswahrscheinlichkeiten:

$$\int \vec{d}r \Phi^* \Omega \Phi = \sum |M_{\nu\lambda}^n|^2 \{ E_{\nu\lambda} - E_{n l} \} = \overline{\Delta E}. \quad (17a)$$

Das Integral läßt sich leicht auswerten, wenn man die Selbstadjungiertheit des Operators  $\Omega$  berücksichtigt.

$$\begin{aligned} \overline{\Delta E} &= \int \vec{d}r \frac{\Phi^* \Omega \Phi + \Phi \Omega \Phi^*}{2} \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \int \vec{d}r \Phi^* \Phi = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} = \frac{m_2}{M} \frac{\pi^2}{2m_1}, \end{aligned} \quad (18)$$

also gilt das klassische Resultat (8a), weil  $\vec{\hbar} \vec{k} = \vec{\pi}$ . Ebenso gilt für den Quadratmittelwert

$$\overline{\Delta E^2} = \sum \{ E_{\nu\lambda} - E_{n l} \}^2 |M_{\nu\lambda}^n|^2 = \int \vec{d}r \Phi^* \Omega^2 \Phi,$$

was man unter Beachtung der Selbstadjungiertheit von  $\Omega$  zweckmäßig umformt in

$$\overline{\Delta E^2} = \int \vec{d}r (\Omega \Phi) (\Omega \Phi^*), \quad (19)$$

und daraus erhalten wir nach elementarer Rechnung für die Streuung:

$$\begin{aligned} \sigma &= \overline{\Delta E^2} - \overline{\Delta E}^2 \\ &= 2 \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{\hbar^2}{2m} \int \vec{d}r |(\mathbf{t}_0, \text{grad } \psi_{n l})|^2, \end{aligned} \quad (20)$$

worin  $\mathbf{t}_0$  ein Einheitsvektor in Richtung von  $\vec{k}$  ist.

Das letzte Integral läßt sich explizit auswerten für den Fall, daß sich die Eigenfunktion  $\psi_{n l}$  separieren läßt in das Produkt der Funktionen des harmonischen Oscillators und des starren Rotators<sup>3</sup>. Es ergibt sich dann die klassische Gleichung (8b) mit der Umdeutung (12).

Wichtiger ist jedoch die Aufteilung der Energieaufnahme in Oscillations- und Rotationsanteil und deren Mittelwerte und Streuungen im einzelnen. Dazu führen

<sup>3</sup> Man muß außerdem  $\psi_{n l}$  kugelsymmetrisch voraussetzen, d. h. annehmen, daß in  $\psi_{n l}$  alle mit dem Werte von  $l$  verträglichen magnetischen Quantenzahlen mit gleicher Amplitude vertreten sind, was wegen der Isotropie von  $\alpha$  vernünftig ist.

wir an Stelle von (17) die folgenden Operatoren ein, für den Schwingungsanteil:

$$\Omega_{\text{osc}} = - \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\text{rad}} - V \right\} - \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad (21)$$

worin  $\Delta_{\text{rad}}$  der radiale Anteil des Laplace'schen Operators ist,  $\Delta_{\text{rad}} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$  und entsprechend für den Rotationsanteil:

$$\Omega_{\text{rot}} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\text{winkel}} - \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} l(l+1). \quad (22)$$

$r_0$  ist der mittlere Kernabstand im Molekül, durch den wir auch  $r$  im Nenner des winkelabhängigen Anteils des Laplace'schen Operators ersetzt haben. Als Polarachse der Kugelfunktionen wählen wir die Richtung von  $\vec{z}$ , schreiben also  $\exp(\vec{z}r) = \exp\{zr \cos \vartheta\}$ ; bei der Anwendung des Operators (21) auf  $\Phi$  treten deshalb auch im Schwingungsanteil winkelabhängige Ausdrücke explizit auf. Der Entwicklungssatz liefert dann wieder

$$\int \vec{dr} \Phi^* \Omega_{\text{osc}} \Phi = \overline{\Delta E_{\text{osc}}} \quad \text{und} \\ \int \vec{dr} \Phi^* \Omega_{\text{osc}}^2 \Phi = \overline{(\Delta E_{\text{osc}})^2}$$

und die entsprechenden Ausdrücke für den Rotationsanteil. Die verhältnismäßig elementare Rechnung liefert dann die Gleichungen (8) mit den Umdeutungen (12). Beachtlich ist das Auftreten von  $l(l+1) + 1$  und nicht etwa einfach  $l(l+1)$  in (12) für den starren Rotator.

Zur Berechnung der Energieaufnahme des Gitters zerlegen wir die Bewegung des Kerns nach Normalschwingungen<sup>4</sup>

$$\vec{X} = N^{-1/2} \sum_s \vec{x}_s,$$

worin die  $\vec{x}_s$  die Amplituden der einzelnen Gitterschwingungen sind, die den Gleichungen  $\ddot{x}_s + \omega_s^2 x_s = 0$  genügen.  $N$  ist die Anzahl der Atome im Gitter, der Index  $s$  läuft von 1 bis  $3N$ ; der Normierungsfaktor  $N^{-1/2}$  ist deshalb zweckmäßig, weil dann die Gesamtenergie des Gitters gleich ist der Summe der Energien aller Normalschwingungen. Die Gitterenergie pro Teilchen, die wir mit  $E_{\text{gitter}}$  bezeichnet hatten, wird

$$E_{\text{gitter}} = \frac{1}{N} \sum_s \frac{m}{2} (\dot{x}_s^2 + \omega_s^2 x_s^2).$$

Bei der Quantisierung müssen wir die  $x_s$  als lineare harmonische Oscillatoren behandeln, deren Eigenfunktionen Hermite'sche Orthogonalfunktionen sind. Der Zustand des Gitters, bei dem die  $s$ -te Eigenschwingung mit  $\nu_s$  Quanten angeregt ist, wird beschrieben durch die Produkteigenfunktion

$$\psi(x_1 \dots x_s \dots) = \prod_s H_{\nu_s}(\xi_s) \quad \text{mit: } \xi_s = \sqrt{\frac{m\omega_s}{\hbar}} \vec{x}_s; \\ \nu_1 \dots \nu_s \dots$$

<sup>4</sup> E. W. Lamb, l. c.<sup>2</sup>, Sommerfeld-Bethe, Handb. d. Physik XXIV, 2, S. 500.

und an Stelle des Matrixelements (13a) tritt

$$M_{\nu_1 \dots \nu_s \dots}^{n_1 \dots n_s \dots} = \Pi \int d\xi_s H_{\nu_s}(\xi_s) \exp[i(\vec{\eta}_s, \vec{\xi}_s)] H_{n_s}(\xi_s) \\ \text{mit: } \vec{\eta}_s = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_s}} \vec{k}.$$

Es gilt wieder der zu (14) analoge Entwicklungssatz

$$\Phi = \exp \left[ i \sum_s (\vec{\eta}_s, \vec{\xi}_s) \right] \psi_{n_1 \dots n_s \dots} \\ = \sum M_{\nu_1 \dots \nu_s \dots}^{n_1 \dots n_s \dots} \psi_{\nu_1 \dots \nu_s \dots}$$

und der (14a) entsprechende Summensatz. An die Stelle des Operators (17) haben wir zu schreiben

$$\Omega_{\text{gitter}} = \sum \left\{ - \left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x_s} - \frac{m}{2} \omega_s^2 x_s^2 \right) - \left( n_s + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_s \right\},$$

und dann folgt aus

$$\overline{\Delta E_{\text{gitter}}} = \int \Pi dx_s \Phi^* \Omega_{\text{gitter}} \Phi \quad \text{und} \\ \overline{\Delta E_{\text{gitter}}^2} = \int \Pi dx_s \Phi^* \Omega_{\text{gitter}}^2 \Phi$$

nach einfachster Rechnung

$$\overline{\Delta E_{\text{gitter}}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{und} \quad \sigma_{\text{gitter}} = 2 E_{\text{gitter}} \overline{\Delta E_{\text{gitter}}}$$

$E_{\text{gitter}}$  kann man wiederum durch seinen statistischen Mittelwert ersetzen, weil  $\Delta E_{\text{gitter}}$  unabhängig von  $E_{\text{gitter}}$  ist. Wir möchten betonen, daß dieser Wert für die Streuung allgemein gilt, und nicht nur in den bei Lamb in diesem Zusammenhang diskutierten Grenzfällen.

#### § 4. Berechnung einzelner Übergangswahrscheinlichkeiten

In einzelnen Fällen lassen sich die Matrixelemente auf einfache bekannte Funktionen zurückführen.

1. Der *eindimensionale Oscillator* bietet das einfachste Beispiel. Die Eigenfunktionen sind die normierten Hermite'schen Orthogonalfunktionen  $H_\nu(\xi)$  mit der

Quantennummer  $\nu$  und dem Argument  $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X$ ,

wenn  $X$  die Ortskoordinate und  $\omega$  die Oscillatorfrequenz ist. Die Exponentialfunktion in (13a) schreiben wir:

$\exp(\vec{k}\vec{X}) = \exp\left\{ \xi \sqrt{2\eta} \right\}$ ; der darin eingeführte Parameter  $\eta = \cos^2 \vartheta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} / \hbar \omega$  bedeutet anschaulich das

Verhältnis Rückstoßenergie zu Oscillatorquant. Das Matrixelement (13a) lautet dann

$$M_{\nu'}^{\text{oscillator}} = M_\nu^n = \int d\xi H_{\nu'}(\xi) \exp[i\sqrt{2\eta}\xi] H_\nu(\xi). \quad (23)$$

Die Integrale lassen sich mit der erzeugenden Funktion der Hermiteschen Polynome leicht ausrechnen; besonders einfach werden sie, wenn der Oscillator anfangs im Grundzustand ist ( $n = 0$ ); dann gilt

$$|M_{\nu}^0|^2 = \frac{\eta^{\nu}}{\nu!} e^{-\eta} \text{ mit } \eta = \frac{\cos^2 \vartheta \hbar^2 k^2 / 2m}{\hbar \omega}. \quad (24)$$

Der Summensatz (14 a) ist für diesen Spezialfall unmittelbar ersichtlich. Für kleine Werte von  $\eta$ , d. h. kleine Rückstoßimpulse, ist die Übergangswahrscheinlichkeit sehr nahe bei 1, wenn  $\nu = 0$  ist, d. h. wenn keine Energie aufgenommen wird, während sie mit zunehmendem  $\nu$  sehr rasch abfällt. Für alle  $\eta$  gilt jedoch, wie man ebenfalls fast ohne Rechnung aus (24) entnimmt:

$$\bar{\nu} = \eta \quad \text{und} \quad \overline{\nu^2} - \bar{\nu}^2 = \eta,$$

und daraus folgt

$$\overline{\Delta E} = \hbar \omega \bar{\nu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \cos^2 \vartheta$$

$$\text{und } \sigma = (\hbar \omega)^2 \{ \overline{\nu^2} - \bar{\nu}^2 \} = 2 \frac{\hbar \omega}{2} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \cos^2 \vartheta$$

als Sonderfall von (8), wobei natürlich definitionsgemäß die Winkelstreuung fortfällt. Für große Werte von  $\eta$  andererseits läßt sich die unsymmetrische Poisson-Verteilung durch eine Glockenkurve approximieren, mit dem Schwerpunkt bei  $\nu = \bar{\nu} = \eta$  und der oben berechneten Streuung; hier wird also die Energieaufnahme symmetrisch um ihren Mittelwert, dem klassischen Bilde des Doppeler-Effekts entsprechend.

2. *Starrer Rotator.* Das Argument in der Exponentialfunktion in (13 a) schreiben wir

$$k r_0 \cos \vartheta = \sqrt{\eta} \cos \vartheta, \text{ mit } \eta = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} / \frac{\hbar^2}{2m r_0^2};$$

die physikalisch anschauliche Bedeutung des Parameters  $\eta$  ist ähnlich wie beim Oscillator. Für die Matrixelemente folgt der Ausdruck:

$$M_{\lambda \mu}^l = \iint Y_{\lambda \mu}^* \exp [i \sqrt{\eta} \cos \vartheta] Y_{l m} d\varphi d \cos \vartheta,$$

worin  $Y_{l m}$  die normierten Kugelflächenfunktionen sind. Die Integrale lassen sich durch Bessel-Funktionen ausdrücken. Einfach wird wieder der Fall, daß der Rotator anfangs im Grundzustand ist. Die Matrixelemente sind dann wegen der Orthogonalität nur von Null verschieden, wenn auch im Endzustand die magnetische Quantenzahl  $\mu$  verschwindet, und haben dann den Wert

$$M_0^l = i^{\nu} \sqrt{2\lambda + 1} \sqrt{\frac{\pi}{2V}} J_{\lambda + 1/2}(\sqrt{\eta}).$$

$J_{\lambda + 1/2}$  sind Bessel-Funktionen der Ordnung  $\lambda + \frac{1}{2}$ .

Die Abhängigkeit von der Größenordnung des Parameters  $\eta$  ist wieder ähnlich wie beim Oscillator.

3. *Molekül.* Anregung der Radialschwingungen, sum-

miert über alle Rotatoranregungen bei bestimmtem Quantensprung  $n \rightarrow \nu$ .

Wir schreiben die Eigenfunktionen als Produkt:

$$\psi_{\nu, \lambda, \mu} = \frac{H_{\nu}(\xi)}{r} Y_{\lambda, \mu}(\vartheta, \varphi) \left( \begin{array}{l} H_{\nu}(\xi) \text{ wie beim Oscillator} \\ Y_{\lambda, \mu} \text{ wie beim starren Rotator} \end{array} \right)$$

und führen folgende Abkürzungen ein:

$$\begin{aligned} \exp [i \vec{\alpha} \cdot \vec{r}] &= \exp [i \vec{\alpha} \cdot \vec{r}_0] \exp [i \alpha X \cos \vartheta] \\ &= \exp [i \vec{\alpha} \cdot \vec{r}_0] \exp [i \sqrt{2\eta} \xi] \text{ mit } \eta = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \cos^2 \vartheta. \end{aligned}$$

$r_0$  ist dabei der Kernabstand in der Ruhelage. Wir schreiben  $d\Omega$  für das Raumwinkelement und erhalten dann für die Matrixelemente:

$$M_{\nu, \lambda, \mu}^{n, l, m} = \int d\Omega Y_{\lambda, \mu}^* \exp [i \vec{\alpha} \cdot \vec{r}_0] M_{\nu}^n(\cos \vartheta) Y_{l, m}$$

$$\text{mit } M_{\nu}^n(\cos \vartheta) = \int H_{\nu}(\xi) \exp [i \sqrt{2\eta} \xi] H_n(\xi) d\xi,$$

$$\text{speziell } |M_{\nu}^0|^2 = \frac{\eta^{\nu}}{\nu!} e^{-\eta}.$$

Mit  $\Phi = \exp [i \vec{\alpha} \cdot \vec{r}_0] M_{\nu}^n(\cos \vartheta) Y_{l, m}$  lautet der zu (14) analoge Entwicklungssatz

$$\Phi = \sum_{\lambda, \mu} M_{\nu, \lambda, \mu}^{n, l, m} Y_{\lambda, \mu},$$

und wegen der Orthogonalität erhalten wir:

$$\begin{aligned} \int \Phi^* \Phi d\Omega &= \int |Y_{l, m}|^2 |M_{\nu}^n(\cos \vartheta)|^2 d\Omega \\ &= \sum_{\lambda, \mu} |M_{\nu, \lambda, \mu}^{n, l, m}|^2. \end{aligned}$$

Der letzte Ausdruck ist die Wahrscheinlichkeit für den Quantensprung  $n \rightarrow \nu$  bei beliebigem Quantensprung des Rotators

$$\sum_{\lambda, \mu} |M_{\nu, \lambda, \mu}^{n, l, m}|^2 = W_{\nu}^n.$$

Im Ausgangszustand können wir wieder bei jedem  $l$  die Winkelfunktion  $Y_{l m}$  als kugelsymmetrisch annehmen, d. h. die magnetischen Quantenzahlen  $-l \ll m \ll l$  alle mit gleichen Amplituden vertreten sein lassen. Dann bedeutet das letzte Integral einfach den Mittelwert von  $|M_{\nu}^n(\cos \vartheta)|^2$  über den Raumwinkel und speziell:

$$W_{\nu}^0 = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) |M_{\nu}^0(\cos \vartheta)|^2,$$

d. h. die über den Raumwinkel gebildeten Mittelwerte der Poisson-Verteilung (24).