Mario Ackers
Das Neutron-Deuteron-System im Coupled-Channels-Formalismus mit Sturmschen Zuständen für das realistische Argonne v14-Potential
Referent: Prof. Dr. W. Sandhas
Koreferent: Priv.-Doz. Dr. B. C. Metsch

Contents

1 Einleitung

Die vorliegende Arbeit behandelt das aus zwei Neutronen und einem Proton bestehende Drei-Nukleonen-System bei Energien unterhalb der Deuteron-Aufbruchschwelle. Unter Verwendung des Coupled-Channels-Formalismus mit Sturmschen Zuständen (SCCF) [1], der im folgenden vorgestellt und numerisch durchgeführt wird, werden zum ersten Mal sowohl die Bindung als auch die elastische Neutron-Deuteron-Streuung bei Präsenz einer sogenannten realistischen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung, welche den etwa 5-prozentigen d-Wellenanteil des Deuterons berücksichtigt, untersucht, während bisher nur s-Wellenpotentiale benutzt wurden [1, 2]. Es handelt sich dabei meist um feldtheoretisch motivierte Potentialmodelle, deren Parameter an experimentelle Daten aus Nukleon-Nukleon-Streuung angepaßt sind. Hier wählen wir das von R. B. Wiringa, R. A. Smith und T. L. Ainsworth veröffentlichte Argonne v_{14}-Potential, das sich schon in anderen Drei-Körper-Rechnungen gut bewährt hat [3].
Bei dieser Methode wird der zu bestimmende Drei-Körper-Zustand nach endlich vielen Sturmschen Subsystemzuständen entwickelt. Das Einsetzen dieser Entwicklung in die nichtrelativistische stationäre Schrödingergleichung und deren Projektion auf die verwendeten Subsystemzustände führt in Ortsdarstellung auf ein System gekoppelter eindimensionaler Integro-Differentialgleichungen, welches zusammen mit den physikalischen Randbedingungen die Entwicklungskoeffizienten (*spectator functions*) bestimmt. Im Gegensatz zur Kernphysik, wo die *spectator functions* den dritten Körper nur als unbeteiligten "Zuschauer" beschreiben, gewinnen diese hier eine andere Bedeutung: Sie beinhalten vielmehr die gesamte physikalische Information, d.h. die Zwei-Fragment-Wechselwirkung und die daraus resultierende Relativbewegung beider Konstituenten.
Das System gekoppelter eindimensionaler Integro-Differentialgleichungen wird schließlich durch eine Diskretisierungsmethode numerisch gelöst. Dabei werden die gesuchten Zustände nach B-Splines entwickelt und das gesamte Gleichungssystem wiederum auf solche projiziert, um letztlich ein algebraisches Problem zu erhalten, welches unter Verwendung von Standardroutinen aus der numerischen Mathematik ohne weiteres ausgerechnet werden kann. Vorteilhaft wirkt sich bei dieser Vorgehensweise aus, daß sowohl Bindungs-, als auch Streurechnungen parallel behandelt werden können, weil es außer den verschiedenen physikalischen Randbedingungen keine strukturellen Unterschiede in beiden Fällen gibt.
Wie schon erwähnt, sind neben Bindungszuständen auch Streuzustände Bestandteil unserer Untersuchungen. Diesbezüglich liegt der Energiebereich unterhalb der elastischen Schwelle, d.h. ein möglicher Aufbruch des Targets, in unserem Fall des Deuterons, wird nicht betrachtet. Folglich enthalten sowohl der Eingangskanal als auch der Ausgangskanal dieser Streuprozesse je zwei Fragmente. Dabei unterscheidet man unter der Voraussetzung dreier ununterscheidbarer Körper, welche im Rahmen des Isospinformalismus für Nukleonen erfüllt ist, nachstehende Typen hinsichtlich Anordnung und Zustand der Streufragmente:

- Direkte Streuung: $a\,(bc) \rightarrow a\,(bc)$
- Umordnungsstreuung: $a\,(bc) \rightarrow b\,(ac)$
- Anregungsstreuung: $a\,(bc) \rightarrow a\,(bc)^*$

Üblicherweise werden zusätzlich die Prozesse einer weiteren Klassifikation bezüglich der Energiebilanz unterworfen. Einerseits gibt es die elastische Streuung, bei der das Projektil vor und nach dem Stoß dieselbe kinetische Energie besitzt, andererseits bezeichnet man alle weiteren Vorgänge als inelastische Streuung. In der obigen Aufzählung gehört die direkte Streuung immer zu den elastischen, Anregungsstreuung stets zu den inelastischen Streuprozessen, während Umordnungsstreuung abhängig vom jeweiligen physikalischen System elastisch (z.B. nnp) oder inelastisch (z.B. e^+ep) sein kann. Im allgemeinen sind bei einem bestimmten Streuvorgang mehrere oder alle dieser Alternativen energetisch möglich, so daß sie in den Rechnungen simultan behandelt werden

müssen. Im Falle des *nnp*-Systems, das, wie oben angedeutet, aus ununterscheidbaren Bestandteilen zusammengesetzt ist, finden Umordnungsprozesse bei jeder Energie statt und müssen statistisch berücksichtigt werden. Dies geschieht durch die Realisierung eines definierten Symmetrieverhaltens des Drei-Körper-Zustandes unter Austausch identischer Konstituenten (Pauli-Prinzip).
Der SCCF ähnelt sehr stark dem *Close Coupling*-Formalismus, der in der Atomphysik zu Beginn der dreißiger Jahre zum Zweck der Beschreibung der Streuung langsamer Elektronen an Atomen entwickelt wurde [4]. Dadurch wurde erstmals eine Untersuchung der bis dahin unberücksichtigten Einflüsse des Elektronenaustausches sowie der Verzerrung der einlaufenden Elektronenwelle durch das Potential des Targetatoms ermöglicht. Eine ähnliche Idee wurde auch in der Kernphysik unter dem Namen *Resonating Group Method* etwa fünf Jahre später von J. A. Wheeler verwendet [5, 6, 7]. Hier werden Atomkerne als Zustände vieler Nukleonen beschrieben, die sich fortlaufend zu immer neuen resonanten Untergruppen zusammenschießen.
Die Bezeichnung SCCF wurde in [1] eingeführt, um eine Abgrenzung zum Begriff *Close Coupling* vorzunehmen, da bei dieser Methode ausschließlich Subsystem-Bindungszustände zur Entwicklung benutzt werden. Der Versuch, diese Bindungszustände durch Sturmsche Zustände zu ersetzen, wurde in dieser Arbeitsgruppe schon in mehreren Arbeiten [1, 2, 8] unternommen und stellte sich als äußerst erfolgreich heraus sowohl für nukleare, als auch für atomare Systeme.
Da die Schrödinger-Gleichung bei solchen Entwicklungen ein strenges Minimum-Prinzip (Ritzsches Variationsprinzip) erfüllt, bietet sie gegenüber anderen dynamischen Gleichungen den großen Vorteil, daß die errechneten Bindungsenergien bei fortschreitender Hinzunahme von Entwicklungstermen streng monoton fallend gegen die wahre Bindungsenergie und analog die errechneten Streuphasen streng monoton wachsend gegen die wahren Streuphasen konvergieren.
Ferner besteht ohne nennenswerten Aufwand die Möglichkeit, wie z.B. beim Proton-Deuteron-System, kurzreichweitige starke Wechselwirkung und langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung zusammen zu behandeln, weil man bei Ortsraumrechnungen die explizite Form der Coulomb-Wellenfunktionen (konkluente hypergeometrische Reihen) kennt, während dies bei Impulsraummethoden lediglich unter Verwendung des Alt-Sandhas-Ziegelmann-Approaches [9] und großem numerischen Aufwand funktioniert.
Alle Rechnungen, die zu den in dieser Arbeit präsentierten Ergebnissen führten, wurden auf den Rechnern des CIP-Pools der Physikalischen Institute Bonn vorgenommen. Hierbei handelt es sich um einen Cluster aus 23 DEC AlphaStations $200^{4/100}$ und 2 DEC AlphaServers $400^{4/166}$.
Die verwendeten Programme bestehen einerseits aus einem von Dr. Ralf E. Kersting entwickelten FORTRAN-Paket, dessen Anwendungsbereich durch Hinzunahme weiterer Wechselwirkungen und/oder Veränderung der Teilchenmassen ausgedehnt werden kann, wobei bisher schon atomare und nukleare Rechnungen mit s-Wellenpotentialen durchführbar waren. Andererseits wurden die Routinen zur Berechnung der Potentialmatrizen für realistische Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen selbst dazu geschrieben. Diese bilden den eigentlichen Kern dieser Arbeit.

2 Koordinaten und Einheiten

2.1 Orte und Impulse

Zur Beschreibung der Orte $(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$ und Impulse $(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3)$ dreier Körper mit den Massen (m_1,m_2,m_3) im Schwerpuktsystem (CMS) verwenden wir Jacobi-Koordinaten:

$$\vec{\rho}_\alpha = \vec{x}_\beta - \vec{x}_\gamma, \tag{2.1}$$

$$\vec{r}_\alpha = \vec{x}_\alpha - \frac{m_\beta \vec{x}_\beta + m_\gamma \vec{x}_\gamma}{m_\beta + m\gamma}, \tag{2.2}$$

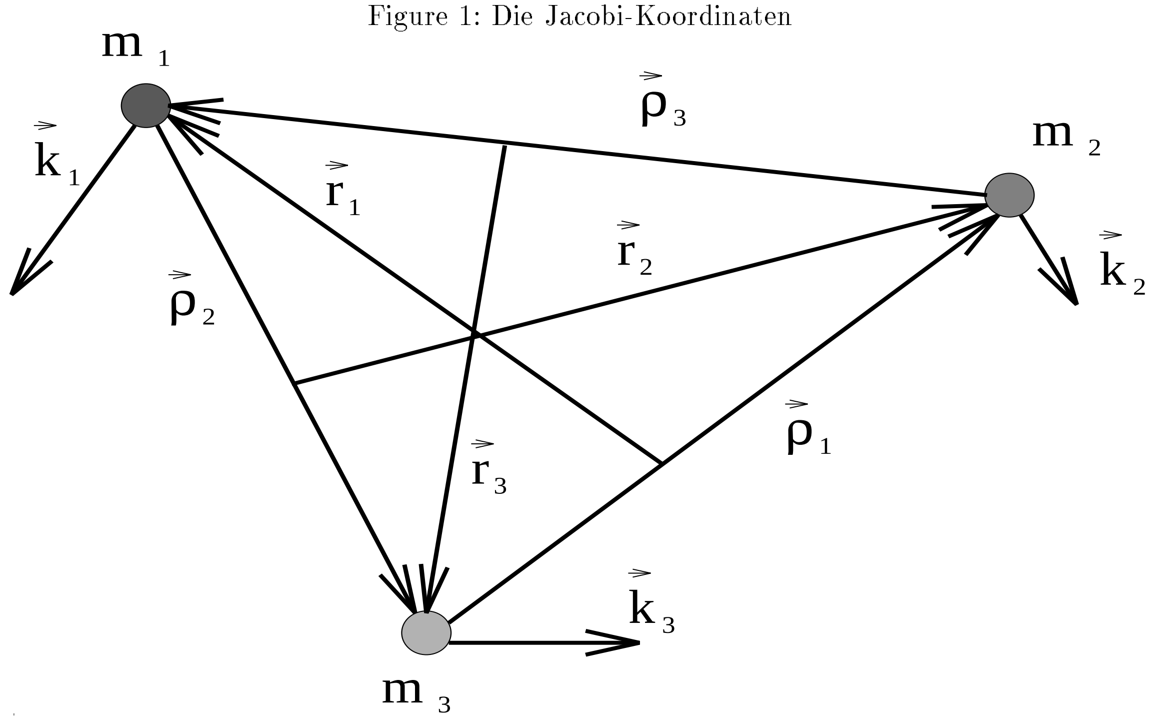
$$\vec{p}_\alpha = \frac{m_\gamma \vec{k}_\beta - m_\beta \vec{k}_\gamma}{m_\beta + m_\gamma}, \tag{2.3}$$

$$\vec{q}_\alpha = \frac{(m_\beta + m_\gamma)\vec{k}_\alpha - m_\alpha(\vec{k}_\beta + \vec{k}_\gamma)}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma}. \tag{2.4}$$

Sie fassen zwei der drei Nukleonen durch ihren Relativvektor $\vec{\rho}$ zu einem Subsystem zusammen, während die Lage des dritten Nukleons relativ zu dessen Schwerpunkt durch den Vektor $\vec{r}$ beschrieben wird. Die Vektoren $\vec{p}$ und $\vec{q}$ repräsentieren die entsprechenden kanonisch konjugierten Impulse.

Die verwendeten Koordinatensatzindizes (α, β, γ) stehen für eine zyklische Permutation von (1,2,3), falls diese in einer Formel gemeinsam vorkommen. In Abbildung 1 sind die Ortskoordinaten noch einmal graphisch dargestellt.

Figure 1: Die Jacobi-Koordinaten



Unter den drei Koordinatensätzen ist offenbar keiner besonders ausgezeichnet, denn sie sind gleichermaßen geeignet, eine asymptotische Konfiguration zu beschreiben. Da im CMS die Summe der Einzelimpulse $(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3)$ verschwindet, zerfällt die kinetische Energie H_0 des Drei-Körper-Systems mit obiger Koordinatenwahl in eine Summe aus kinetischer Subsystem- und kinetischer Relativergie:

$$H_0 = \frac{\vec{k}_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{\vec{k}_\beta^2}{2m_\beta} + \frac{\vec{k}_\gamma^2}{2m_\gamma} = \frac{\vec{q}_\alpha^2}{2M_\alpha} + \frac{\vec{p}_\alpha^2}{2\mu_\alpha} = \frac{\vec{q}_\beta^2}{2M_\beta} + \frac{\vec{p}_\beta^2}{2\mu_\beta} = \frac{\vec{q}_\gamma^2}{2M_\gamma} + \frac{\vec{p}_\gamma^2}{2\mu_\gamma}. \tag{2.5}$$

Die auftretenden reduzierten Massen ergeben sich durch:

$$\frac{1}{\mu_\alpha} = \frac{1}{m_\beta} + \frac{1}{m_\gamma}, \tag{2.6}$$

$$\frac{1}{M_\alpha} = \frac{1}{m_\alpha} + \frac{1}{m_\beta + m_\gamma} \tag{2.7}$$

und erfüllen folgende Symmetrierelation:

$$\mu_\alpha M_\alpha = \mu_\beta M_\beta = \mu_\gamma M_\gamma = \frac{m_\alpha m_\beta m_\gamma}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma}. \tag{2.8}$$

Die Transformationen zwischen verschiedenen Koordinatensätzen lauten:

$$\begin{pmatrix} \vec{\rho}_\alpha \\ \vec{r}_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\mu_\beta}{m_\gamma} & 1 \\ -\frac{\mu_\beta}{M_\alpha} & -\frac{\mu_\alpha}{m_\gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\beta \\ \vec{r}_\beta \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\beta \\ \vec{r}_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\mu_\alpha}{m_\gamma} & -1 \\ \frac{\mu_\alpha}{M_\beta} & -\frac{\mu_\beta}{m_\gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\alpha \\ \vec{r}_\alpha \end{pmatrix}, \tag{2.9}$$

$$\begin{pmatrix} \vec{p}_\alpha \\ \vec{q}_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\mu_\alpha}{m_\gamma} & \frac{\mu_\beta}{M_\alpha} \\ -1 & -\frac{\mu_\beta}{m_\gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{p}_\beta \\ \vec{q}_\beta \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \vec{p}_\beta \\ \vec{q}_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\mu_\beta}{m_\gamma} & -\frac{\mu_\alpha}{M_\beta} \\ 1 & -\frac{\mu_\alpha}{m_\gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{p}_\alpha \\ \vec{q}_\alpha \end{pmatrix}. \tag{2.10}$$

Entsprechend läßt sich jedes beliebige Koordinatenpaar aus dem jeweils übrigen Paar errechnen:

$$\begin{pmatrix} \vec{\rho}_\alpha \\ \vec{\rho}_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{M_\alpha}{m_\gamma} & \frac{M_\alpha}{\mu_\beta} \\ -\frac{M_\beta}{\mu_\alpha} & -\frac{M_\beta}{m_\gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{r}_\alpha \\ \vec{r}_\beta \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \vec{r}_\alpha \\ \vec{r}_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\mu_\alpha}{m_\gamma} & -1 \\ 1 & \frac{\mu_\beta}{m_\gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\alpha \\ \vec{\rho}_\beta \end{pmatrix}, \tag{2.11}$$

$$\begin{pmatrix} \vec{\rho}_\alpha \\ \vec{r}_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{m_\gamma}{\mu_\alpha} & -\frac{m_\gamma}{\mu_\alpha} \\ -\frac{m_\gamma}{M_\beta} & -\frac{m_\gamma}{\mu_\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\beta \\ \vec{r}_\alpha \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\beta \\ \vec{r}_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{m_\gamma}{\mu_\beta} & \frac{m_\gamma}{\mu_\beta} \\ \frac{m_\gamma}{M_\alpha} & -\frac{m_\gamma}{\mu_\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\alpha \\ \vec{r}_\beta \end{pmatrix}. \tag{2.12}$$

Der Transpositionsoperator $P_{\alpha\beta} \equiv P_{\beta\alpha}$, der alle Koordinaten und Quantenzahlen (aber nicht die Massen!) der Körper (α, β) vertauscht, kann jetzt bezüglich seiner Wirkung auf die Jacobi-Ortskoordinaten untersucht werden. Mit (2.1)und (2.2) ergibt sich:

$$P_{\alpha\beta}\,\vec{\rho}_\alpha = -\vec{\rho}_\beta,\; P_{\alpha\beta}\,\vec{r}_\alpha = \vec{r}_\beta - \left(\frac{\mu_\beta}{m_\beta + m_\gamma} - \frac{\mu_\alpha}{m_\gamma + m_\alpha}\right)\vec{\rho}_\beta, \tag{2.13}$$

$$P_{\beta\gamma}\,\vec{\rho}_\alpha = -\vec{\rho}_\alpha,\; P_{\beta\gamma}\,\vec{r}_\alpha = \vec{r}_\alpha - \left(\frac{\mu_\alpha}{m_\beta} - \frac{\mu_\alpha}{m_\gamma}\right)\vec{\rho}_\alpha, \tag{2.14}$$

$$P_{\gamma\alpha}\,\vec{\rho}_\alpha = -\vec{\rho}_\gamma,\; P_{\gamma\alpha}\,\vec{r}_\alpha = \vec{r}_\gamma - \left(\frac{\mu_\alpha}{m_\alpha + m_\beta} - \frac{\mu_\gamma}{m_\beta + m_\gamma}\right)\vec{\rho}_\gamma. \tag{2.15}$$

Die kinetische Energie H_0 des Systems kann mithilfe von (2.10) ausschließlich durch Subsystemimpulse jeweils zweier Koordinatensätze ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{M_\alpha}{\mu_\beta}\left(\frac{\vec{p}_\alpha^2}{2\mu_\alpha} + \frac{\vec{p}_\alpha\vec{p}_\beta}{m_\gamma} + \frac{\vec{p}_\beta^2}{2\mu_\beta}\right) = \frac{M_\beta}{\mu_\gamma}\left(\frac{\vec{p}_\beta^2}{2\mu_\beta} + \frac{\vec{p}_\beta\vec{p}_\gamma}{m_\alpha} + \frac{\vec{p}_\gamma^2}{2\mu_\gamma}\right) \\ &= \frac{M_\gamma}{\mu_\alpha}\left(\frac{\vec{p}_\gamma^2}{2\mu_\gamma} + \frac{\vec{p}_\gamma\vec{p}_\alpha}{m_\beta} + \frac{\vec{p}_\alpha^2}{2\mu_\alpha}\right). \end{aligned} \tag{2.16}$$

Das CMS wird dadurch definiert, daß der Schwerpunkt des Systems ruht, wohingegen im Laborsystem das Target fest liegt. Wir bestimmen nun mit (2.4) die Beziehungen zwischen den jeweiligen Relativimpulsen:

$$\vec{q}_\alpha^{\,2} = \left(\frac{M_\alpha}{m_\alpha}\right)^2 \vec{k}_\alpha^{\,2} \tag{2.17}$$

und den kinetischen Energien:

$$E_{kin}^{CMS} = \frac{M_\alpha}{m_\alpha} E_{kin}^{Lab}. \tag{2.18}$$

Wenn nun $\hat{E}$ die Bindungsenergie des Targetsubsystems und E^{CMS} die Gesamtenergie im CMS sind, erhält man:

$$E_{kin}^{Lab} = \frac{m_\alpha}{M_\alpha}\left(E^{CMS} - \hat{E}\right). \tag{2.19}$$

2.2 Bahndrehimpulse, Spins und Isospins

Die den Jacobi-Koordinaten zugeordneten Bahndrehimpulse werden wie folgt definiert:

$$\vec{L}_\alpha = \vec{\rho}_\alpha \times \vec{p}_\alpha \qquad \text{(Subsystem-Bahndrehimpuls)} \tag{2.20}$$

$$\vec{l}_\alpha = \vec{r}_\alpha \times \vec{q}_\alpha \qquad \text{(Relativsystem-Bahndrehimpuls).} \tag{2.21}$$

Neben ihrer Lage im Phasenraum nehmen die drei Nukleonen auch eine Position im Spinraum und im Isospinraum ein. Nukleonen sind Fermionen, d.h. ihre drei Spins $(\vec{s}_\alpha, \vec{s}_\beta, \vec{s}_\gamma)$ sind Doublets mit den Projektionen 'up' und 'down'. Das selbe gilt für die drei Isospins $(\vec{t}_\alpha, \vec{t}_\beta, \vec{t}_\gamma)$, wobei Isospin-'up'-Zustände Protonen und Isospin-'down'-Zustände Neutronen bezeichnen. Ihre Kopplungsreihenfolge wählen wir passend zu den Jacobi-Koordinaten:

$$\vec{S}_\alpha = \vec{s}_\beta + \vec{s}_\gamma \qquad \text{(Subsystem-Spin),} \tag{2.22}$$

$$\vec{T}_\alpha = \vec{t}_\beta + \vec{t}_\gamma \qquad \text{(Subsystem-Isospin).} \tag{2.23}$$

Für die Drei-Körper-Drehimpulse wählen wir folgende Additionsreihenfolge:

$$\vec{J}_\alpha = \vec{L}_\alpha + \vec{S}_\alpha \qquad \text{(Subsystem-Drehimpuls),} \tag{2.24}$$

$$\vec{k}_\alpha = \vec{J}_\alpha + \vec{s}_\alpha \qquad \text{(Kanalspin),} \tag{2.25}$$

$$\vec{\Gamma}_\alpha = \vec{k}_\alpha + \vec{l}_\alpha \qquad \text{(Gesamtdrehimpuls),} \tag{2.26}$$

$$\vec{I}_\alpha = \vec{T}_\alpha + \vec{t}_\alpha \qquad \text{(Gesamt-Isospin).} \tag{2.27}$$

Warum es sinnvoll ist, gerade diese Reihenfolge zu verwenden, werden wir in Kapitel 3.2 erläutern.

Als letztes definieren wir noch den Paritätsoperator Π, der den gesamten Raum am Koordinatenursprung spiegelt und die Eigenwerte

$$\pi = (-1)^{L+l} \qquad \text{(Gesamt-Parität)} \tag{2.28}$$

besitzt.

2.3 Einheiten

Zur Vereinfachung aller folgenden Gleichungen setzen wir die Zahlenwerte für das Plancksche Wirkungsquantum $\hbar$ und für 2μ gleich 1. Damit treten in der Schrödinger-Gleichung des Targetsubsystems keine Einheiten mehr auf. Aus dieser Definition folgt eine Beziehung, die die Energieskala festlegt:

$$1 = \frac{(\hbar c)^2}{2\mu c^2}. \tag{2.29}$$

Für die Größe $\hbar c$ gilt:

$$\hbar c = 197,327053 \text{ MeV fm}. \tag{2.30}$$

Im Rahmen des Isospin-Formalismus vernachlässigen wir die Differenz zwischen Protonenmasse m_p und Neutronenmasse m_n und setzen den Mittelwert an:

$$m_\alpha \equiv m_\beta \equiv m_\gamma = \frac{m_p + m_n}{2} = m. \tag{2.31}$$

Daraus ergibt sich mit den Massen

$$\begin{aligned} m_p &= 938,27231 \text{ MeV}/c^2, & (2.32)\\ m_n &= 939,56563 \text{ MeV}/c^2 & (2.33) \end{aligned}$$

einerseits folgender Zusammenhang zwischen Energie- und Längeneinheit:

$$1 = 41,47 \text{ MeV fm}^2 \tag{2.34}$$

und andererseits konkret für die reduzierten Massen:

$$\mu = \tfrac{1}{2}, \ M = \tfrac{2}{3}. \tag{2.35}$$

Statt (2.9) und (2.10) erhalten wir damit die speziellen Koordinatensatztransformationen:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\alpha \\ \vec{r}_\alpha \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 1 \\ -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\beta \\ \vec{r}_\beta \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\beta \\ \vec{r}_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -1 \\ \frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\alpha \\ \vec{r}_\alpha \end{pmatrix}, & (2.36)\\ \begin{pmatrix} \vec{p}_\alpha \\ \vec{q}_\alpha \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{3}{4} \\ -1 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{p}_\beta \\ \vec{q}_\beta \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \vec{p}_\beta \\ \vec{q}_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{3}{4} \\ 1 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{p}_\alpha \\ \vec{q}_\alpha \end{pmatrix}. & (2.37) \end{aligned}$$

Für den Transpositionsoperator ergibt sich:

$$P_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\alpha \\ \vec{r}_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\vec{\rho}_\beta \\ \vec{r}_\beta \end{pmatrix}, P_{\beta\gamma} \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\alpha \\ \vec{r}_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\vec{\rho}_\alpha \\ \vec{r}_\alpha \end{pmatrix}, P_{\gamma\alpha} \begin{pmatrix} \vec{\rho}_\alpha \\ \vec{r}_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\vec{\rho}_\gamma \\ \vec{r}_\gamma \end{pmatrix}. \tag{2.38}$$

Mit (2.5) erhält man für die kinetische Energie:

$$H_0 = \tfrac{4}{3}\left(\vec{p}_\alpha^{\,2} + \vec{p}_\alpha\vec{p}_\beta + \vec{p}_\beta^{\,2}\right) = \tfrac{4}{3}\left(\vec{p}_\beta^{\,2} + \vec{p}_\beta\vec{p}_\gamma + \vec{p}_\gamma^{\,2}\right) = \tfrac{4}{3}\left(\vec{p}_\gamma^{\,2} + \vec{p}_\gamma\vec{p}_\alpha + \vec{p}_\alpha^{\,2}\right). \tag{2.39}$$

3 Der Hamilton-Operator

Das Drei-Nukleonen-System wird als abgeschlossen angenommen, d.h. der Wechselwirkungsoperator V hängt lediglich von den relativen Lagen der Nukleonen untereinander ab. Folglich können wir die geradlinig gleichförmige Bewegung des Schwerpunkts abspalten und erhalten unter der Voraussetzung, daß es sich ausschließlich um paarweise wechselwirkende Körper handelt, für den nichtrelativistischen Hamilton-Operator im CMS:

$$H = H_0 + V = \tfrac{3}{4}\vec{q}_\alpha^{\,2} + \vec{p}_\alpha^{\,2} + V_\alpha + V_\beta + V_\gamma. \tag{3.1}$$

Unter $V_\alpha \equiv V_{\beta\gamma} \equiv V_{\gamma\beta}$ verstehen wir die Wechselwirkung des Nukleonenpaares(β, γ).
Mit den üblichen Abkürzungen

$$\begin{aligned} \hat{H}_\alpha &= \vec{p}_\alpha^{\,2} + V_\alpha && \text{(Subsystem-Hamilton-Operator)}, && (3.2)\\ H_\alpha &= \tfrac{3}{4}\vec{q}_\alpha^{\,2} + \hat{H}_\alpha && \text{(Kanal-Hamilton-Operator)}, && (3.3)\\ \bar{V}_\alpha &= V_\beta + V_\gamma && \text{(Kanal-Wechselwirkung)} && (3.4) \end{aligned}$$

schreibt man letztlich analog zum Zwei-Körper-Problem:

$$H = H_\alpha + \bar{V}_\alpha. \tag{3.5}$$

Dabei beschreiben der Kanal-Hamilton-Operator H_α die freie Relativbewegung der beiden Fragmente α und (β, γ) und die Kanal-Wechselwirkung $\bar{V}_\alpha$ die gesamte dazwischen herrschende Wechselwirkung. Beide Operatoren übernehmen also die selbe Funktion wie die entsprechenden im Zwei-Körper-System. Die zu H_α gehörenden Eigenzustände $|\,\Phi_\nu\,\rangle_\alpha$, die Kanalzustände genannt werden, und die Eigenwerte $E_{\alpha\nu}$ ergeben sich aus der Eigenwertgleichung:

$$H_\alpha\,|\,\Phi_\nu\,\rangle_\alpha = E_{\alpha\nu}\,|\,\Phi_\nu\,\rangle_\alpha \tag{3.6}$$

Da in unserem Fall kurzreichweitige Kanal-Wechselwirkungen vorliegen, sind die Eigenzustände Produkte aus ebener Welle und Subsystem-Bindungszustand, während die zugehörigen Energieeigenwerte Summen aus Energie der ebenen Welle und Subsystem-Bindungsenergie sind:

$$\begin{aligned} |\,\Phi_\nu\,\rangle_\alpha &= |\,\vec{q}\,\rangle_\alpha |\,\phi_\nu\,\rangle_\alpha, && (3.7)\\ E_{\alpha\nu} &= \tfrac{3}{4}q_\alpha^2 + \hat{E}_{\alpha\nu}. && (3.8) \end{aligned}$$

In Anhang B werden schließlich die Partialwellenentwicklungen der Zustände $|\,\vec{q}\,\rangle_\alpha$ in Ortsdarstellung angegeben.

3.1 Das Nukleon-Nukleon-Potential

Zur Beschreibung der Wechselwirkung V_α verwenden wir eines der sogenannten realistischen Potentiale. Es ist ein zentrales, spin-isospin-abhängiges, ladungsunabhängiges Potential mit Spin-Bahn-Kopplung. Die Besonderheit aller realistischen Potentiale ist das Auftreten der Tensorkraft, die in den Spin-Triplet-Kanälen die Nichtdiagonalität im Bahndrehimpulsraum zur Folge hat. Diese bewirkt die d-Wellenbeimischung von etwa 5% im Deuteron. Die Matrixelemente der realistischen Potentiale lauten:

$$\begin{aligned} &{}_\alpha\langle\,\rho(LS)JM_J;TM_T\,|\,V_\alpha\,|\,\rho'(L'S')J'M_J';T'M_T'\,\rangle_\alpha \\ &= \delta_{SS'}\,\delta_{JJ'}\,\delta_{M_JM_J'}\,\delta_{TT'}\,\delta_{M_TM_T'}\,\frac{\delta(\rho'-\rho)}{\rho'^2}\,V_{LL'}^{SJT}(\rho'), \end{aligned} \tag{3.9}$$

mit

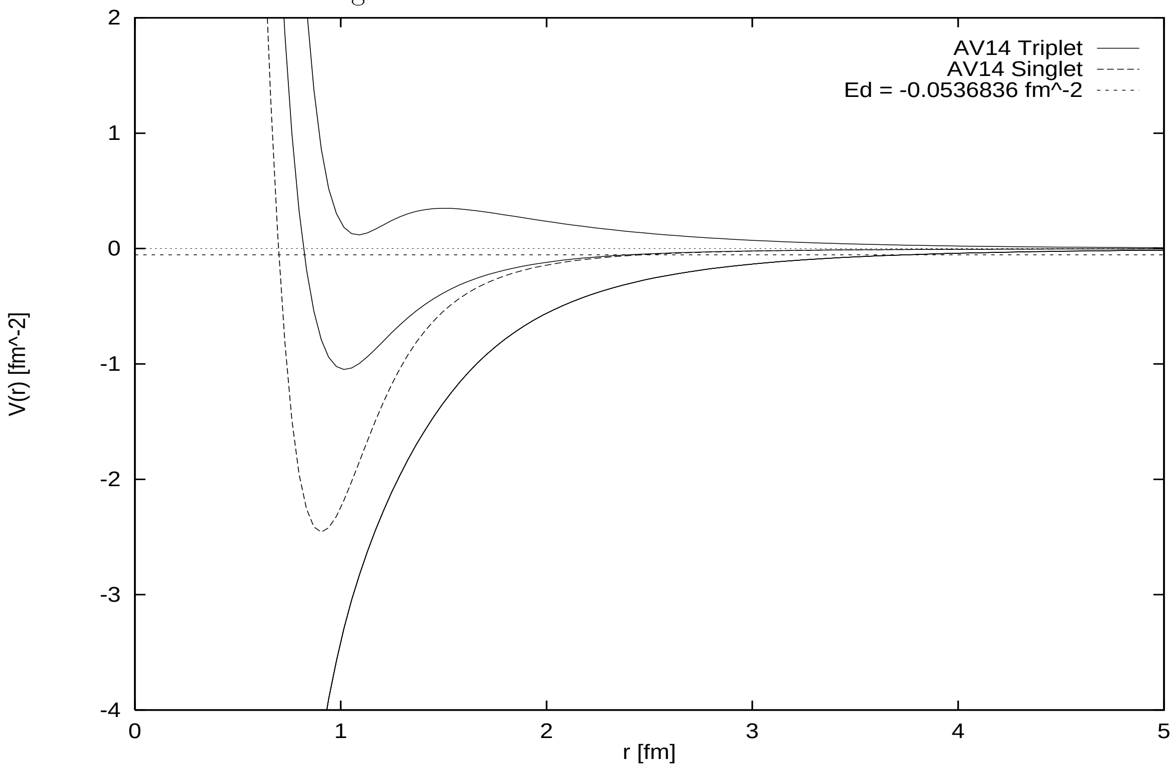
$$
\begin{aligned}
L &= L' && \text{für} \quad S = 0, && (3.10)\\
\mid L - L' \mid &= 0, 2 && \text{für} \quad S = 1 \qquad \text{(Tensoraufspaltung)}. && (3.11)
\end{aligned}
$$

Wegen des Pauli-Prinzips, das Antisymmetrie der Zustände unter Nukleonenaustausch verlangt, sind nur die Matrixelemente mit

$$(-1)^{L+S+T} = -1 \tag{3.12}$$

von Null verschieden.
In dieser Arbeit wählen wir als nukleare Wechselwirkung das aus 14 Operatorkomponenten zusammengesetzte Argonne v_{14}-Potential [3], das wir im folgenden kurz AV14-Potential nennen. Eine graphische Darstellung der Potentialverläufe für die Kanäle $^1S_0$ (Anti-Deuteron) und $^3S_1 - {}^3D_1$ (Deuteron) zusammen mit der Bindungsenergie des Deuterons E_d befindet sich in Abbildung 2. Man erkennt, daß sich für den Spin-Triplet-Kanal erwartungsgemäß drei Linien

Figure 2: Die Verläufe des AV14-Potentials



ergeben, nämlich V_{00}^{110} mit einer Nullstelle, V_{22}^{110} ohne Nullstelle oberhalb von V_{00}^{110} und $V_{02}^{110} \equiv V_{20}^{110}$. Im Spin-Singlet-Kanal gibt es zwar einen attraktiven Wechselwirkungsbereich, der jedoch nicht zur Bildung einer Bindung ausreicht. Tatsächlich unterstützt das Potential einen virtuellen Bindungszustand, das sogenannte Anti-Deuteron, auf dem zweiten Blatt der komplexen Energieebene, der sich durch eine negative, ungewöhnlich betragsgroße Streulänge äußert.

3.2 Die Erhaltungsgrößen

Das wirksame Potential legt die Konstanten der Bewegung fest, deren zugehörige Operatoren miteinander vertauschen und zu denen simultane Eigenfunktionen existieren. Offenbar sind folgende Größen erhalten: die Gesamtenergie, die Gesamtparität, Betrag und Richtung des

Gesamt-Drehimpulses, sowie Betrag und Richtung des Gesamt-Isospins, letzteres bedeutet Ladungserhaltung. Wir erhalten also einen Satz kommutierender Operatoren:

$$\left\{H, \Pi, \vec{\Gamma}^{\,2}, \Gamma_z, \vec{I}^{2}, I_z\right\}. \tag{3.13}$$

Unter Berücksichtigung von (3.9) verwenden wir folglich die sogenannte Kanalspinbasis zur Beschreibung der auftretenden Zustände im Orts-Spin-Raum:

$$|\, r\rho(((LS)J\tfrac{1}{2})kl)\Gamma M_\Gamma \,\rangle_\alpha \tag{3.14}$$

und die gekoppelte Basis im Isospinraum:

$$|\,(T\tfrac{1}{2})IM_I\,\rangle_\alpha. \tag{3.15}$$

Zur Verkürzung der Notation führen wir schließlich noch drei Multiindizes ein:

Table 1: Definition und Bedeutung der Multiindizes

Gültigkeit	Index	Quantenzahlen
Subsystem	σ	$\{SJT\}$
Relativsystem	τ	$\{kl\}$
Gesamtsystem	ω	$\{\pi\Gamma M_\Gamma I M_I\}$

und können für die auftretenden Partialwellen einfach $|\,(\sigma\tau)\omega\,\rangle$ schreiben. Die Bahndrehimpulsquantenzahl L nimmt eine Sonderstellung ein, weil sie bei gekoppelten Kanälen, in denen $S = 1$ gilt, gemäß der für Drehimpulsaddition geltenden Dreiecksungleichung die beiden Werte $J+1$ bzw. $J-1$ annimmt, und wird daher separat notiert. Es gilt somit immer:

$$|\,(\sigma\tau)\omega\,\rangle = \sum_L |\,(L\sigma\tau)\omega\,\rangle. \tag{3.16}$$

Anschaulich kann man sich diese Partialwellen als zweikomponentige Vektoren mit einem Eintrag für den kleineren Bahndrehimpuls L und einem für $L+2$ vorstellen, d.h. man erhält dann zwei Wellenfunktionen.
Die folgenden Tabellen zeigen die von uns gewählte Numerierung der Subsystem- und Relativsystemkanäle für Doublet- und Quartet-Zustände gerader und ungerader Parität unter der Einschränkung $J \leq 1$. Die Größen σ und τ zählen jeweils die Subsystem- bzw. Drei-Körper-Kanäle durch.
Diese Tabellen können selbstverständlich auch für beliebig große Werte von J erweitert werden, was jedoch die Kanalzahlen drastisch erhöht. An dieser Stelle zeigt sich der Vorteil der Kanalspinbasis im Gegensatz zur möglichen Alternative der Gesamtspinbasis, bei der folgende Kopplung vorgenommen wird:

$$|\,((LS)J(l\tfrac{1}{2})j)\Gamma M_\Gamma\,\rangle_\alpha. \tag{3.17}$$

Ihr Nachteil liegt darin, daß außer bei den Doublet-Zuständen ($\Gamma = \frac{1}{2}$) mehr Drei-Körper-Kanäle auftreten, d.h. es gibt mehr Möglichkeiten, mit obiger Additionsreihenfolge den gleichen Wert für Γ zu erzeugen als dies bei der Kanalspinbasis der Fall ist, was den rechnerischen Aufwand deutlich erhöht.

Table 2: Relativsystemkanäle für $\Gamma^\pi = \frac{1}{2}^+$

$\Gamma^\pi = \frac{1}{2}^+$									
τ	$^{2k+1}l_\Gamma$	σ	$^{2S+1}L_J$	J	L	S	T	k	l
1	$^2S_{1/2}$	1	$^1S_0$	0	0	0	1	$\frac{1}{2}$	0
2	$^2P_{1/2}$	2	$^3P_0$	0	1	1	1	$\frac{1}{2}$	1
3	$^2P_{1/2}$	3	$^1P_1$	1	1	0	0	$\frac{1}{2}$	1
4	$^4P_{1/2}$	3	$^1P_1$	1	1	0	0	$\frac{3}{2}$	1
5	$^2S_{1/2}$	4	$^3S_1 - {}^3D_1$	1	0/2	1	0	$\frac{1}{2}$	0
6	$^4D_{1/2}$	4	$^3S_1 - {}^3D_1$	1	0/2	1	0	$\frac{3}{2}$	2
7	$^2P_{1/2}$	5	$^3P_1$	1	1	1	1	$\frac{1}{2}$	1
8	$^4P_{1/2}$	5	$^3P_1$	1	1	1	1	$\frac{3}{2}$	1

Table 3: Relativsystemkanäle für $\Gamma^\pi = \frac{1}{2}^-$

$\Gamma^\pi = \frac{1}{2}^-$									
τ	$^{2k+1}l_\Gamma$	σ	$^{2S+1}L_J$	J	L	S	T	k	l
1	$^2P_{1/2}$	1	$^1S_0$	0	0	0	1	$\frac{1}{2}$	1
2	$^2S_{1/2}$	2	$^3P_0$	0	1	1	1	$\frac{1}{2}$	0
3	$^2S_{1/2}$	3	$^1P_1$	1	1	0	0	$\frac{1}{2}$	0
4	$^4D_{1/2}$	3	$^1P_1$	1	1	0	0	$\frac{3}{2}$	2
5	$^2P_{1/2}$	4	$^3S_1 - {}^3D_1$	1	0/2	1	0	$\frac{1}{2}$	1
6	$^4P_{1/2}$	4	$^3S_1 - {}^3D_1$	1	0/2	1	0	$\frac{3}{2}$	1
7	$^2S_{1/2}$	5	$^3P_1$	1	1	1	1	$\frac{1}{2}$	0
8	$^4D_{1/2}$	5	$^3P_1$	1	1	1	1	$\frac{3}{2}$	2

Table 4: Relativsystemkanäle für $\Gamma^\pi = \frac{3}{2}^+$

$\Gamma^\pi = \frac{3}{2}^+$									
τ	${}^{2k+1}l_\Gamma$	σ	${}^{2S+1}L_J$	J	L	S	T	k	l
1	${}^2D_{3/2}$	1	${}^1S_0$	0	0	0	1	$\frac{1}{2}$	2
2	${}^2P_{3/2}$	2	${}^3P_0$	0	1	1	1	$\frac{1}{2}$	1
3	${}^2P_{3/2}$	3	${}^1P_1$	1	1	0	0	$\frac{1}{2}$	1
4	${}^4P_{3/2}$	3	${}^1P_1$	1	1	0	0	$\frac{3}{2}$	1
5	${}^4F_{3/2}$	3	${}^1P_1$	1	1	0	0	$\frac{3}{2}$	3
6	${}^2D_{3/2}$	4	${}^3S_1 - {}^3D_1$	1	0/2	1	0	$\frac{1}{2}$	2
7	${}^4S_{3/2}$	4	${}^3S_1 - {}^3D_1$	1	0/2	1	0	$\frac{3}{2}$	0
8	${}^4D_{3/2}$	4	${}^3S_1 - {}^3D_1$	1	0/2	1	0	$\frac{3}{2}$	2
9	${}^2P_{3/2}$	5	${}^3P_1$	1	1	1	1	$\frac{1}{2}$	1
10	${}^4P_{3/2}$	5	${}^3P_1$	1	1	1	1	$\frac{3}{2}$	1
11	${}^4F_{3/2}$	5	${}^3P_1$	1	1	1	1	$\frac{3}{2}$	3

Table 5: Relativsystemkanäle für $\Gamma^\pi = \frac{3}{2}^-$

$\Gamma^\pi = \frac{3}{2}^-$									
τ	${}^{2k+1}l_\Gamma$	σ	${}^{2S+1}L_J$	J	L	S	T	k	l
1	${}^2P_{3/2}$	1	${}^1S_0$	0	0	0	1	$\frac{1}{2}$	1
2	${}^2D_{3/2}$	2	${}^3P_0$	0	1	1	1	$\frac{1}{2}$	2
3	${}^2D_{3/2}$	3	${}^1P_1$	1	1	0	0	$\frac{1}{2}$	2
4	${}^4S_{3/2}$	3	${}^1P_1$	1	1	0	0	$\frac{3}{2}$	0
5	${}^4D_{3/2}$	3	${}^1P_1$	1	1	0	0	$\frac{3}{2}$	2
6	${}^2P_{3/2}$	4	${}^3S_1 - {}^3D_1$	1	0/2	1	0	$\frac{1}{2}$	1
7	${}^4P_{3/2}$	4	${}^3S_1 - {}^3D_1$	1	0/2	1	0	$\frac{3}{2}$	1
8	${}^4F_{3/2}$	4	${}^3S_1 - {}^3D_1$	1	0/2	1	0	$\frac{3}{2}$	3
9	${}^2D_{3/2}$	5	${}^3P_1$	1	1	1	1	$\frac{1}{2}$	2
10	${}^4S_{3/2}$	5	${}^3P_1$	1	1	1	1	$\frac{3}{2}$	0
11	${}^4D_{3/2}$	5	${}^3P_1$	1	1	1	1	$\frac{3}{2}$	2

Man kann die Subsystem-Kanäle auch durch $J \leq 1^+$ beschränken, was insgesamt zu folgenden Relativsystem-Kanal-Gruppen führt:

Table 6: Relativsystem-Kanal-Gruppen

		$\Gamma = \frac{1}{2}$		$\Gamma = \frac{3}{2}$	
Gruppe	Notation	Kanalanzahl	Kanalnummern	Kanalanzahl	Kanalnummern
1	$J \leq 1^+$	3	1,5,6	4	1,6-8
2	$J \leq 1$	8	1-8	11	1-11

In dieser Arbeit setzen wir durchgängig $J \leq 1^+$, weil man so die geringste Kanalanzahl erhält, die man benötigt, um eine sinnvolle Rechnung durchführen zu können. Zum Testen des in Kapitel 5 vorgestellten Formalismus erscheint dies vollkommen ausreichend.

3.3 Das Pauli-Prinzip

Die drei Transpositionsoperatoren $P_{\alpha\beta}$ vertauschen alle mit dem Hamiltonoperator H, d.h.:

$$[H, P_{\alpha\beta}] = 0. \tag{3.18}$$

Die Eigenzustände $|\,\Psi\,\rangle$ von H müssen total antisymmetrisch unter Nukleonenaustausch sein, da es sich im Rahmen des Isospinformalismus um ununterscheidbare Fermionen handelt. Wir konstruieren diese mit dem Antisymmetrisierungsoperator $\mathcal{A}$

$$\mathcal{A} = \tfrac{1}{6}(1 - P_{12} - P_{23} - P_{31} + P_{12}P_{23} + P_{21}P_{13}) \tag{3.19}$$

unter Verwendung der Antisymmetrie des Subsystems (3.12),(2.38)

$$\begin{aligned} P_{\alpha\beta}\,|\,\psi(\sigma\tau)\omega\,\rangle_\alpha &= -|\,\psi(\sigma\tau)\omega\,\rangle_\beta, && (3.20)\\ P_{\alpha\beta}\,|\,\psi(\sigma\tau)\omega\,\rangle_\beta &= -|\,\psi(\sigma\tau)\omega\,\rangle_\alpha, && (3.21)\\ P_{\alpha\beta}\,|\,\psi(\sigma\tau)\omega\,\rangle_\gamma &= -|\,\psi(\sigma\tau)\omega\,\rangle_\gamma && (3.22) \end{aligned}$$

in folgender Weise:

$$|\,\Psi\,\rangle = 3\mathcal{A}\sum_{\sigma\tau\omega}|\,\psi(\sigma\tau)\omega\,\rangle_1 = \sum_{\sigma\tau\omega}\sum_{\alpha=1}^{3}|\,\psi(\sigma\tau)\omega\,\rangle_\alpha. \tag{3.23}$$

Es ist zu beachten, daß die Summen über σ, τ, ω nur Zustände mit der selben Parität $\pi = (-1)^{L+l}$ beinhalten, da das Ergebnis natürlich ein Zustand mit definierter Parität sein muß.
Die Summation enthält in zweifacher Hinsicht unendlich viele Terme: Zuerst bezüglich ω und weiterhin bei festem ω bezüglich σ, τ. Das bedeutet, daß man diese Summen in numerischen Rechnungen nur nähern kann, weil man sie an einer geeigneten Stelle abbrechen muß. Diese Tatsache beruht auf dem Verfahren der Partialwellenentwicklung und ist nicht zu umgehen.

4 Die Sturmschen Zustände

4.1 Einführung und Motivation

Die Überlegungen dieses Kapitels beziehen sich auf ein beliebiges Subsystem zweier Nukleonen, so daß wir den Koordinatensatzindex weglassen können.
Zunächst betrachten wir Bindungszustände, d.h. die normierbaren Lösungen der stationären Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned} \hat{H} \,|\, \phi_\nu \,\rangle &= \hat{E}_\nu \,|\, \phi_\nu \,\rangle, \\ \langle\, \phi_\nu \,|\, \phi_\nu \,\rangle &= 1. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Da die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung als effektive Wechselwirkung bisher nur durch Potentialmodelle mit sehr komplizierten Parametrisierungen beschrieben werden kann, muß (4.1) im allgemeinen numerisch gelöst werden. Zur Entwicklung eines Drei-Körper-Zustandes nach Subsystemzuständen werden häufig die Bindungszustände benutzt. Diese enthalten kein Kontinuum, spannen also nicht den gesamten Subsystem-Hilbertraum auf und können folglich auch keine virtuellen Anregungen des Subsystems in das kontinuierliche Spektrum beschreiben. Man verwendet daher z.B. bei atomaren Systemen meist zusätzliche Effektiv-Wechselwirkungen oder Pseudo-Zustände.
Die NN-Wechselwirkung hat eine sehr kurze Reichweite, die im fm-Bereich liegt, und unterstützt lediglich einen einzigen Spin-Triplet-Bindungszustand, das Deuteron ($\sigma = 4$). In diesem Fall kann eine Entwicklung nach Subsystem-Bindungszuständen nicht zu einem befriedigenden Ergebnis führen, man erhält die sogenannte Quartet-Grundzustandsnäherung oder auch *static exchange approximation.* Zur Lösung dieses Problems benutzen wir statt der Bindungszustände die Sturmschen Funktionen, deren Eigenschaften wir jetzt ausführlich diskutieren werden.
Der Subsystem-Hamiltonoperator $\hat{H}$ besitzt ein kontinuierliches Eigenwert-Spektrum, weil das Potential V asymptotisch verschwindet und der freie Subsystem-Hamiltonoperator $\hat{H}_0$ unbeschränkt ist. Kompakte selbstadjungierte Operatoren haben jedoch ein diskretes und beschränktes Spektrum mit dem Häufungspunkt Null [10]. Wir betrachten nun den mit $\hat{H}_0$ eng verwandten freien Green-Operator

$$\hat{G}_0(z) = \left(z - \vec{p}^{\,2}\right)^{-1}. \tag{4.2}$$

Für negative reelle Argumente der komplexen Energieebene $z = \hat{E} = -|\hat{E}| < 0$ ist er negativ und reell:

$$\hat{G}_0(\hat{E}) = \left(-|\hat{E}| - \vec{p}^{\,2}\right)^{-1} = -|\hat{G}_0(\hat{E})|, \tag{4.3}$$

ansonsten außer für Null und positive reelle Argumente beschränkt. Damit können wir nun den symmetrischen, selbstadjungierten Operator D konstruieren

$$D(\hat{E}) = -|\hat{G}_0(\hat{E})|^{\frac{1}{2}} V |\hat{G}_0(\hat{E})|^{\frac{1}{2}}, \tag{4.4}$$

der für reelle, kurzreichweitige Wechselwirkungen V kompakt ist. Daraus folgt die Existenz eines vollständigen Orthonormalsystems im Hilbertraum, bestehend aus den Eigenzuständen $|\, \xi_\nu \,\rangle$ von D:

$$D(\hat{E}) \,|\, \xi_\nu(\hat{E}) \,\rangle = \eta_\nu(\hat{E}) \,|\, \xi_\nu(\hat{E}) \,\rangle, \tag{4.5}$$

$$\langle\, \xi_\nu(\hat{E}) \,|\, \xi_{\nu'}(\hat{E}) \,\rangle = \delta_{\nu\nu'}. \tag{4.6}$$

Die Eigenwerte $\eta_\nu(\hat{E})$ bilden eine diskrete Menge reeller Zahlen und erfüllen fast alle $\left|\eta_\nu(\hat{E})\right| < 1$ [11]. Attraktive Potentiale besitzen nur positive (attraktive), repulsive Potentiale nur negative

(repulsive) Eigenwerte, während bei Wechselwirkungen mit attraktiven und repulsiven Bereichen, wie dem in dieser Arbeit verwandten AV14-Potential, Eigenwerte beider Vorzeichen vorkommen.
Mit der Umbenennung

$$| \xi_\nu(\hat{E}) \rangle = |\hat{G}_0(\hat{E})|^{\frac{1}{2}} \, | \chi_\nu(\hat{E}) \rangle \tag{4.7}$$

ergibt sich aus (4.5) die Eigenwertgleichung des Lippmann-Schwinger-Operators:

$$V\hat{G}_0(\hat{E}) \, | \chi_\nu(\hat{E}) \rangle = \eta_\nu(\hat{E}) \, | \chi_\nu(\hat{E}) \rangle, \tag{4.8}$$

dessen Eigenzustände $| \chi_\nu(\hat{E}) \rangle$ (Sturmsche) Formfaktoren heißen. Wir setzen jetzt

$$| \chi_\nu(\hat{E}) \rangle = V \, | \phi_\nu(\hat{E}) \rangle \tag{4.9}$$

und erhalten die Sturmschen Zustände $| \phi_\nu(\hat{E}) \rangle$. Einsetzen in (4.8) liefert die äquivalente Eigenwertgleichung

$$\hat{G}_0(\hat{E})V \, | \phi_\nu(\hat{E}) \rangle = \eta_\nu(\hat{E}) \, | \phi_\nu(\hat{E}) \rangle. \tag{4.10}$$

Wenn wir nun die Gleichung mit $\hat{G}_0(\hat{E})^{-1}$ multiplizieren und durch $\eta_\nu(\hat{E})$ dividieren, führt dies auf eine modifizierte stationäre Schrödingergleichung:

$$\left[\vec{p}^{\,2} + \frac{V}{\eta_\nu(\hat{E})}\right] \, | \phi_\nu(\hat{E}) \rangle = \hat{E} \, | \phi_\nu(\hat{E}) \rangle. \tag{4.11}$$

Die Sturmschen Zustände sind also normierbare Eigenzustände eines abzählbaren Satzes verschiedener Hamiltonoperatoren zum selben Energieeigenwert und bilden daher allein kein Orthonormalsystem, ebenso wie die Sturmschen Formfaktoren. Sie sind jedoch beide bei festem $\hat{E}$ vollständig im Hilbertraum und bilden zusammen ein Biorthogonalsystem:

$$\langle \chi_\nu(\hat{E}) \, | \, \phi_{\nu'}(\hat{E}) \rangle = \langle \phi_\nu(\hat{E}) \, | \, V \, | \, \phi_{\nu'}(\hat{E}) \rangle = -\delta_{\nu\nu'} \, \eta_\nu(\hat{E}). \tag{4.12}$$

Damit finden wir für die Zerlegung des Einsoperators (Vollständigkeitsrelation):

$$\begin{aligned} 1 &= -\sum_\nu | \chi_\nu(\hat{E}) \rangle \frac{1}{\eta_\nu(\hat{E})} \langle \phi_\nu(\hat{E}) | && (4.13) \\ &= -\sum_\nu | \phi_\nu(\hat{E}) \rangle \frac{1}{\eta_\nu(\hat{E})} \langle \chi_\nu(\hat{E}) |. && (4.14) \end{aligned}$$

Endliche Teilsummen von (4.13) und (4.14) stellen keine physikalischen Projektionsoperatoren dar, da sie wegen der offensichtlichen Asymmetrie nicht hermitesch sind.
Durch die gewählte Normierung ergibt sich eine besonders einfache Spektralzerlegung des Operators $\hat{G}_0(\hat{E})V$:

$$\begin{aligned} \hat{G}_0(\hat{E})V &= -\sum_\nu | \phi_\nu(\hat{E}) \rangle \, \langle \chi_\nu(\hat{E}) |, && (4.15) \\ &= -\sum_\nu | \chi_\nu(\hat{E}) \rangle \, \langle \phi_\nu(\hat{E}) |, && (4.16) \end{aligned}$$

und wir erhalten für die Radialteile der Ortsraumfunktionen als numerisch angenehmen Effekt reelle Funktionen mit etwa gleichen Amplituden unabhängig von ν.
Aus (4.11) folgt direkt die Wirkung des Subsystem-Hamilton-Operators auf die Sturmschen Funktionen:

$$\hat{H} \, | \phi_\nu(\hat{E}) \rangle = \left(\hat{E} + \frac{\eta_\nu(\hat{E}) - 1}{\eta_\nu(\hat{E})} \, V\right) \, | \phi_\nu(\hat{E}) \rangle. \tag{4.17}$$

Durch die Skalarprodukte der Sturmschen Funktionen erhält man die symmetrische reelle Matrix A

$$A_{\nu'\nu} = \langle\, \phi_{\nu'}(\hat{E}) \,|\, \phi_\nu(\hat{E}) \,\rangle, \tag{4.18}$$

mit der sich unter Verwendung einer reellen regulären Matrix R besonders zweckmäßige Zustände $|\, \underline{\phi}_\nu(\hat{E}) \,\rangle, |\, \overline{\phi}_\nu(\hat{E}) \,\rangle$

$$|\, \underline{\phi}_\nu(\hat{E}) \,\rangle = \|\, \underline{\phi}_\nu(\hat{E}) \,\|^{-1} \sum_{\nu'} |\, \phi_{\nu'}(\hat{E}) \,\rangle\, R_{\nu'\nu}, \tag{4.19}$$

$$\langle\, \overline{\phi}_\nu(\hat{E}) \,| = \|\, \overline{\phi}_\nu(\hat{E}) \,\|^{-1} \sum_{\nu'\nu''} R^{-1}_{\nu\nu'}\, A^{-1}_{\nu'\nu''}\, \langle\, \phi_{\nu''}(\hat{E}) \,|, \tag{4.20}$$

mit den Normen

$$\|\, \underline{\phi}_\nu(\hat{E}) \,\|^2 = \left(R^T A R\right)_{\nu\nu}, \tag{4.21}$$

$$\|\, \overline{\phi}_\nu(\hat{E}) \,\|^2 = \left(R^{-1} A^{-1} R^{-1^T}\right)_{\nu\nu}, \tag{4.22}$$

$$\|\, \underline{\phi}_\nu(\hat{E}) \,\| = \|\, \overline{\phi}_\nu(\hat{E}) \,\|^{-1} \tag{4.23}$$

konstruieren lassen. Sie bilden ein Biorthonormalsystem:

$$\langle\, \overline{\phi}_{\nu'}(\hat{E}) \,|\, \underline{\phi}_\nu(\hat{E}) \,\rangle = \delta_{\nu'\nu}, \tag{4.24}$$

und diagonalisieren bei geeigeneter Wahl von R den Subsystem-Hamiltonoperator:

$$\langle\, \overline{\phi}_{\nu'}(\hat{E}) \,|\, \hat{H} \,|\, \underline{\phi}_\nu(\hat{E}) \,\rangle = \delta_{\nu'\nu}\, \left(\hat{E} + \hat{E}_\nu\right) = \delta_{\nu'\nu}\, \tilde{E}_\nu. \tag{4.25}$$

Diese Tatsache gewinnt an anderer Stelle noch eine große Bedeutung, wenn die asymptotische Form der Drei-Körper-Zustände festgelegt wird. Die Schwellenenergien $\tilde{E}_\nu$ weichen von den physikalischen Schwellen nur ab, wenn man zur Berechnung endlich viele Sturmsche Zustände heranzieht, da diese lediglich einen Teilraum des gesamten Hilbertraums aufspannen. Dies ist selbstverständlich in der Praxis immer der Fall, aber bei Hinzunahme weiterer Zustände konvergieren die Schwellen gegen die physikalischen, was in Kapitel 8 exemplarisch gezeigt wird. Die Energie $\hat{E}$ ist bisher ein frei wählbarer, negativer Parameter gewesen. Für $\eta_\nu(\hat{E}) = 1$ geht (4.17) jedoch offenbar in (4.1) über, d.h. die zugehörige Sturmsche Funktion ist (bis auf einen Normierungsfaktor) identisch mit einem Bindungszustand von $\hat{H}$, und $\hat{E}$ ist die entsprechende Bindungsenergie. Setzen wir also $\hat{E} = E_d$, dann gibt es einen Index ν mit $\eta_\nu = 1$, und der Bindungszustand ist eine der Sturmschen Funktionen. Bei der Betrachtung von elastischer Neutron-Deuteron-Streuung ist diese Wahl zweifellos die günstigste, weil das asymptotische Verhalten des Drei-Körper-Zustandes schon durch einen Entwicklungsterm im Rahmen der Coupled-Channels-Approximation vollständig beschrieben wird. Subsystem-Partialwellen, die keinen Bindungszustand enthalten, implizieren zunächst kein Kriterium für eine vernünftige Wahl von $\hat{E}$, es kann daher also zukünftig noch untersucht werden, welche Energiewerte eine optimale Konvergenz der Entwicklung bewirken. Für den Kanal $\sigma = 1$ wird dies in Kapitel 8 beispielhaft durchgeführt.
Da wir in dieser Arbeit für die Sturmsche Energie $\hat{E}$ immer die Deuteron-Bindungsenergie E_d verwenden, lassen wir das Argument jetzt weg, um eine bessere Übersichtlichkeit zu erzielen.
Eine sinnvolle Durchnumerierung der Sturmschen Funktionen ergibt sich aus der Reihenfolge der Wichtigkeit bzw. Größe der Entwicklungsterme, die man leicht aus (4.25) und (4.17) ablesen kann:

- Der Bindungszustand erhält den Index 1:

$$\eta_1 = 1$$

- Weitere Zustände zu $\eta_\nu > 0$ erhalten entsprechend ihrer abnehmenden Größe aufsteigende positive Indizes $\nu \geq 2$:

$$\eta_2 > \eta_3 > \eta_4 \ldots$$

- Zustände zu $\eta_\nu < 0$ erhalten entsprechend ihres abnehmenden Betrages absteigende negative Indizes:

$$\eta_{-1} < \eta_{-2} < \eta_{-3} \cdots$$

Um zu veranschaulichen, daß das Kontinuum in den Sturmschen Funktionen enthalten ist, entwickeln wir einen Sturmschen Zustand $|\,\phi_\nu\,\rangle$ nach den Eigenzuständen von $\hat{H}$:

$$|\,\phi_\nu\,\rangle = \sum_{\nu'} |\,\psi_{\nu'}\,\rangle\,\langle\,\psi_{\nu'}\,|\,\phi_\nu\,\rangle + \int d^3p\,|\,\psi_{\vec{p}}\,\rangle^{(\pm)}\,{}^{(\pm)}\langle\,\psi_{\vec{p}}\,|\,\phi_\nu\,\rangle. \tag{4.26}$$

Dabei sind $|\,\psi_\nu\,\rangle$ die (eigentlichen) Bindungszustände und $|\,\psi_{\vec{p}}\,\rangle^{(\pm)}$ die (uneigentlichen) Streuzustände von $\hat{H}$. Für $\nu = 1$, d.h. $|\,\phi_1\,\rangle \propto |\,\psi_1\,\rangle$, verschwindet das Integral wegen ${}^{(\pm)}\langle\,\psi_{\vec{p}}\,|\,\phi_1\,\rangle = 0$, und die Summe reduziert sich wegen $\langle\,\psi_{\nu'}\,|\,\phi_1\,\rangle \propto \delta_{\nu'1}$ auf einen Term. Alle weiteren Sturmschen Funktionen enthalten neben Anteilen an den Bindungszuständen auch Wellenpakete mit der Impulsverteilung

$$\tilde{\phi}_\nu^{(\pm)}(\vec{p}) = {}^{(\pm)}\langle\,\psi_{\vec{p}}\,|\,\phi_\nu\,\rangle = \int d^3\rho\;\psi_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{\rho})\;\phi_\nu(\vec{\rho}). \tag{4.27}$$

Man kann die Sturmschen Funktionen also als eine Linearkombination der physikalischen Bindungszustände einerseits und der Streuzustände andererseits auffassen. Selbst wenn der Hamilton-Operator $\hat{H}$ - wie der des Zwei-Nukleonen-Systems - keinen oder nur einen einzigen Bindungszustand besitzt, erhält man mit den Sturmschen Funktionen eine eigentliche Hilbertraumbasis, die zwar höchstens einen echten Eigenzustand von $\hat{H}$ enthält, insgesamt aber ausschließlich aus Zuständen besteht, die mit dem Spektrum von $\hat{H}$ eng zusammenhängen.
Wir schreiben (4.11) nun in Ortsdarstellung nach Partialwellenentwicklung:

$$\eta_\nu^\sigma \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{L(L+1)}{\rho^2} + E_d \right)\; u_{\nu L}^\sigma(\rho) = \sum_{L'} V_{LL'}^\sigma(\rho)\; u_{\nu L'}^\sigma(\rho) \tag{4.28}$$

mit den radialen Wellenfunktionen

$$u_{\nu L}^\sigma(\rho) = \rho\;\phi_{\nu L}^\sigma(\rho). \tag{4.29}$$

Die Sturmschen Zustände sind die normierbaren Lösungen von (4.28):

$$\sum_L \int_0^\infty d\rho\;\left|u_{\nu L}^\sigma(\rho)\right|^2 < \infty, \tag{4.30}$$

d.h. sie erfüllen die üblichen physikalischen Randbedingungen:

$$u_{\nu L}^\sigma(\rho) \quad \underset{\rho\to 0}{\widetilde{\;\;\;}} \quad \rho^{L+1}, \tag{4.31}$$

$$u_{\nu L}^\sigma(\rho) \quad \underset{\rho\to\infty}{\widetilde{\;\;\;}} \quad \hat{k}_L(\sqrt{-E_d}\,\rho) \tag{4.32}$$

mit den modifizierten Riccati-Bessel-Funktionen $\hat{k}_L$, die in Anhang A erläutert sind.
Die Summe über den Bahndrehimpuls L ist nur wirklich eine Summe, wenn es sich um einen gekoppelten Kanal ($\sigma = 4$) handelt. Die möglichen Kombinationen der Quantenzahlen ergeben sich aus den Tabellen 2 bis 5.

4.2 Bewertung

Die Schlußfolgerungen dieses Kapitels ergeben folgende Vorteile Sturmscher Zustände gegenüber Bindungszuständen als Entwicklungsbasis:

- Die Sturmschen Zustände stellen für jedes Zwei-Körper-System eine eigentliche Hilbertraum-Basis dar, auch wenn keine physikalische existiert.
- Sie enthalten den möglichen kontinuierlichen Anteil des Energiespektrums in Form von Wellenpaketen.
- Sie besitzen ein einheitliches exponentielles Abklingverhalten.

Dagegen stehen folgende Nachteile:

- Die Sturmschen Zustände bilden kein ON-System. Allerdings lassen sie die Konstruktion eines Biorthonormalsystems zu, das den Hamilton-Operator diagonalisiert.
- Die physikalischen Schwellen werden in endlichen Teilräumen nur approximativ repräsentiert.

5 Der Sturmian Coupled Channels Formalism (SCCF)

Im folgenden suchen wir die Eigenzustände und Eigenwerte des Gesamt-Hamilton-Operators:

$$H \mid \Psi \rangle = E \mid \Psi \rangle \tag{5.1}$$

und führen dazu für die in Kapitel 3.3 gefundenen Komponenten den SCCF durch:

$$\begin{aligned} \mid \psi(L\sigma\tau)\omega \rangle_\alpha &= \sum_\nu \mid \underline{\phi}_\nu F(L\sigma\tau)\omega \rangle_\alpha, & (5.2) \\ {}_\alpha\langle \rho r(L\sigma\tau)\omega \mid \psi(L\sigma\tau)\omega \rangle_\alpha &= \sum_\nu \underline{\phi}^\sigma_{\nu L}(\rho)\, F^{(\sigma\tau)\omega}_{\nu L}(r). & (5.3) \end{aligned}$$

Falls die Summe über alle ν (unendlich viele) erfolgt, ist dieser Ansatz exakt. Die für den SCCF typische unvermeidbare Näherung liegt demnach darin, daß wir in jedem Kanal nur eine durch $\nu_{min} \leq \nu \leq \nu_{max}$ beschränkte endliche Menge von Entwicklungstermen verwenden können (*Close Coupling Approximation*), die jedoch im günstigsten Fall schon bei einer geringen Anzahl Konvergenz erzeugen. Diese muß natürlich bei allen berechneten Observablen geprüft werden.
Wir projizieren nun (5.1) auf ${}_\alpha\langle \overline{\phi}_{\nu'} r(L'\sigma'\tau')\,\omega \mid$, setzen (5.3) ein und erhalten nach Tausch von gestrichenen und ungestrichenen Variablen für die effektiven Relativzustände

$$f^{(\sigma\tau)\omega}_{\nu L}(r) = r\, F^{(\sigma\tau)\omega}_{\nu L}(r) \tag{5.4}$$

ein System endlich vieler gekoppelter eindimensionaler Integro-Differentialgleichungen:

$$\boxed{\mathcal{D}^{\sigma\tau}_{\nu L}(r)\, f^{(\sigma\tau)\omega}_{\nu L}(r) + \sum_{\nu' L'\sigma'\tau'} \int_0^\infty dr'\, rr'\, V^{(\sigma\tau)(\sigma'\tau')\omega}_{\nu L\, \nu' L'}(r,r';E)\, f^{(\sigma'\tau')\omega}_{\nu' L'}(r') = E\, f^{(\sigma\tau)\omega}_{\nu L}(r)}. \tag{5.5}$$

Der Operator $\mathcal{D}$ wird hier durch

$$\mathcal{D}^{\sigma\tau}_{\nu L}(r) = -\frac{3}{4}\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) + \tilde{E}^\sigma_{\nu L} \tag{5.6}$$

und die energieabhängige effektive Zwei-Fragment-Wechselwirkung durch

$$V^{(\sigma\tau)(\sigma'\tau')\omega}_{\nu L\, \nu' L'}(r,r';E) = U^{(\sigma\tau)(\sigma'\tau')\omega}_{\nu L\, \nu' L'}(r,r') + K^{(\sigma\tau)(\sigma'\tau')\omega}_{\nu L\, \nu' L'}(r,r';E) \tag{5.7}$$

definiert.
Während die sogenannten direkten Potentiale U (*folding potentials*) die Wechselwirkung bei direkter Streuung beschreiben, beinhalten die Austauschpotentiale K (*exchange potentials*) die Wechselwirkung bei Umordnungsstreuung, die letztlich aus dem für ununterscheidbare Teilchen geltenden Pauli-Prinzip resultieren.
Die direkten Potentiale errechnen sich mit (3.20) bis (3.22) und (3.18) sowie (3.12) wie folgt:

$$\begin{aligned} U^{(\sigma\tau)(\sigma'\tau')\omega}_{\nu L\, \nu' L'}(r,r') &= {}_\alpha\langle \overline{\phi}_\nu r(L\sigma\tau)\omega \mid \bar{V}_\alpha \mid \underline{\phi}_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega \rangle_\alpha & (5.8) \\ &= 2\, {}_\alpha\langle \overline{\phi}_\nu r(L\sigma\tau)\omega \mid V_\beta \mid \underline{\phi}_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega \rangle_\alpha & (5.9) \end{aligned}$$

Die Austauschpotentiale sind gegeben durch:

$$\begin{aligned} K^{(\sigma\tau)(\sigma'\tau')\omega}_{\nu L\, \nu' L'}(r,r';E) &= {}_\alpha\langle \overline{\phi}_\nu r(L\sigma\tau)\omega \mid (H-E) \mid \underline{\phi}_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega \rangle_\beta \\ &+ {}_\alpha\langle \overline{\phi}_\nu r(L\sigma\tau)\omega \mid (H-E) \mid \underline{\phi}_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega \rangle_\gamma & (5.10) \\ &= 2\, {}_\alpha\langle \overline{\phi}_\nu r(L\sigma\tau)\omega \mid (H-E) \mid \underline{\phi}_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega \rangle_\beta. & (5.11) \end{aligned}$$

Die weitere Berechnung von (5.9) und (5.11) erfolgt im Anhang D.
An dieser Stelle wollen wir die physikalischen Randbedingungen von (5.5) festlegen und betrachten dazu zunächst das Verhalten der direkten und Austauschpotentiale für kleine r. Mit den Formeln aus Anhang D ergibt sich:

$$rr'\, U^{(\sigma\tau)(\sigma'\tau')\omega}_{\nu L\;\nu' L'}(r,r';E) \;\underset{r\to 0}{\widetilde{}}\; const, \tag{5.12}$$
$$rr'\, K^{(\sigma\tau)(\sigma'\tau')\omega}_{\nu L\;\nu' L'}(r,r';E) \;\underset{r\to 0}{\widetilde{}}\; 0. \tag{5.13}$$
$$\tag{5.14}$$

Für große r klingen beide exponentiell ab. Damit ergeben sich folgende Gleichungen für $r \to 0$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) f^{(\sigma\tau)\omega}_{\nu L}(r) = 0 \tag{5.15}$$

und für $r \to \infty$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \tfrac{4}{3}(E - \tilde{E}^{\sigma}_{\nu L})\right) f^{(\sigma\tau)\omega}_{\nu L}(r) = 0. \tag{5.16}$$

Hier zeigt sich der große Vorteil der in Kapitel 4.1 eingeführten Zustände $|\,\underline{\phi}_{\nu}\,\rangle$ und $|\,\overline{\phi}_{\nu}\,\rangle$, denn bei deren Verwendung entkoppelt das Gleichungssystem, wie man erkennt, sowohl asymptotisch als auch am Koordinatenursprung. Dadurch können nun die üblichen Randbedingungen für jede einzelne *spectator function* f angegeben werden:

$$f^{(\sigma\tau)\omega}_{\nu L}(r) \underset{r\to 0}{\widetilde{}} r^{l+1}, \tag{5.17}$$

damit wir eine im Ursprung reguläre Funktion erhalten.

$$f^{(\sigma\tau)\omega}_{\nu L}(r) \underset{r\to\infty}{\widetilde{}} a\,\hat{j}_l(q^{\sigma}_{\nu L}\,r) - b\,\hat{n}_l(q^{\sigma}_{\nu L}\,r), \tag{5.18}$$

mit

$$E - \tilde{E}^{\sigma}_{\nu L} = \tfrac{3}{4} q^{\sigma\,2}_{\nu L}, \tag{5.19}$$

falls für die Kanalenergie $E - \tilde{E}^{\sigma}_{\nu L} \geq 0$ gilt. D.h. es liegt ein offener Kanal bzw. Streuzustand vor.

$$f^{(\sigma\tau)\omega}_{\nu L}(r) \underset{r\to\infty}{\widetilde{}} \hat{k}_l(\alpha^{\sigma}_{\nu L}\,r), \tag{5.20}$$

mit

$$E - \tilde{E}^{\sigma}_{\nu} = -\tfrac{3}{4}\alpha^{\sigma\,2}_{\nu L}, \tag{5.21}$$

falls für die Kanalenergie $E - \tilde{E}^{\sigma}_{\nu L} < 0$ gilt. D.h. es liegt ein geschlossener Kanal bzw. Bindungszustand vor.
Die auftretenden Außenraumlösungen sind die Riccati-Bessel-Funktionen $\hat{j}_l$, die Riccati-Neumann-Funktionen $\hat{n}_l$ und die modifizierten Riccati-Bessel-Funktionen $\hat{k}_l$, die im Anhang A aufgeführt werden.

6 Die Observablen des Streuprozesses

In diesem Abschnitt werden kurz die relevanten Formeln für die Berechnung der charakteristischen Größen zur Beschreibung von Streuprozessen dargelegt.
Die Streuphasen $\delta_l^{\Gamma\pi}$ werden durch die asymptotische Form (5.18) der Lösungen für offene Kanäle definiert:

$$
\begin{aligned}
f_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r) \quad &\underset{r\to\infty}{\widetilde{\longrightarrow}} \quad a\, \hat{\jmath}_l(q_{\nu L}^{\sigma}\, r) - b\, \hat{n}_l(q_{\nu L}^{\sigma}\, r) && (6.1)\\
&= \quad a\, \sin(q_{\nu L}^{\sigma}\, r - l\tfrac{\pi}{2}) - b\, \cos(q_{\nu L}^{\sigma}\, r - l\tfrac{\pi}{2}) && (6.2)\\
&= \quad c\, \sin(q_{\nu L}^{\sigma}\, r - l\tfrac{\pi}{2} + \delta_l^{\Gamma\pi}). && (6.3)
\end{aligned}
$$

Nach Anwendung eines Additionstheorems auf die Sinusfunktion in der unteren Zeile erhalten wir

$$
\begin{aligned}
&a\, \sin(q_{\nu L}^{\sigma}\, r - l\tfrac{\pi}{2}) - b\, \cos(q_{\nu L}^{\sigma}\, r - l\tfrac{\pi}{2})\\
= \quad &c\, \left[\sin(q_{\nu L}^{\sigma}\, r - l\tfrac{\pi}{2})\, \cos\delta_l^{\Gamma\pi} + \cos(q_{\nu L}^{\sigma}\, r - l\tfrac{\pi}{2})\, \sin\delta_l^{\Gamma\pi}\right], \qquad (6.4)
\end{aligned}
$$

und durch Koeffizientenvergleich ergibt sich

$$\tan\delta_l^{\Gamma\pi} = -\tfrac{b}{a}. \qquad (6.5)$$

An dieser Stelle sind die Streuphasen nun leicht zugänglich, indem wir die auf dem Intervall $[0, r_\infty]$ numerisch ermittelten Lösungen der Relativzustände stetig differenzierbar an die auf $[r_\infty, \infty]$ analytisch bekannten freien Lösungen anschließen:

$$
\begin{aligned}
f_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r)\Big|_{r_\infty} \quad &= \quad a\left[\sin(q_{\nu L}^{\sigma}\, r - l\tfrac{\pi}{2}) + \tan\delta_l^{\Gamma\pi}\, \cos(q_{\nu L}^{\sigma}\, r - l\tfrac{\pi}{2})\right]\Big|_{r_\infty} && (6.6)\\
\frac{d}{dr} f_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r)\Big|_{r_\infty} \quad &= \quad a\, q_{\nu L}^{\sigma}\left[\cos(q_{\nu L}^{\sigma}\, r - l\tfrac{\pi}{2}) - \tan\delta_l^{\Gamma\pi}\, \sin(q_{\nu L}^{\sigma}\, r - l\tfrac{\pi}{2})\right]\Big|_{r_\infty} && (6.7)
\end{aligned}
$$

Mit der logarithmischen Ableitung $\gamma_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r_\infty)$, definiert durch

$$\gamma_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r_\infty) = \frac{d}{dr}\left[ln\; f_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}\right]\Big|_{r_\infty}, \qquad (6.8)$$

lassen sich die Gleichungen (6.6) und (6.7) zusammenfassen, so daß man nach der Streuphase auflösen kann und in eleganter Form schreibt:

$$\tan\delta_l^{\Gamma\pi} = \frac{q_{\nu L}^{\sigma} \cos(q_{\nu L}^{\sigma}\, r_\infty - l\frac{\pi}{2}) - \gamma_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r_\infty)\, \sin(q_{\nu L}^{\sigma}\, r_\infty - l\frac{\pi}{2})}{q_{\nu L}^{\sigma} \sin(q_{\nu L}^{\sigma}\, r_\infty - l\frac{\pi}{2}) + \gamma_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r_\infty)\, \cos(q_{\nu L}^{\sigma}\, r_\infty - l\frac{\pi}{2})}. \qquad (6.9)$$

Alle in (6.9) auftretenden Funktionswerte sind nun bekannt, so daß mittels der sogenannten *effective-range*-Approximation auch die Streulänge $a_l^{\Gamma\pi}$ zugänglich wird:

$$q_{\nu L}^{\sigma}\, \cot\delta_l^{\Gamma\pi}(q_{\nu L}^{\sigma}) = -\frac{1}{a_l^{\Gamma\pi}} + \frac{1}{2} r_l^{\Gamma\pi}\, {q_{\nu L}^{\sigma}}^2. \qquad (6.10)$$

Durch Grenzwertbildung findet man:

$$a_l^{\Gamma\pi} = -\lim_{q_{\nu L}^{\sigma}\to 0} \frac{\tan\delta_l^{\Gamma\pi}(q_{\nu L}^{\sigma})}{q_{\nu L}^{\sigma}}. \qquad (6.11)$$

Weiterhin berechnet man aus den Streuphasen den differentiellen Wirkungsquerschnitt in Abhängigkeit vom Streuwinkel θ:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{\Gamma\pi}(\theta) = \frac{1}{{q_{\nu L}^{\sigma}}^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, e^{i\delta_l^{\Gamma\pi}}\, \sin\delta_l^{\Gamma\pi}\, P_l(\cos\theta)\right|^2. \qquad (6.12)$$

Nach Integration über den gesamten Raumwinkelbereich Ω ergibt sich damit schließlich für den totalen Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma_{tot}^{\Gamma^\pi} = \frac{4\pi}{{q_{\nu L}^{\sigma}}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l^{\Gamma^\pi}. \tag{6.13}$$

7 Numerische Methoden

7.1 Die B-Splines

Zur Realisierung der auftretenden Wellenfunktionen auf dem Rechner verwenden wir ein numerisch handhabbares Funktionensystem, die B-Splines, nach denen wir die Funktion entwickeln [12]. Die B-Splines $B_{i,k}(\rho)$, $1 \leq i \leq N$ der Ordnung k über dem Intervall $[\rho_0, \rho_\infty[$ sind Polynome der Ordnung $k-1$, die auf einer Partition $\{\rho_j | 1 \leq j \leq N+k,\ \rho_1 = \rho_0,\ \rho_{N+k} = \rho_\infty\}$ definiert werden und jeweils endliche Träger besitzen, d. h.

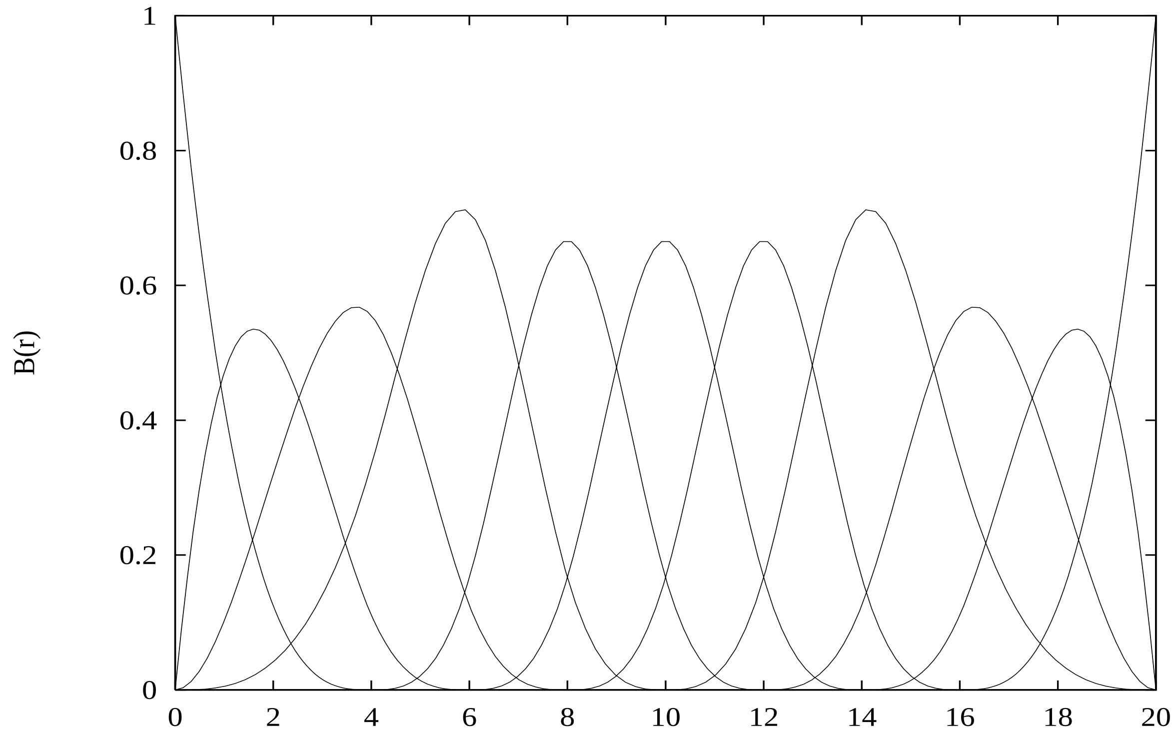
$$B_{i,k}(\rho) = 0 \qquad \text{für} \qquad \rho \notin [\rho_i, \rho_{i+k}[. \tag{7.1}$$

Mit der Forderung

$$\sum_{i=1}^{N} B_{i,k}(\rho) = 1 \qquad \text{für} \qquad \rho \in [\rho_0, \rho_\infty[\tag{7.2}$$

werden sie normiert, und ihr Wertebereich liegt damit im Intervall $[0, 1]$. Sie zerlegen also lokal die Einsabbildung. An den beiden Intervallrändern wird die *not a knot*-Bedingung angewandt, die darin besteht, daß der erste und der letzte Knoten k-fach vorliegt. Folglich sind dort nur die Splines $B_{1,k}$ bzw. $B_{N,k}$ ungleich Null, und die Regularitätsbedingung am Ursprung wird durch Weglassen von $B_{1,k}$ erfüllt. Um in dieser Spline-Basis stetig differentierbare Funktionen darstellen zu können, um die es sich bei den Wellenfunktionen handelt, benötigen wir mindestens die Ordnung $k = 4$, die wir auch in der gesamten Arbeit verwenden. Eine graphische Darstellung der B-Splines mit $N = 11$ für eine äquidistante Knotenfolge im Intervall $[0, 20[$ befindet sich in Abbildung 3.

Figure 3: Die B-Splines für $N = 11$ auf einem äquidistanten Gitter im Intervall $[0, 20[$



Die Diskretisierung der zu lösenden Eigenwertgleichungen erfolgt dann durch die Galerkin-Methode, d.h. durch Projektion auf B-Splines $B_{j,k}(\rho)$ und anschließende Integration über ρ. Sie hat sich in früher durchgeführten Tests [1] als stabiler erwiesen als die ebenfalls gebräuchliche *collocation point*-Methode, bei der die Diskretisierung durch Wahl eines Punktegitters $\{\rho'_j\}$ erreicht wird. Zwar ist die Galerkin-Methode aufgrund der notwendigen Integrationen deutlich zeitaufwendiger, aber dafür bietet sie den Vorteil, daß sämtliche Integranden nicht nur an wenigen Stellen ausgewertet werden, sondern mit ihrem gesamten funktionalen Verlauf in die Spline-Matrix-Elemente eingehen.

7.2 Die Gleichung des Deuteron-Subsystems

Zuerst benötigen wir die Bindungsenergie des Deuterons E_d. Wir suchen also den in unserem Fall einzigen Eigenwert der stationären Schrödingergleichung zu einem normierbaren Eigenzustand. Zu diesem Zweck schreiben wir (4.1) in Ortsdarstellung und entwickeln die Eigenzustände $|\,\varphi\,\rangle$ nach Partialwellen:

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{d^2}{d\rho^2}\rho - \frac{L(L+1)}{\rho^2} + E_d\right)\ \varphi^\sigma_L(\rho) = \sum_{L'} V^\sigma_{LL'}(\rho)\ \varphi^\sigma_{L'}(\rho). \tag{7.3}$$

Da das Deuteron dem ${}^3S_1 - {}^3D_1$-Kanal entspricht, setzen wir $\sigma = 4$. Ferner gelten die üblichen physikalischen Randbedingungen (4.31) und (4.32).
Zur Bestimmung der Bindungswellenfunktion entwickeln wir diese nach den im vorigen Abschnitt eingeführten B-Splines:

$$\varphi^\sigma_L(\rho) = e^{-\sqrt{-E_d}\,\rho}\ \sum_{i=1}^{N} a^\sigma_{Li}\ B_{i,k}(\rho), \tag{7.4}$$

wobei wir die asymptotische Randbedingung explizit durch den Exponentialterm erfüllt haben.
Der Forderung nach Regularität am Ursprung genügen wir dadurch, daß wir $a^\sigma_{L1} = 0$ setzen.
Mit der oben beschriebenen Galerkin-Methode erhalten wir nun ein homogenes lineares Gleichungssystem der Form

$$[\mathcal{B} - E_d\ Id]\ a = 0, \tag{7.5}$$

mit

$$\mathcal{B}_{LL'} = \int_0^{\rho_\infty} d\rho\ B_{i,k}(\rho)\ \left[\delta_{LL'}\left(-\frac{1}{\rho}\frac{d^2}{d\rho^2}\rho + \frac{L(L+1)}{\rho^2}\right) + V^\sigma_{LL'}(\rho)\right]\ B_{j,k}(\rho) \tag{7.6}$$

$$a = \begin{pmatrix} a_L \\ a_{L'} \end{pmatrix}. \tag{7.7}$$

Die Spline-Indizes i, j und den Subsystemindex $\sigma = 4$ haben wir zwecks Verbesserung der Übersichtlichkeit weggelassen. Offenbar liegt hier eine zweifache Struktur der Matrix $\mathcal{B}$ vor: einerseits bezüglich L und andererseits bezüglich i. Der Parameter ρ_∞ legt die numerische Integrationsgrenze fest, da man in der Praxis nicht unendlich weit integrieren kann, und beschreibt damit anschaulich die Reichweite des Potentials.
Für dieses Eigenwertproblem existieren nur nichttriviale Lösungen, falls

$$\det\,[\mathcal{B} - E_d\, Id] = 0 \tag{7.8}$$

gilt. Numerisch bedeutet dies, daß wir lediglich die Nullstelle obiger Funktion finden müssen, was wir durch Intervallschachtelung bezüglich E_d erreichen. Den zugehörigen Vektor a bestimmen wir mithilfe der *singular value*-Zerlegung, so daß wir auch die Bindungswellenfunktion angeben können.

Zur Lösung der Sturmschen Eigenwertgleichung (4.28) gehen wir völlig analog vor und erhalten:

$$[\eta_\nu^\sigma \ \mathcal{B} - \mathcal{C}] \ a = 0, \tag{7.9}$$

bzw.

$$\det [\eta_\nu^\sigma \ \mathcal{B} - \mathcal{C}] = 0 \tag{7.10}$$

mit den Matrizen

$$\mathcal{B}_{LL'} = \delta_{LL'} \int_0^{\rho_\infty} d\rho \ B_{i,k}(\rho) \left(\frac{1}{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \rho - \frac{L(L+1)}{\rho^2} + E_d \right) \ B_{j,k}(\rho) \tag{7.11}$$

$$\mathcal{C}_{LL'} = \int_0^{\rho_\infty} d\rho \ B_{i,k}(\rho) \ V_{LL'}^\sigma(\rho) \ B_{j,k}(\rho) \tag{7.12}$$

und den Sturmschen Funktionen

$$\phi_{\nu L}^\sigma(\rho) = e^{-\sqrt{-E_d}\,\rho} \ \sum_{i=1}^{N} a_{\nu L i}^\sigma \ B_{i,k}(\rho). \tag{7.13}$$

Der Index σ muß notiert werden, weil das Gleichungssystem für jede Subsystempartialwelle gelöst werden muß, die in den späteren Drei-Körper-Kanälen vorkommt. Für die Anzahl der B-Splines wählen wir in beiden Fällen $N = 48$.

7.3 Die Gleichung des Drei-Körper-Systems

Entsprechend verfahren wir mit der Drei-Körper-Gleichung (5.5): Die zu bestimmenden Relativzustände werden nach B-Splines entwickelt

$$f_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r) = \left(\frac{r}{r+d} \right)^{l+1} \ \sum_{i=1}^{N} a_{\nu L i}^{(\sigma\tau)\omega} \ B_{i,k}(r), \tag{7.14}$$

die gesamte Gleichung auf B-Splines projiziert und über r integriert. Die Regularität am Ursprung wurde hier explizit durch den vorgezogenen Faktor berücksichtigt, der gegenüber dem erwarteten Faktor r^{l+1} einen numerischen Vorteil bietet: In der Umgebung des Ursprungs verhält er sich unabhängig vom Parameter d genauso, für große r konvergiert er jedoch gegen Eins, während r^{l+1} unbeschränkt ist. Die asymptotische Randbedingung jeder einzelnen *spectator function* geben wir mithilfe der logarithmischen Ableitung $\gamma_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r_\infty)$ an, die sich aus Gleichung (6.8) errechnet, und erhalten damit in obiger Entwicklung eine Abhängigkeit des letzten Koeffizienten $a_{\nu L N}^{(\sigma\tau)\omega}$ von allen übrigen:

$$a_{\nu L N}^{(\sigma\tau)\omega} = - \sum_{i=1}^{N-1} a_{\nu L i}^{(\sigma\tau)\omega} \ \frac{B'_{i,k}(r_\infty) + \left[\frac{(l+1)d}{r_\infty(r_\infty+d)} - \gamma_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r_\infty) \right] B_{i,k}(r_\infty)}{B'_{N,k}(r_\infty) + \left[\frac{(l+1)d}{r_\infty(r_\infty+d)} - \gamma_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r_\infty) \right] B_{N,k}(r_\infty)}. \tag{7.15}$$

Setzen wir nun

$$\tilde{B}_{i,k}(r) = B_{i,k}(r) - \frac{B'_{i,k}(r_\infty) + \left[\frac{(l+1)d}{r_\infty(r_\infty+d)} - \gamma_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r_\infty) \right] B_{i,k}(r_\infty)}{B'_{N,k}(r_\infty) + \left[\frac{(l+1)d}{r_\infty(r_\infty+d)} - \gamma_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r_\infty) \right] B_{N,k}(r_\infty)} B_{N,k}(r), \tag{7.16}$$

so ergibt sich für (7.14):

$$f_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r) = \left(\frac{r}{r+d} \right)^{l+1} \ \sum_{i=1}^{N-1} a_{\nu L i}^{(\sigma\tau)\omega} \ \tilde{B}_{i,k}(r). \tag{7.17}$$

Damit haben wir eine Verkleinerung der Dimension des Gleichungssystems um Eins pro *spectator function* erreicht, was wiederum den numerischen Aufwand verringert. Auch in diesem Fall müssen wir zum wiederholten Male ein homogenes lineares Gleichungssystem lösen, das jedoch von den logarithmischen Ableitungen $\gamma_{\nu L}^{(\sigma\tau)\omega}(r_\infty)$ abhängt. Seine Form ist durch

$$[\mathcal{B}(\gamma(r_\infty)) - E\,\mathcal{C}(\gamma(r_\infty))]\;a = 0, \tag{7.18}$$

bzw. durch

$$\det\,[\mathcal{B}(\gamma(r_\infty)) - E\,\mathcal{C}(\gamma(r_\infty))] = 0 \tag{7.19}$$

gegeben, mit den Matrizen

$$\begin{aligned}\mathcal{B} \;=\; & \int dr \int dr'\;\tilde{B}_{i,k}(r)\,\left(\frac{r}{r+d}\right)^{l+1}\;\left(\frac{r'}{r'+d}\right)^{l'+1}\;\tilde{B}_{j,k}(r') \\ & rr'\;{}_{\alpha}\langle\,\overline{\phi}_{\nu} r(L\sigma\tau)\omega\,|\,H\,|\,\underline{\phi}_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_{\alpha+\beta+\gamma},\end{aligned} \tag{7.20}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{C} \;=\; & \int dr \int dr'\;\tilde{B}_{i,k}(r)\,\left(\frac{r}{r+d}\right)^{l+1}\;\left(\frac{r'}{r'+d}\right)^{l'+1}\;\tilde{B}_{j,k}(r') \\ & rr'\;{}_{\alpha}\langle\,\overline{\phi}_{\nu} r(L\sigma\tau)\omega\,|\,\underline{\phi}_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_{\alpha+\beta+\gamma}.\end{aligned} \tag{7.21}$$

Der Index $\alpha+\beta+\gamma$ soll andeuten, daß jeweils auf diese Zustände projiziert und anschließend darüber summiert wird.
Die Struktur der Matrizen beläuft sich auf vier Unterteilungen in folgender Hierarchie: Zuerst $(\sigma\tau)$, weiterhin L, dann ν und letztlich i.
Auch hier suchen wir die Nullstellen der Determinante, wobei wir dazu in Bindungsrechnungen eine Intervallschachtelung hinsichtlich $\gamma = \gamma(E)$ als Funktion der Energie vornehmen. In Streurechnungen dagegen halten wir E fest und fassen $\gamma = \gamma(\delta)$ als Funktion einer (oder im allgemeinen mehrerer) elastischen Streuphase(n) auf, so daß hier die Intervallschachtelung bezüglich $0 \leq \delta \leq \pi$ erfolgt. Existieren bei der Streuung z.B. n energetisch offene Kanäle, muß das System mit jeweils verschiedenen Randbedingungen n-mal gelöst werden, was bei unseren Rechnungen jedoch nicht der Fall ist.
Bei der numerischen Umsetzung des Problems treten noch vier offene, voneinander unabhängige, numerische Parameter auf: Die untere Integrationsgrenze r_0, die obere Integrationsgrenze r_∞, die Anzahl N der B-Splines und die Verteilung der Knotenpunkte innerhalb des Integrationsgebietes. Die günstigste Verteilung zeichnet sich dadurch aus, daß die Punktedichte an den Intervallrändern größer ist als im Inneren. Die Werte $r_0 = 0$ fm, $r_\infty = 40$ fm und $N = 40$ haben sich in früheren Tests [1] zur Erzeugung stabiler Ergebnisse als sinnvoll herausgestellt und wurden daher übernommen.

8 Ergebnisse

8.1 Das Deuteron-Subsystem

Wir bestimmen für verschiedene Werte von ρ_∞ die Deuteron-Bindungsenergie E_d und wählen anhand der zugehörigen Abbildung 4 als sinnvolle Potentialreichweite

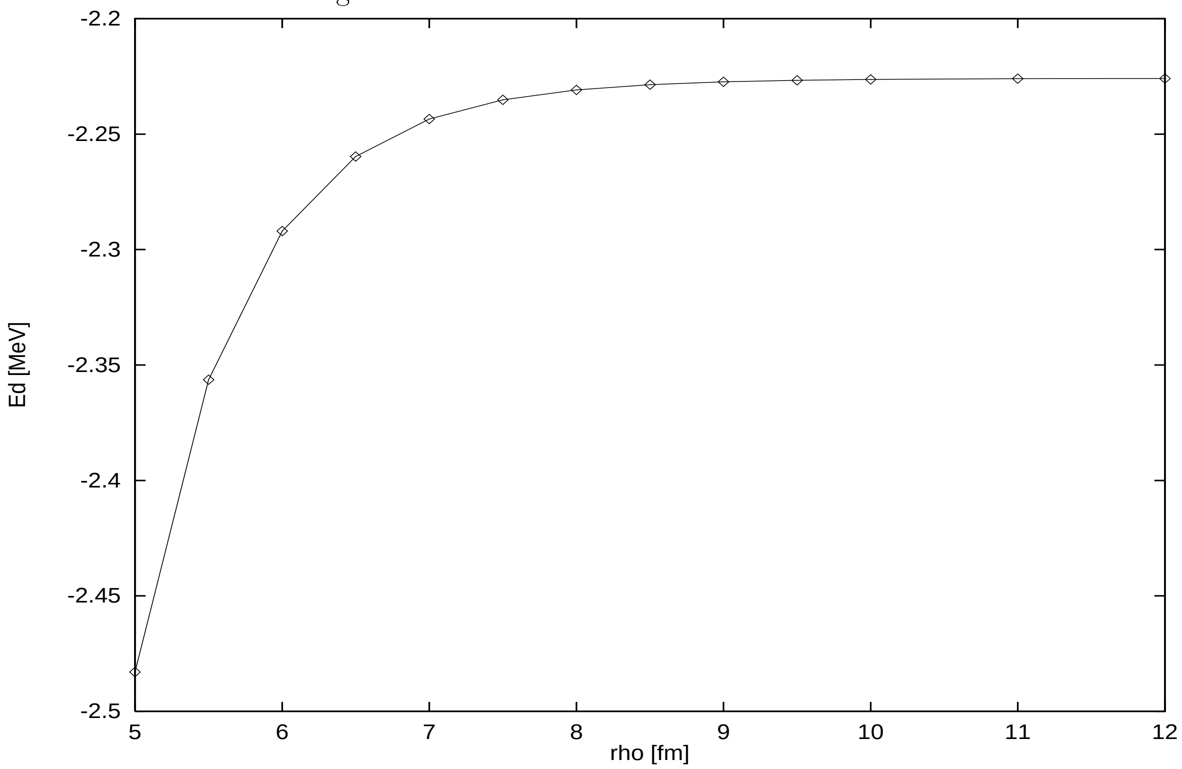
$$\boxed{\rho_\infty = 10,0\,\mathrm{fm}}. \tag{8.1}$$

Mit diesem Wert erhalten wir für die Niederenergieparameter des Deuterons:

Table 7: Die Niederenergieparameter des Deuterons

	SCCF	theo[3]	exp[3]
Bindungsenergie E_d [MeV]	-2,2263171	-2,2250	-2,22463(3)
Quadrupolmoment Q_d [fm^2]	0,271897	0,286	0,2860(15)
D-Wellenanteil P_d [%]	6,074559	6,08	4-7
Asymptot. D/S-Verhältn.	0,023560	0,0266	0,0265(5)

Figure 4: Die Reichweite des AV14-Potentials



Die wichtigsten Sturmschen Eigenwerte sind in der nachstehenden Tabelle für die beiden benötigten Subsystem-Partialwellen $^1S_0$ und $^3S_1 - {}^3D_1$ mit $\hat{E} = E_d$ aufgeführt:

Table 8: Die wichtigsten Sturmschen Eigenwerte $\eta_\nu = \tilde{\eta} * 10^n$ des AV14- Potentials

	$^3S_1 - {}^3D_1$		$^1S_0$	
ν	$\tilde{\eta}$	n	$\tilde{\eta}$	n
-5	-2,620952	-1	-5,405215	-2
-4	-3,749889	-1	-8,703168	-2
-3	-5,402718	-1	-1,631842	-1
-2	-9,386265	-1	-4,141445	-1
-1	-3,913877	0	-2,683420	0
1	1,000000	0	6,919153	-1
2	2,519530	-1	9,825451	-2
3	1,157978	-1	3,961033	-2
4	6,603204	-2	2,147302	-2
5	4,251014	-2	1,349792	-2
6	2,960482	-2	9,260565	-3
7	2,178672	-2	6,742273	-3
8	1,670039	-2	5,126437	-3
9	1,320796	-2	4,027779	-3
10	1,070614	-2	3,245314	-3

Die Gesamtenergie des Neutron-Deuteron-Systems ergibt sich als Summe aus der Deuteron-Bindungsenergie E_d und der kinetischen Neutron-Deuteron-Relativenergie $\frac{3}{4}q^2$:

$$E = E_d + \tfrac{3}{4}q^2. \tag{8.2}$$

Damit ist der Energiebereich elastischer Streuung festgelegt auf

$$E_d \leq E \leq 0. \tag{8.3}$$

Mit Gleichung (2.19) erhält man schließlich für die Energie im Laborsystem konkret in Zahlen:

$$\boxed{0 \leq E^{Lab} \leq 3,3395 \text{ MeV}}. \tag{8.4}$$

Aus physikalischen Gründen gibt es für die Wahl der Sturmschen Energie $\hat{E} = E_d$ im $^3S_1 - {}^3D_1$-Kanal keine Alternative, wogegen im $^1S_0$-Kanal zunächst noch ermittelt werden muß, ob es eine ausgezeichnete Energie gibt und wie sie zahlenmäßig aussieht. Wir hatten schon in Kapitel 4 festgestellt, daß es besonders bei Rechnungen, die oberhalb der Inelastizitäts- bzw. Aufbruchschwelle angesiedelt sind, vonnöten ist, eine optimale Konvergenz der Sturmschen Entwicklung zu gewährleisten. Diese wird erreicht, indem man die errechneten Schwellenenergien den physikalischen möglichst gut annähert.
Diesbezügliche Untersuchungsergebnisse sind in Tabelle 9 beispielhaft für $\tilde{E}_2$ ($^3S_1 - {}^3D_1$) und $\tilde{E}_1$ ($^1S_0$) für verschiedene Entwicklungsstufen und Sturmsche Energien $\hat{E}$ im Laborsystem zusammengefaßt. Offenbar bilden alle Schwellenenergien außer $\tilde{E}_1$ ($^3S_1 - {}^3D_1$) $\equiv 0$, die den einzigen offenen Kanal bildet, bzgl. ν_{max} monoton fallende Folgen, die gegen die physikalischen Schwellen konvergieren, wie man durch Vergleich mit (8.4) erkennt.

Table 9: Die nuklearen Aufbruchenergien

	${}^3S_1 - {}^3D_1$: $\tilde{E}_2^{Lab}$ [MeV]	${}^1S_0$: $\tilde{E}_1^{Lab}$ [MeV]		
ν_{max}	$\hat{E} = E_d$	$\hat{E} = E_d$	$\hat{E} = -1.0$ MeV	$\hat{E} = -0.1$ MeV
1	-	7,46492	5,47025	3,70048
2	37,248	6,48266	5,02728	3,64905
3	23,370	5,94099	4,75065	3,59659
4	18,332	5,59162	4,54482	3,53194
5	15,654	5,34076	4,37692	3,45954
6	13,917	5,15675	4,23476	3,40379
7	12,659	5,01121	4,10894	3,37380
8	11,673	4,89198	3,99800	3,35808
9	10,859	4,78860	3,90144	3,34864
10	10,165	4,69722	3,81953	3,34218

Die Konvergenz erfolgt im ${}^3S_1 - {}^3D_1$-Kanal relativ langsam, was seine Ursache in der Tatsache findet, daß bei Quartet-Streuung der Inelastizitätsparameter oberhalb des Deuteron-Aufbruches nur sehr langsam kleiner als Eins wird [13].
Bei Doublet-Streuung dagegen nimmt dieser bei Überschreiten der Aufbruchschwelle sehr schnell kleine Zahlenwerte an [13]. Unter Verwendung des SCCF kann man dies näherungsweise nur mit der Wahl sehr kleiner Energien $\hat{E}$ im ${}^1S_0$-Kanal erreichen, im Idealfall mit $\hat{E} = 0$. Der Grund hierfür liegt darin, daß das Anti-Deuteron als virtueller Bindungszustand einen Pol in der komplexen Impulsebene auf der negativen imaginären Achse nahe bei Null besitzt, den die physikalische Energie Null am besten beschreibt. Dieser Kanal wird also im Drei-Nukleonen-Zustand von nicht unwesentlicher Bedeutung sein.
Da die Sturmschen Funktionen zu $\hat{E} = 0$ nicht normierbar sind, ist dieser Grenzfall mit unserer Methode nicht durchführbar, gegebenenfalls könnte man die Schrödinger-Gleichung jedoch auf Sturmsche Formfaktoren projizieren und dadurch erreichen, daß auch $\hat{E} = 0$ gewählt werden kann [1].
Wie schon erwähnt, setzen wir dennoch durchweg $\hat{E} = E_d$, denn betragsmäßig kleinere Sturmsche Energien besitzen nach Kapitel 4.1 ein weniger schnelles exponentielles Abklingverhalten der zugehörigen Sturmschen Funktionen, welches eine Vergrößerung der Reichweite der effektiven Potentiale bewirkt.
Die Sturmschen Zustände können genau wie die Bindungszustände durch Anzahl und Lage ihrer Nullstellen bzw. Knoten charakterisiert werden. Ihre Zahl N_K beträgt bei unserer Numerierung der Sturmschen Funktionen $N_K = |\nu| - 1$. Anhand von Abbildung 2 läßt sich der Umschlagpunkt zwischen repulsivem und attraktivem Wechselwirkungsbereich des AV14-Potentials sowohl für den ${}^1S_0$-Kanal als auch für den ${}^3S_1 - {}^3D_1$-Kanal ungefähr lokalisieren. Er liegt im ersten Fall bei etwa 0,7 fm, im zweiten Fall bei etwa 0,9 fm, d.h. die Knoten repulsiver Zustände treten bei kleineren Werten auf, nämlich in der repulsiven Wechselwirkungszone, während die Knoten attraktiver Zustände bei größeren Werten zu finden sind. Dieser Sachverhalt ist in den Abbildungen 5-8 beispielhaft dargestellt, wobei in Abbildung 8 oben sehr schön die beiden Deuteron-Bindungswellenfunktionen (bis auf einen Normierungsfaktor) zu erkennen sind.

Figure 5: Repulsive Sturmsche $^1S_0$-Zustände, $\nu = -1, -2, -3, -4, -5$

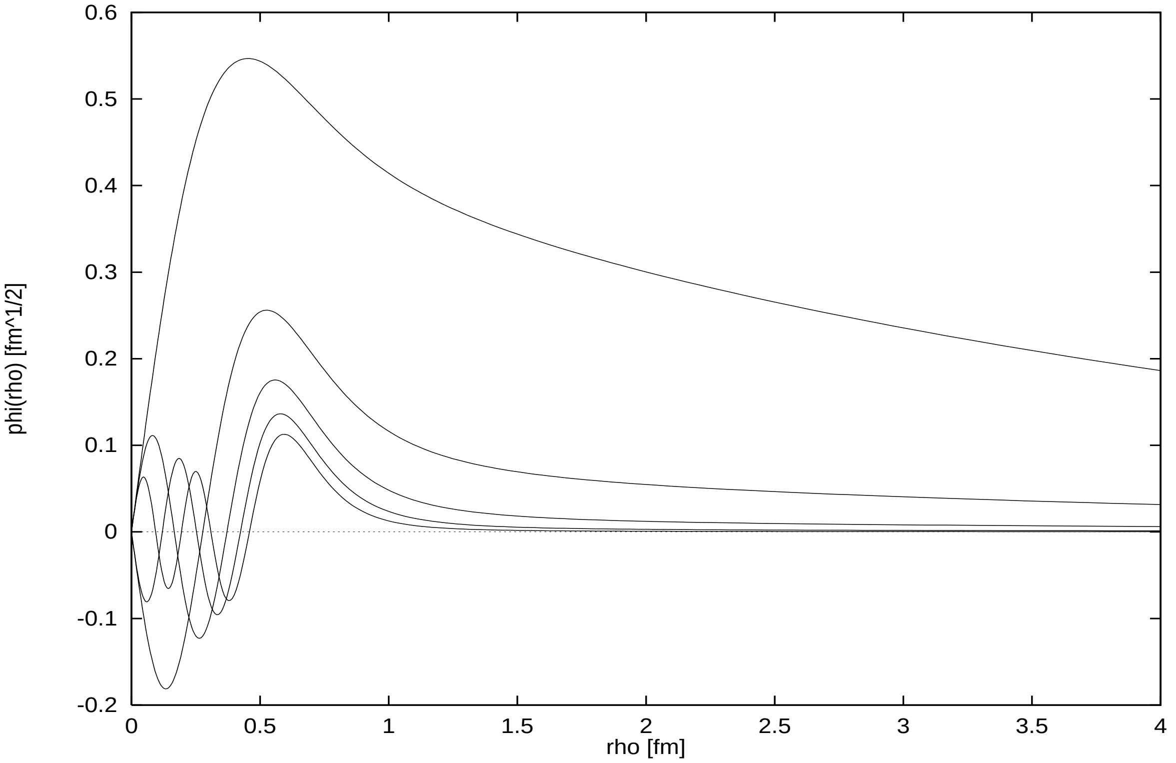


Figure 6: Attraktive Sturmsche $^1S_0$-Zustände, $\nu = 1, 2, 3, 4, 5$

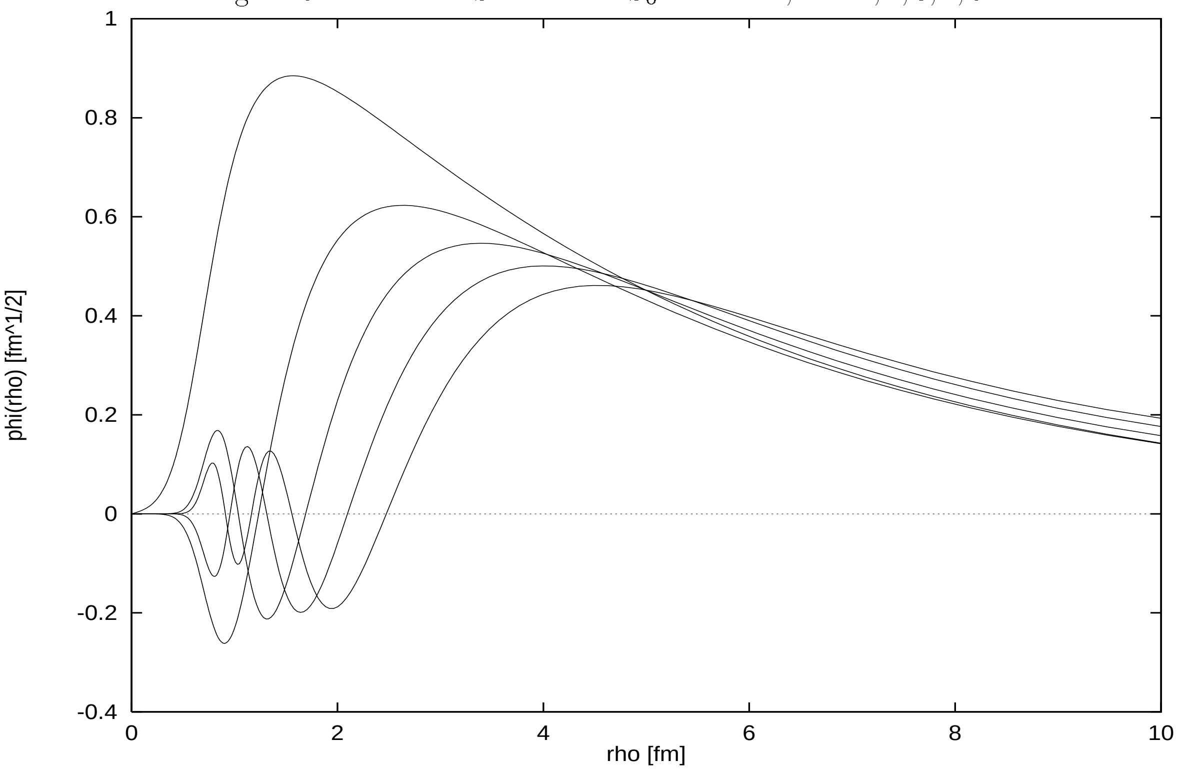


Figure 7: Repulsive Sturmsche ${}^3S_1 - {}^3D_1$-Zustände, $\nu = -1, -2$

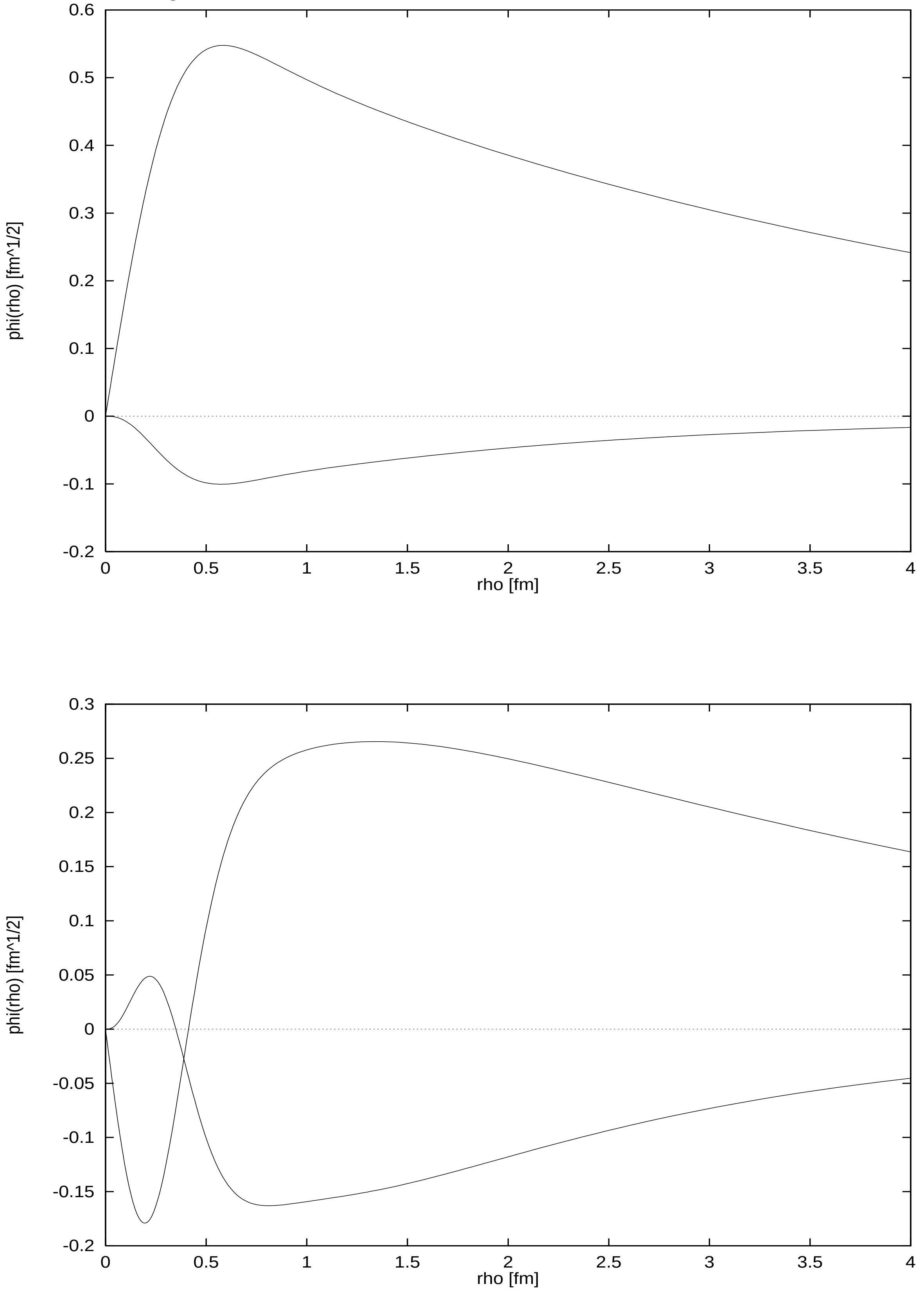
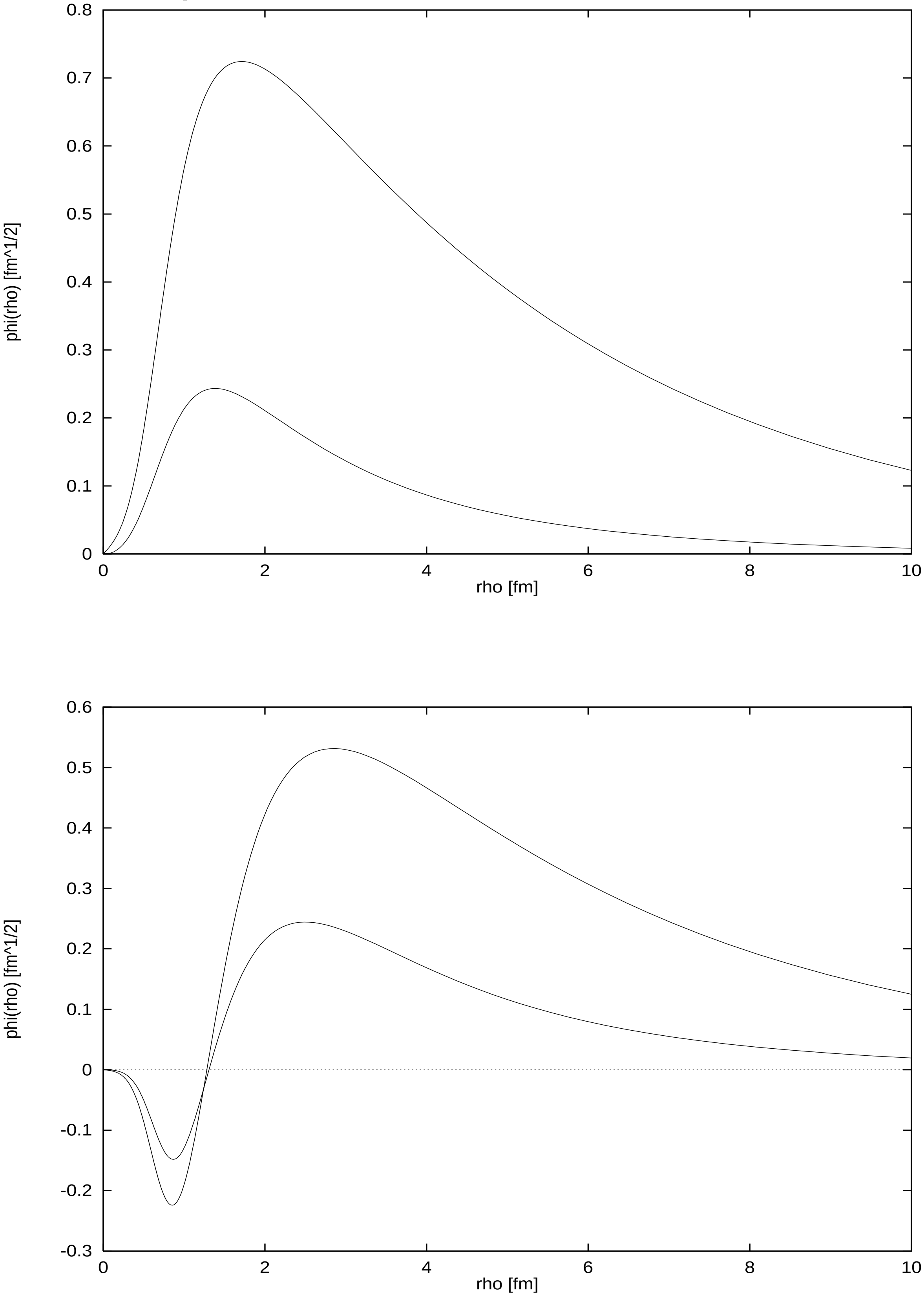


Figure 8: Attraktive Sturmsche $^3S_1 - {}^3D_1$-Zustände, $\nu = 1, 2$



8.2 Das Triton

Neben den Neutron-Deuteron-Streuzuständen existiert für dieses System ein einziger Bindungszustand mit $\Gamma^\pi = \frac{1}{2}^+$, das Triton. In der folgenden Tabelle sind die Triton-Bindungsenergien E_t für verschiedene Entwicklungsstufen, sortiert nach deren Wichtigkeit, aufgelistet. Dabei wurden die Kanäle $^3S_1 - {}^3D_1$ mit Relativbahndrehimpuls $l = 0$ $(\tau = 5)$ und $l = 2$ $(\tau = 6)$ zusammengefaßt, weil sie den selben Subsystemkanal enthalten, der ja die Basis unserer Entwicklung darstellt. Man

Table 10: Die Bindungsenergien des Tritons

$^3S_1 - {}^3D_1$		$^1S_0$		E_t [MeV]
ν_{min}	ν_{max}	ν_{min}	ν_{max}	
1	1	-	-	-5,161
1	2	-	-	-6,960
1	2	-1	-1	-6,975
1	2	-1	1	-6,978
1	2	-1	2	-6,985
1	2	-2	2	-6,991

erkennt, daß sich schon nach wenigen Entwicklungsstufen Konvergenz einstellt, was natürlich ein Hinweis auf die Qualität der verwandten Methode ist. Der berechnete Wert weicht allerdings deutlich von der experimentell ermittelten Energie [14]

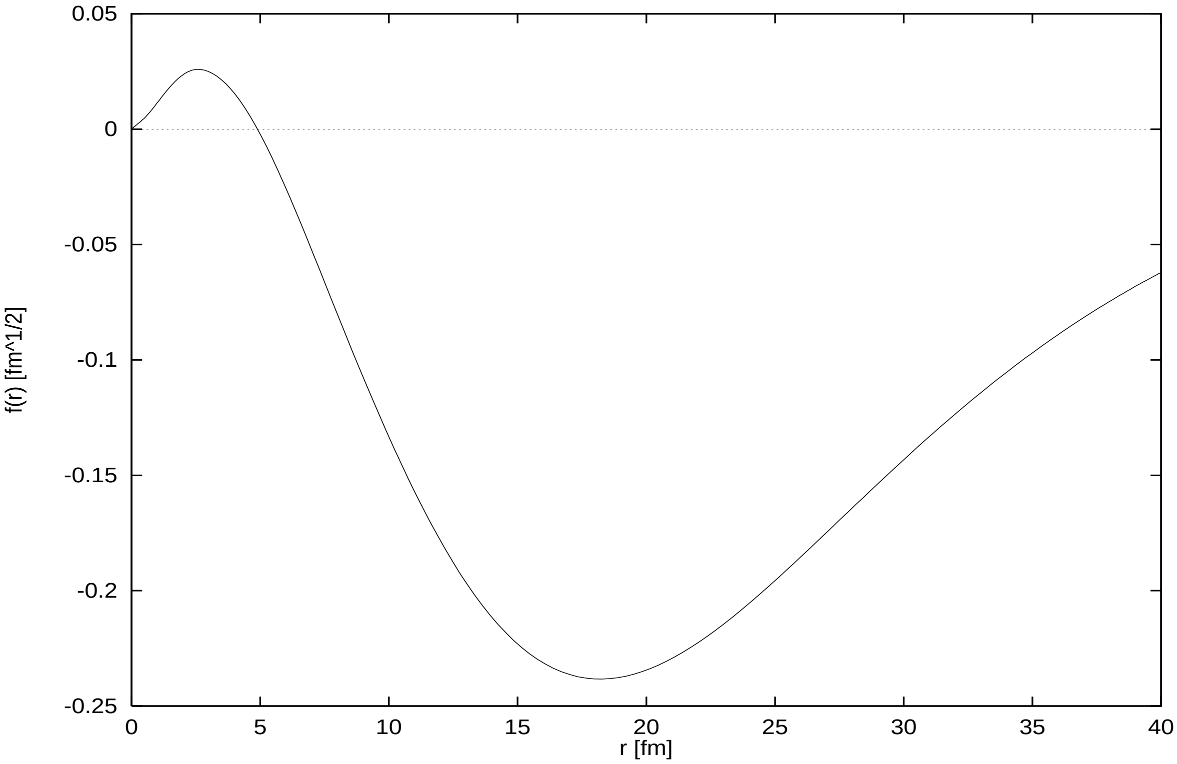
$$E_t^{exp} = -8,482 \text{ MeV} \tag{8.5}$$

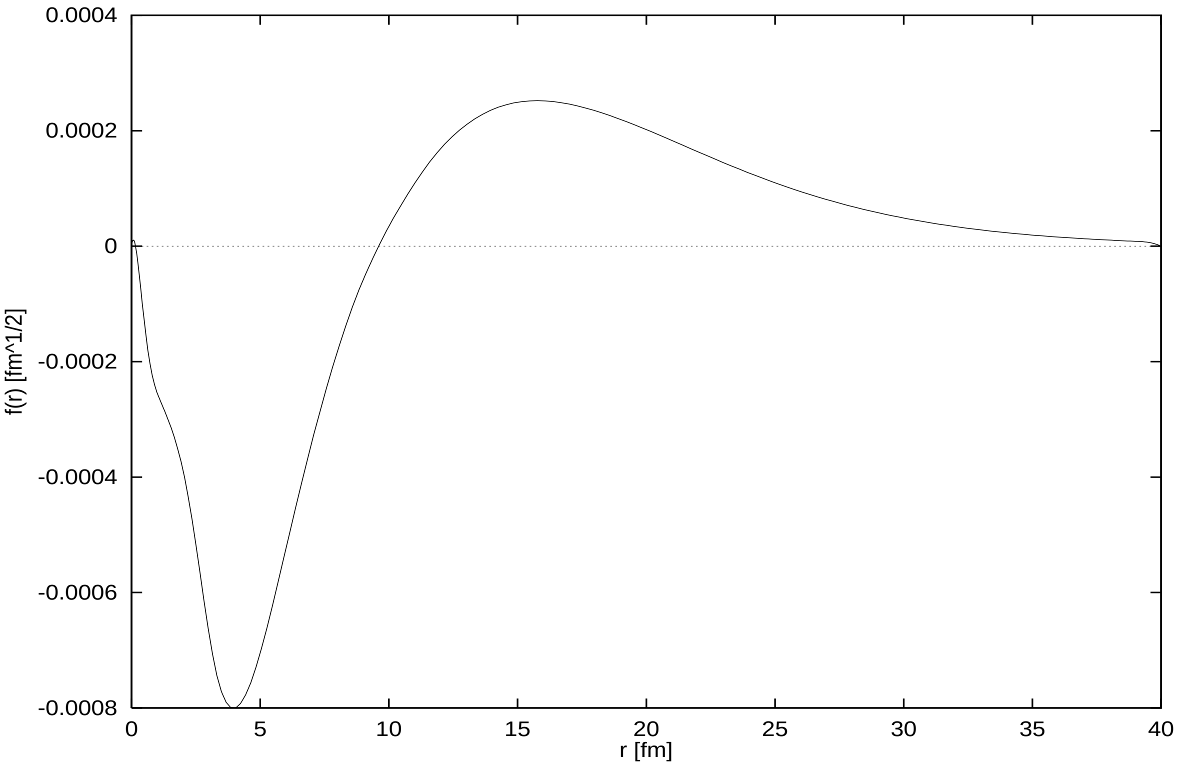
ab, wie dies bekanntermaßen bei anderen Potentialen auch der Fall ist. Leider ist kein Vergleich zu anderen Rechnungen möglich, weil keine Referenzwerte vorliegen.

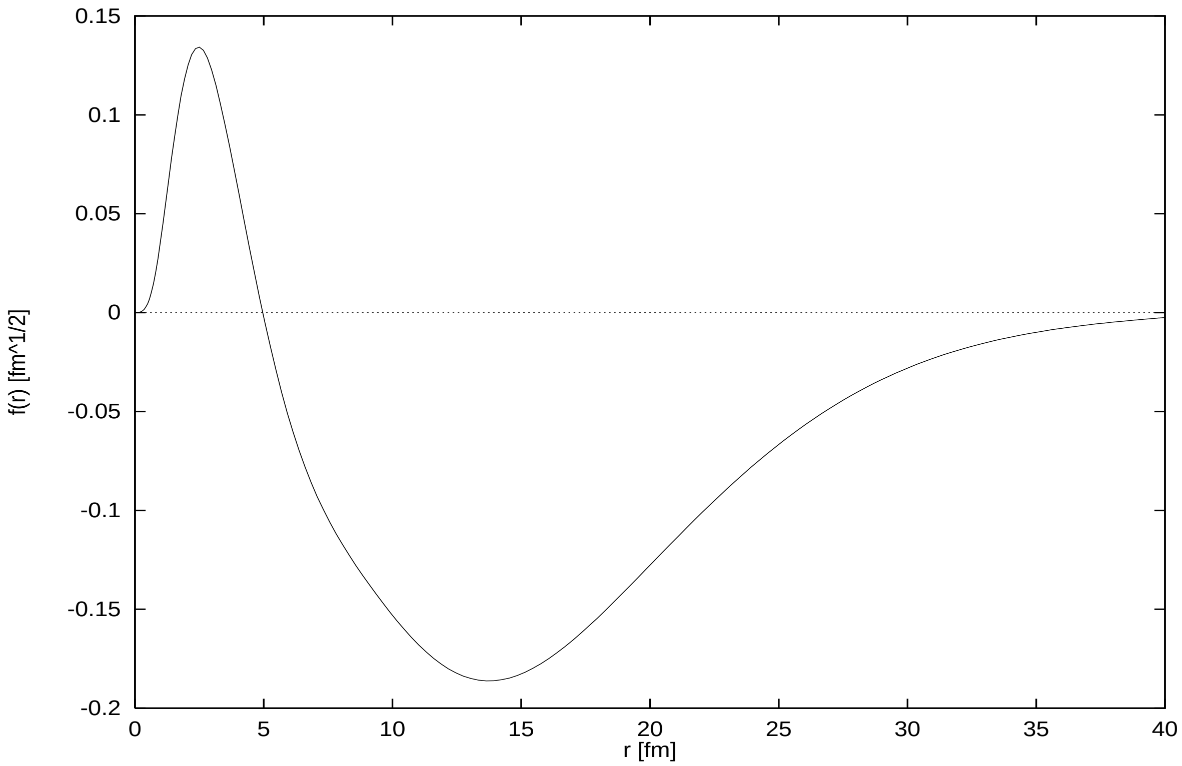
In obiger Tabelle wird auch deutlich, daß es kein ausgezeichnetes Kriterium für die Reihenfolge, in der sich die 'repulsiven' und 'attraktiven' Sturmschen Zustände abwechseln, gibt. Beispielsweise ist im $^1S_0$-Kanal der Zustand mit Index -1 wichtiger als der mit dem Index 1, während der mit dem Index 2 vor jenem mit dem Index -2 Vorrang hat. Im $^3S_1 - {}^3D_1$-Kanal treten sogar nur positive Indizes auf. Man kann diese Fragestellung nur durch einfaches Ausprobieren beantworten. Im allgemeinen wird sie auch von der Sturmschen Energie im betreffenden Kanal abhängen, so daß eine andere Lösung dieses Problems nicht möglich ist.

Im Anschluß sind noch einige der Relativwellenfunktionen f graphisch dargestellt, wobei der obere Index der Nummer des entsprechenden Drei-Körper-Kanals entspricht und im Falle eines gekoppelten Kanals die beiden unteren Zahlen den Sturmschen Index und den Subsystem-Bahndrehimpuls kennzeichnen. Bei einem ungekoppelten Kanal reicht zu dessen Charakterisierung der Sturmsche Index aus.

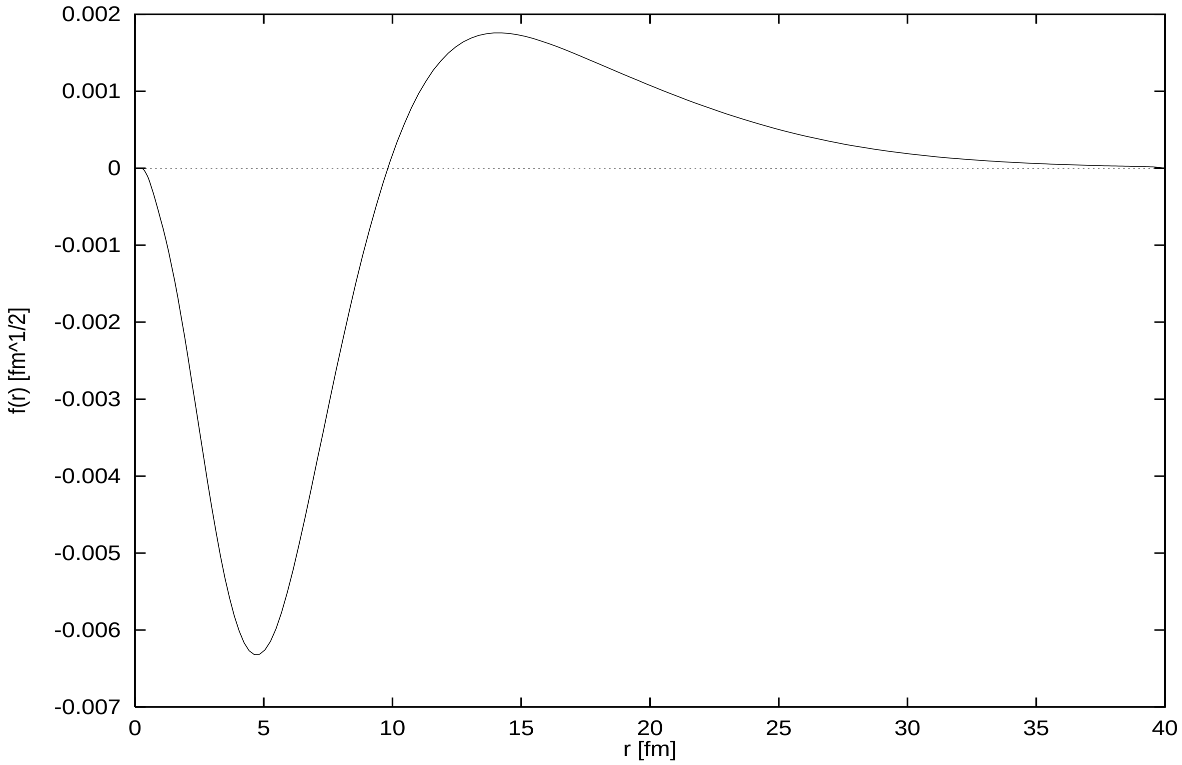
Figure 9: Die Relativwellenfunktionen $f^5_{10}, f^5_{12}, f^6_{10}, f^6_{12}, f^1_1, f^1_{-1}$



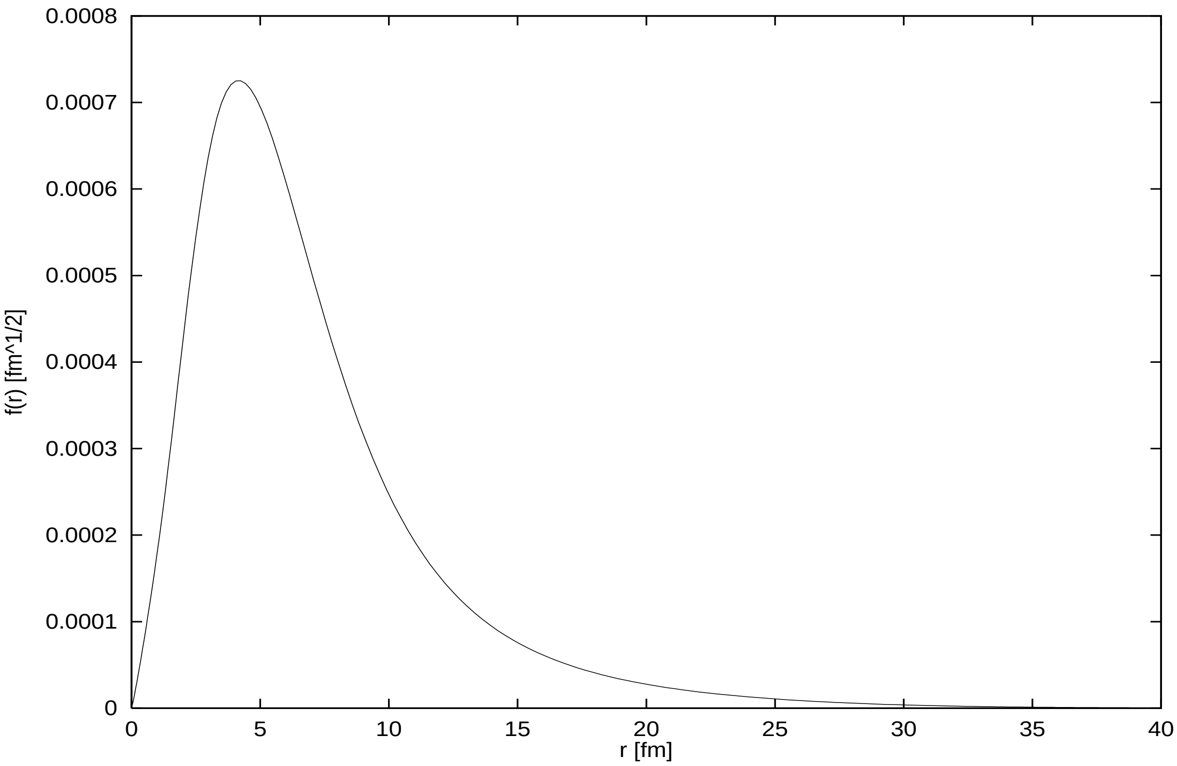


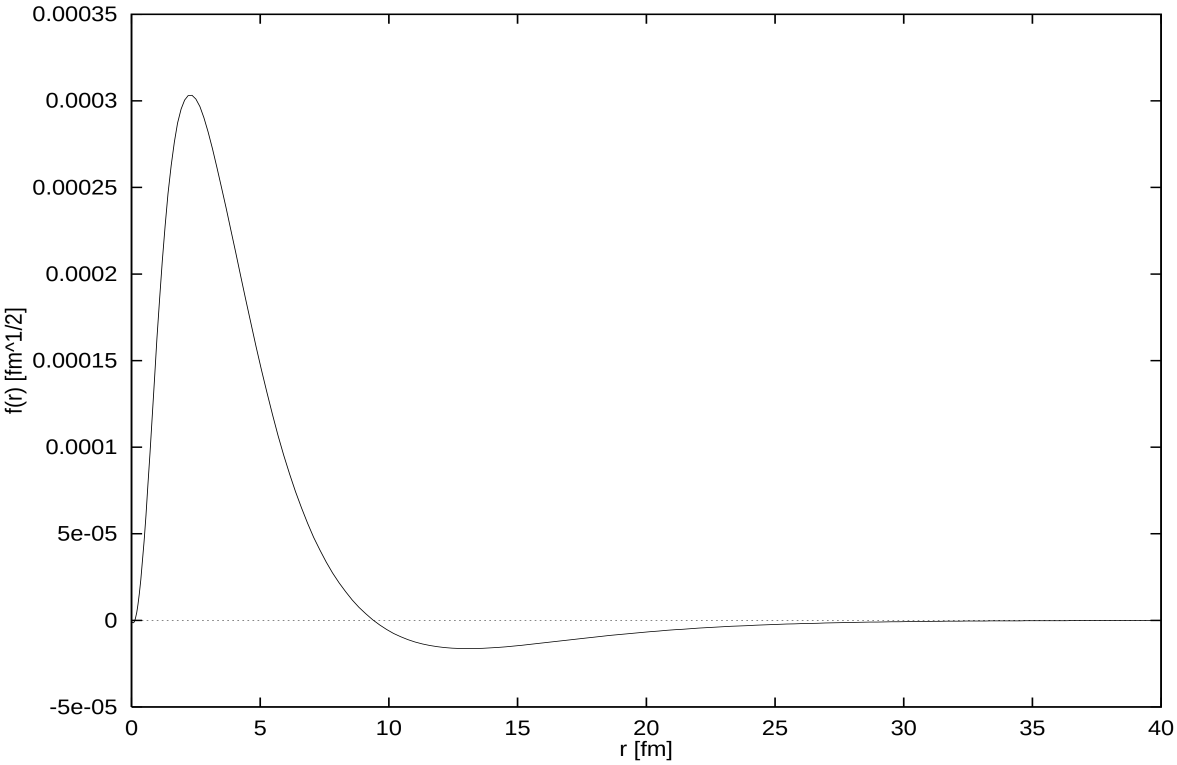


0.15
0.1
0.05
0
-0.05
-0.1
-0.15
-0.2
f(r) [fm^1/2]
0
5
10
15
20
25
30
35
40
r [fm]



0.002
0.001
0
-0.001
-0.002
-0.003
-0.004
-0.005
-0.006
-0.007
f(r) [fm^1/2]
0
5
10
15
20
25
30
35
40
r [fm]


0.0008
0.0007
0.0006
0.0005
0.0004
0.0003
0.0002
0.0001
0
f(r) [fm^1/2]
0
5
10
15
20
25
30
35
40
r [fm]


0.00035
0.0003
0.00025
0.0002
0.00015
0.0001
5e-05
0
-5e-05
f(r) [fm^1/2]
0
5
10
15
20
25
30
35
40
r [fm]

8.3 Die elastische Neutron-Deuteron-Streuung

Vorweg weisen wir darauf hin, daß es aus zeitlichen Gründen im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich war, eine umfassende Behandlung des Streuproblems vorzunehmen. Denn einerseits benötigt besonders die Berechnung der effektiven Potentiale in der B-Spline-Basis enorme Rechenzeiten, andererseits müssen für die Drei-Körper-Rechnungen große Mengen an Arbeitsspeicherkapazität zur Verfügung stehen, die nur zu gewissen Tageszeiten gewährt werden. Weiterhin führt eine hohe Auslastung des CIP-Pools dazu, daß die vorhandene Rechenzeit noch mit anderen Benutzern geteilt werden muß.
Aus diesen Gründen haben wir lediglich exemplarisch einige Rechnungen zu $\Gamma^\pi = \frac{1}{2}^+$ vorgenommen, um wenigstens ein Verhalten der Ergebnisse erkennen zu können. In der nachfolgenden Tabelle sind zunächst die zu diesem Kanal gehörenden Doublet-s-Streulängen, die von vorrangiger Bedeutung sind, für verschiedene Entwicklungsstufen aufgelistet.

Table 11: Die Streulängen a_0^{2+}

$^3S_1 - {}^3D_1$		$^1S_0$		a_0^{2+} [fm]
ν_{min}	ν_{max}	ν_{min}	ν_{max}	
1	1	-	-	-
1	1	-1	-1	2,29
1	2	-1	-1	1,58

Offenbar sind noch einige Entwicklungsstufen notwendig, da keine Konvergenz sichergestellt ist. Nach unseren Überlegungen aus Kapitel 1 wird sich der Wert der berechneten Streulänge jedoch weiter monoton fallend an den experimentellen Wert [15]

$$a_0^{2+^{exp}} = 0,65(4)\,\mathrm{fm} \tag{8.6}$$

annähern. Auch hier existieren keine theoretischen Referenzen, die man zum Vergleich heranziehen kann, was bei diesem Stadium der Entwicklung ohnehin wohl keine weiteren Erkenntnisse bringen würde.
Zum Abschluß sind auf den Abbildungen 10 und 11 die führenden Entwicklungsstufen der Streuphasen δ_0^{2+} und δ_2^{2+} in Abhängigkeit von der Laborenergie E^{Lab} graphisch dargestellt. Auch hier muß die Entwicklung noch weiter getrieben werden, um Konvergenz zu erzielen, prinzipiell scheint das funktionelle Verhalten jedoch richtig zu sein. Die Notation n, m in den Abbildungen dient zur Identifikation der Entwicklung und bedeutet n Sturmsche Funktionen im $^3S_1 - {}^3D_1$-Kanal und m im $^1S_0$-Kanal des Subsystems. In Abbildung 12 sieht man die zugehörigen Relativwellenfunktionen.

Figure 10: Die Streuphase δ_0^{2+}

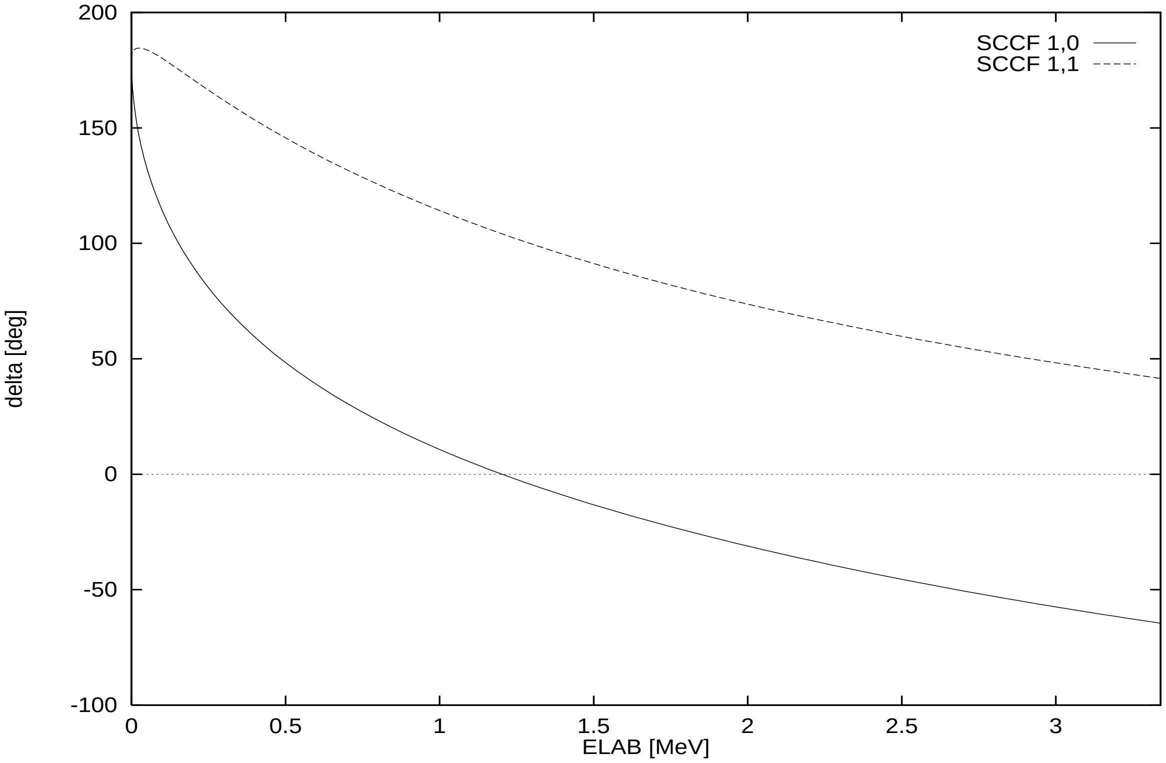


Figure 11: Die Streuphase δ_2^{2+}

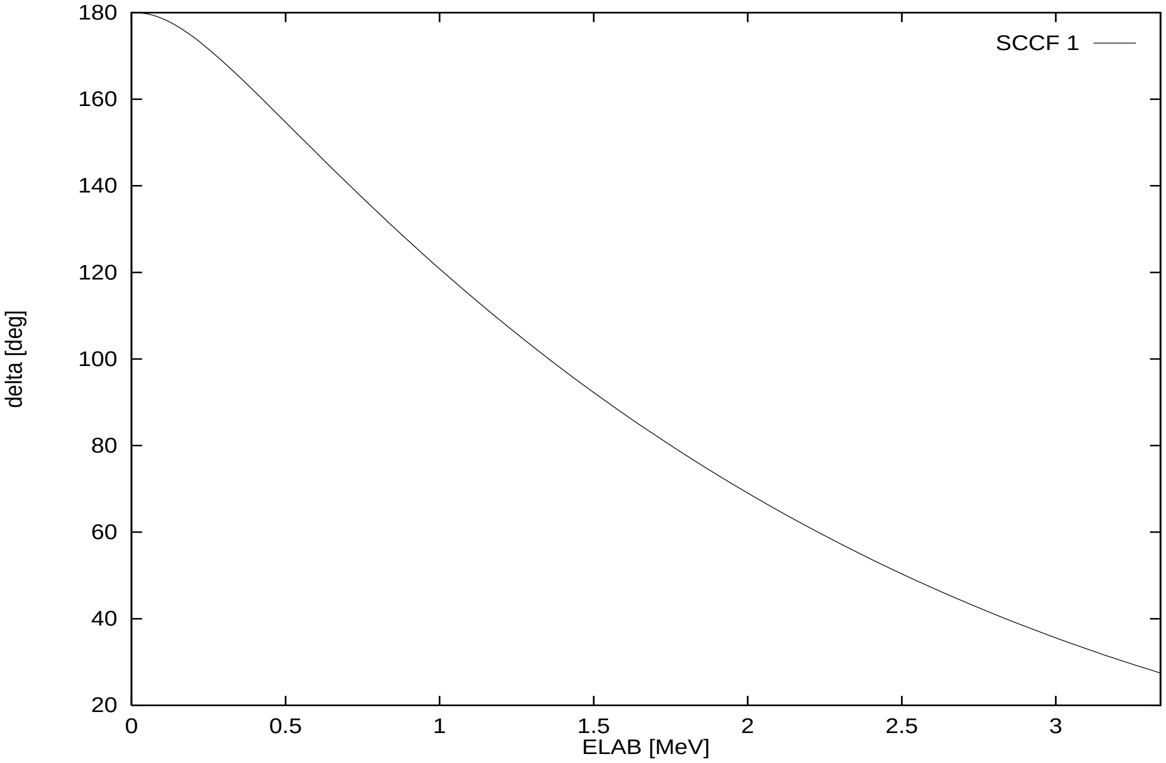
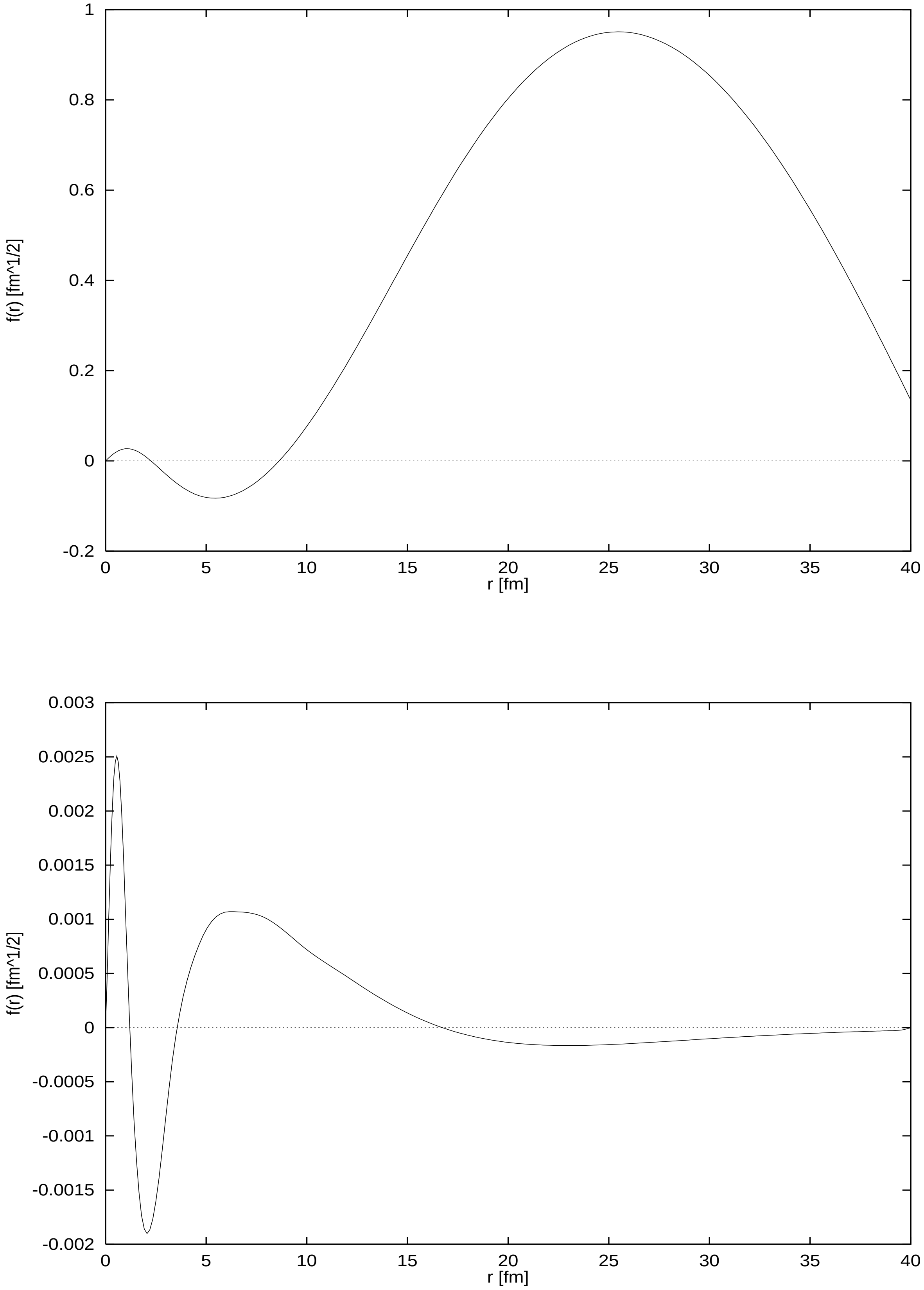
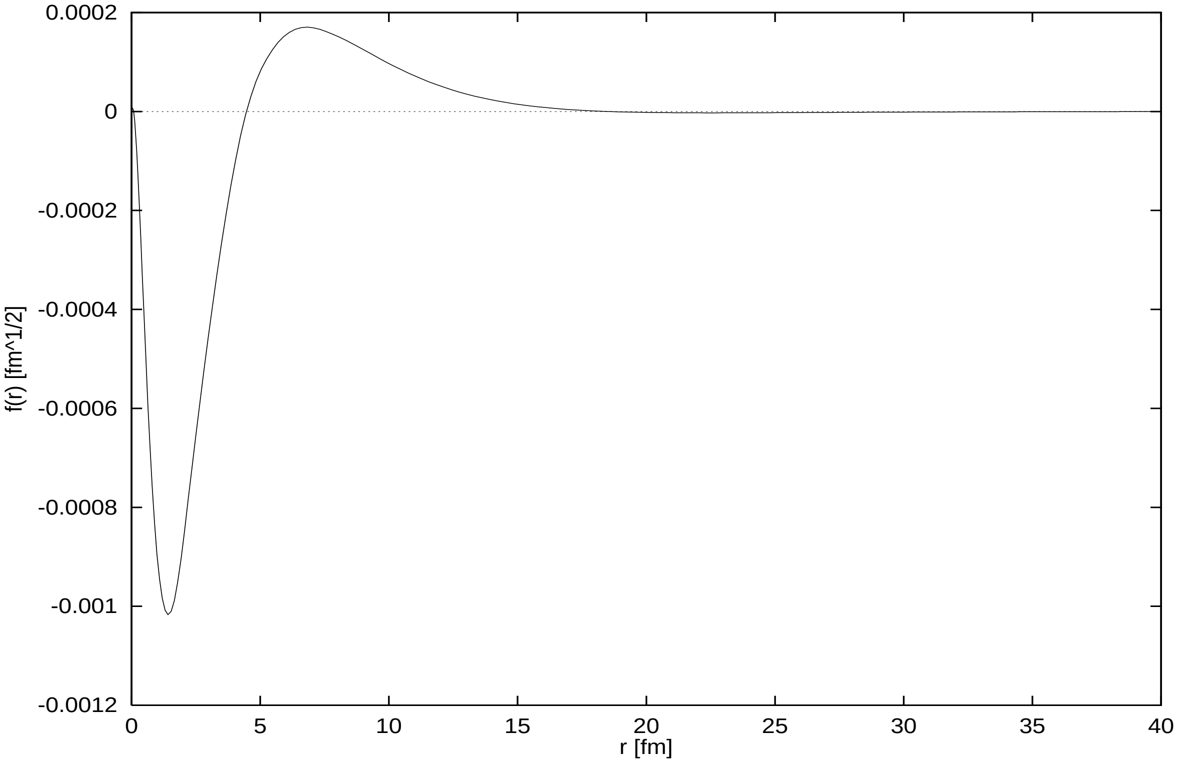


Figure 12: Die Relativwellenfunktionen $f^5_{10}, f^5_{12}, f^1_{-1}$




0.0002
0
-0.0002
-0.0004
-0.0006
-0.0008
-0.001
-0.0012
f(r) [fm^1/2]
0
5
10
15
20
25
30
35
40
r [fm]

9 Fazit und Ausblick

Die Bewertung des SCCF fällt bezüglich theoretischer Gesichtspunkte durchweg positiv aus. Infolge der Verwendung der stationären Schrödingergleichung im Ortsraum, der leicht nachvollziehbaren Schritte, die letztlich zur Herleitung des zu lösenden Gleichungssystems nötig waren und der, in Kapitel 4 dargelegten, äußerst attraktiven Eigenschaften der Sturmschen Funktionen zeigt sich eine große Transparenz der durchgeführten Methode. Auch die simultane Behandlung von Bindungs- und Streurechnungen ist ein weiterer angenehmer Effekt dieses Verfahrens.
Weiterhin können auf diese Weise neben dem nnp-System auch beispielsweise das pnp-System, das kurzreichweitige Kernkräfte und langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung vereint, und auch atomare Systeme behandelt werden, was schon in [1] begonnen wurde. Die Rechnungen für das pnp-System mit realistischem Potential sind schon vollständig programmiert worden, sie müssen jedoch noch getestet und ausgeführt werden, ebenso müssen die in dieser Arbeit angefangenen Streurechnungen noch weiter getrieben werden, um aussagekräftige Ergebnisse erzielen zu können.
Damit kommen wir zu den nachteiligen Eigenschaften, die sich ausschließlich auf den numerischen Teil beschränken. Wie schon in Kapitel 8 erwähnt, nimmt die Ausführung der Programme eine beträchtliche Menge an Zeit- und Speicherbedarf ein, wobei zu beachten ist, daß wir lediglich eine Rechnung unter der Einschränkung $J \leq 1^+$, nämlich der kleinstmöglichen Kanalzahl, durchgeführt haben. Dagegen sind mit anderen Methoden, wie beispielsweise dem hypersphärischen Formalismus oder unter Verwendung der W-Matrix-Formulierung, auch Rechnungen für höhere Subsystem-Drehimpulse um ein Vielfaches schneller möglich.
Unmittelbar an die oben genannten Aufgaben schließen sich auch noch weitere Möglichkeiten zur Forschung an. Zunächst könnte man den Energiebereich ausdehnen:

- Elastische Nukleon-Deuteron-Streuung oberhalb der Schwelle für den Target-Aufbruch,
- inelastische Anregungs- bzw. Umordnungsstreuung bei den atomaren Systemen.

Zum zweiten Punkt wurden in dieser Gruppe schon Rechnungen vorgenommen, die jedoch noch nicht bis zu einem endgültigen Stadium fortgeschritten sind.
Außerdem ergeben sich bezüglich der Methodik noch einige Ansatzpunkte zur Bearbeitung:

- Optimierung der Wahl der Sturmschen Energie,
- Projektion auf und/oder Entwicklung nach Sturmschen Formfaktoren,
- Möglichkeiten zur Behandlung von Vier-Körper-Systemen.

Daneben wäre es wünschenswert, Erweiterungen der Rechnungen auf andere Systeme und Wechselwirkungen vorzunehmen, z.B.:

- nichtrelativistische *constituent quark*-Rechnungen zu Hadronen,
- Bindungszustände, Streuzustände und Resonanzen myonischer Systeme,
- Photodisintegration des Tritons.

Auch hier liegt die Möglichkeit zur Berechnung myonischer Systeme schon vor, es wurden jedoch noch keine befriedigenden Ergebnisse erzielt.

A Die Außenraumlösungen

Die beiden linear unabhängigen Lösungen der freien radialen Schrödinger-Gleichung

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + 2ME \right) u_l(r) = 0 \tag{A.1}$$

zu positiven Energien $E = q^2/2M > 0$ sind die Riccati-Bessel- und Riccati-Neumann-Funktionen $\hat{\jmath}_l(qr)$ und $\hat{n}_l(qr)$. Sie sind gegeben durch:

$$\hat{\jmath}_l(qr) = (qr)^{l+1} \left[\frac{1}{qr} \frac{d}{d(qr)} \right]^l \frac{\sin(qr)}{qr} \tag{A.2}$$

$$\hat{n}_l(qr) = -(qr)^{l+1} \left[-\frac{1}{qr} \frac{d}{d(qr)} \right]^l \frac{\cos(qr)}{qr} \tag{A.3}$$

und besitzen das asymptotische Verhalten [16]:

$$\hat{\jmath}_l(qr) \underset{r\to\infty}{\simeq} \sin(qr - l\frac{\pi}{2}), \tag{A.4}$$

$$\hat{n}_l(qr) \underset{r\to\infty}{\simeq} -\cos(qr - l\frac{\pi}{2}). \tag{A.5}$$

Mit dieser Normierung gilt:

$$\int_0^\infty dr\, \hat{\jmath}_l(qr)\, \hat{\jmath}_l(q'r) = \frac{\pi}{2}\, \delta(q - q'). \tag{A.6}$$

Die exponentiell abklingenden Lösungen zu negativen Energien $E = -\alpha^2/2M < 0$ sind die modifizierten Riccati-Bessel-Funktionen $\hat{k}_l(\alpha r)$. Die ersten vier von ihnen sind gegeben durch:

$$\begin{aligned}
\hat{k}_0(\alpha r) &= \frac{\pi}{2}\, e^{-\alpha r} \\
\hat{k}_1(\alpha r) &= \frac{\pi}{2}\, e^{-\alpha r} \left(1 + \frac{1}{\alpha r} \right) \\
\hat{k}_2(\alpha r) &= \frac{\pi}{2}\, e^{-\alpha r} \left(1 + \frac{3}{\alpha r} + \frac{3}{(\alpha r)^2} \right) \\
\hat{k}_3(\alpha r) &= \frac{\pi}{2}\, e^{-\alpha r} \left(1 + \frac{6}{\alpha r} + \frac{15}{(\alpha r)^2} + \frac{15}{(\alpha r)^3} \right),
\end{aligned} \tag{A.7}$$

und offensichtlich besitzen sie das asymptotische Verhalten [16]:

$$\hat{k}_l(\alpha r) \underset{r\to\infty}{\simeq} e^{-\alpha r}. \tag{A.8}$$

B Die Drehimpulsalgebra

Dieser Abschnitt enthält eine Zusammenstellung einiger für diese Arbeit wesentlicher Formeln. In dieser Arbeit gilt die Phasenkonvention von [17].
Die sphärischen Einheitsvektoren $(\vec{e}^{(1)}_{-1}, \vec{e}^{(1)}_{0}, \vec{e}^{(1)}_{1})$ werden aus den kartesischen Einheitsvektoren $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ durch die Linearkombinationen

$$\vec{e}^{(1)}_0 = i\vec{e}_z, \tag{B.1}$$

$$\vec{e}^{(1)}_{\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mp i\vec{e}_x + \vec{e}_y) \tag{B.2}$$

gebildet. Mit ihnen lassen sich die Vektorkugelfunktionen

$$\vec{Y}^{(l,1)j}_m(\hat{r}) = \sum_{m',m''} Y^{(l)}_{m'}(\hat{r})\, \vec{e}^{(1)}_{m''} \left(\begin{array}{cc|c} l & 1 & j \\ m' & m'' & m \end{array} \right) \tag{B.3}$$

definieren. Die Ortsdarstellung des Impulsvektor-Operators lautet

$$\langle\, \vec{r}\,' \,|\, \vec{q} \,|\, rlm_l \,\rangle = \frac{\delta(r'-r)}{r'^2} i^l \sum_{l'} (-1)^{l'} \hat{l}' \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \vec{Y}^{(l',1)l}_{m_l}(\hat{r}')\, \mathcal{D}_{l'l}(r) \tag{B.4}$$

mit dem Differentialoperator

$$\mathcal{D}_{ll'}(r) = \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1) - l'(l'+1) - 2}{2r} \tag{B.5}$$

und der Abkürzung

$$\hat{l} = \sqrt{2l+1}. \tag{B.6}$$

Das verallgemeinerte Additionstheorem für Kugelflächenfunktionen lautet bei $\vec{r} = \vec{r}_1 + \vec{r}_2$:

$$\begin{aligned} Y^{(l)}_m(\hat{r}) &= \sqrt{4\pi}(-1)^{l+m} \frac{\hat{l}^2}{r^l} \\ &\sum_{l'} \sqrt{\begin{pmatrix} 2l \\ 2l' \end{pmatrix}} \frac{r_1^{l-l'} r_2^{l'}}{\widehat{l-l'}\hat{l}'} \sum_{m',m''} Y^{(l-l')}_{m''}(\hat{r}_1)\, Y^{(l')}_{m'}(\hat{r}_2) \begin{pmatrix} l-l' & l' & l \\ m'' & m' & -m \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{B.7}$$

Das Produkt dreier Kugelflächenfunktionen mit gleichem Argument läßt sich folgendermaßen reduzieren:

$$\begin{aligned} Y^{(l_1)}_{m_1}(\hat{r})\, Y^{(l_2)}_{m_2}(\hat{r})\, Y^{(l_3)}_{m_3}(\hat{r}) &= \frac{\hat{l}_1\hat{l}_2\hat{l}_3}{4\pi} \sum_{ll'} \hat{l}^2\hat{l}' \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &\sum_{m,m'} (-1)^{m+m'} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & l \\ m_2 & m_3 & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l & l' \\ m_1 & m & -m' \end{pmatrix} Y^{(l')}_{m'}(\hat{r}). \end{aligned} \tag{B.8}$$

Das Produkt zweier Legendre-Polynome läßt sich nach Legendre-Polynomen entwickeln:

$$P_{l_1}(x)\, P_{l_2}(x) = \sum_l \hat{l}^2 \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} P_l(x). \tag{B.9}$$

Für die antiparallele Addition zweier Drehimpulse nimmt das $3j$-Symbol eine besonders einfache Form an:

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_1 - l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{l_1}}{\hat{l}_1} \frac{\begin{pmatrix} l_1 \\ l_2 \end{pmatrix}}{\sqrt{\begin{pmatrix} 2l_1 \\ 2l_2 \end{pmatrix}}}. \tag{B.10}$$

Der Betrag einer Vektor-Differenz läßt sich nach Legendre-Polynomen entwickeln:

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} = \sum_{\lambda=0}^{\infty} P_\lambda(\hat{r}\hat{r}') \, \frac{\min(r,r')^\lambda}{\max(r,r')^{\lambda+1}}. \tag{B.11}$$

Die Partialwellenentwicklung der ebenen Welle lautet:

$$(2\pi)^{3/2} \langle \, \vec{r} \, | \, \vec{q} \, \rangle = e^{i\vec{q}\vec{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l \, \frac{\hat{\jmath}_l(qr)}{qr} \, Y_m^{(l)*}(\hat{q}) \, Y_m^{(l)}(\hat{r}). \tag{B.12}$$

Daraus erhält man für das Ortsmatrixelement:

$$\langle \, rlm \, | \, ql'm' \, \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \, \delta_{ll'} \, \delta_{mm'} \, \frac{\hat{\jmath}_l(qr)}{qr}. \tag{B.13}$$

Orts- und Impulsdarstellung der durch

$$\langle \, E'l'm' \, | \, Elm \, \rangle = \delta(E'-E) \, \delta_{l'l} \, \delta_{m'm} \tag{B.14}$$

definierten Eigenzustände zu $\{H_0, \vec{l}^2, l_z\}$ lauten mit $E_q = \frac{q^2}{2M}$

$$\langle \, \vec{r} \, | \, Elm \, \rangle = \sqrt{\frac{2M}{\pi q}} \, i^l \, \hat{\jmath}_l(qr) \, Y_m^{(l)}(\hat{r}), \tag{B.15}$$

$$\langle \, \vec{q} \, | \, Elm \, \rangle = \frac{1}{\sqrt{Mq}} \, \delta(E_q - E) \, Y_m^{(l)}(\hat{q}). \tag{B.16}$$

C Der Koordinatensatzwechsel

C.1 Der Spinraum

Der Koordinatensatzwechsel im Spin-Raum erfolgt durch

$$ {}_\alpha\langle\, (S\tfrac{1}{2})X M_X \,|\, (S'\tfrac{1}{2})X' M'_X \,\rangle_\beta = \delta_{XX'}\, \delta_{M_X M'_X}\; D^{\alpha\beta}(S,S',X) \tag{C.1} $$

mit dem Spin-Umkopplungskoeffizienten

$$ D^{\alpha\beta}(S,S',X) = (-1)^{S'} \hat{S}\hat{S}' \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S \\ \frac{1}{2} & X & S' \end{Bmatrix}. \tag{C.2} $$

Der Spin-Umkopplungskoeffizient erfüllt die Unitaritätsrelation

$$ \sum_{S''} D^{\alpha\beta}(S,S'',X)\; D^{\alpha\beta}(S',S'',X) = \delta_{SS'} \tag{C.3} $$

sowie Racah's Summenregel

$$ \sum_{S''} D^{\beta\alpha}(S,S'',X)\; D^{\alpha\beta}(S',S'',X) = D^{\alpha\beta}(S,S',X). \tag{C.4} $$

Der Spin-Umkopplungskoeffizient weist folgende Symmetrie auf:

$$ \begin{aligned} D^{\alpha\beta}(S,S',X) &= D^{\beta\alpha}(S',S,X) \\ &= (-1)^{S+S'}\; D^{\beta\alpha}(S,S',X). \end{aligned} \tag{C.5} $$

C.2 Der Isospinraum

Der Koordinatensatzwechsel im Isospin-Raum wird in gekoppelter Basis durch

$$ {}_\alpha\langle\, (T\tfrac{1}{2})I M_I \,|\, (T'\tfrac{1}{2})I' M'_I \,\rangle_\beta = \delta_{II'}\, \delta_{M_I M'_I}\; E^{\alpha\beta}(T,T',I) \tag{C.6} $$

mit dem Isospin-Umkopplungskoeffizienten

$$ E^{\alpha\beta}(T,T',I) = (-1)^{T'} \hat{T}\hat{T}' \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T \\ \frac{1}{2} & I & T' \end{Bmatrix} \tag{C.7} $$

durchgeführt. Der Isospin-Koeffizient genügt den Beziehungen (C.3) und (C.4) ebenso wie der Spin-Umkopplungskoeffizient und weist auch die selbe Symmetrie (C.5) auf.

C.3 Der Basiswechsel zwischen der Kanalspinbasis und der ungekoppelten Basis

Der Wechsel zwischen diesen beiden Basen erfolgt durch:

$$ \begin{aligned} |\, (((LS)J\tfrac{1}{2})kl)\Gamma M_\Gamma \,\rangle = & \sum_{B,X} C_{BX}(L,S,J,k,l,\Gamma) \\ & \sum_{M_B,M_X} |\, (S\tfrac{1}{2})X M_X \,\rangle \; |\, (Ll)B M_B \,\rangle \left(\begin{array}{cc|c} X & B & \Gamma \\ M_X & M_B & M_\Gamma \end{array} \right) \end{aligned} \tag{C.8} $$

mit

$$ C_{BX}(L,S,J,k,l,\Gamma) = (-1)^{L+l-B+S+\frac{1}{2}-X} \hat{J}\hat{k}\hat{B}\hat{X} \begin{Bmatrix} L & k & X \\ \frac{1}{2} & S & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & k & X \\ \Gamma & B & l \end{Bmatrix}. \tag{C.9} $$

C.4 Der Orts-Spin-Raum

Der Koordinatensatzwechsel im Orts-Spin-Raum hat die folgende Form:

$$
\begin{aligned}
&{}_{\alpha}\langle\, \rho r(((LS)J\tfrac{1}{2})kl)\Gamma M_\Gamma \,|\, \rho' r'(((L'S')J'\tfrac{1}{2})k'l')\Gamma' M'_\Gamma \,\rangle_\beta \\
&= \delta_{\Gamma\Gamma'}\, \delta_{M_\Gamma M'_\Gamma} \sum_X D^{\alpha\beta}(S,S',X) \sum_B C_{BX}(L,S,J,k,l,\Gamma)\, C_{BX}(L',S',J',k',l',\Gamma) \\
&\sum_\lambda \int_{-1}^{1} dx\; P_\lambda(x) \frac{\delta(\rho-\rho_\alpha(\vec{\rho}'_\beta,\vec{r}'_\beta))}{\rho^{L+2}} \frac{\delta(r-r_\alpha(\vec{\rho}'_\beta,\vec{r}'_\beta))}{r^{l+2}} \\
&\sum_{L'',l''} r'^{L+l-L''-l''}\, \rho'^{L''+l''}\, M^{\alpha\beta}_{\lambda L''l''}(L,l,L',l',B)
\end{aligned}
\tag{C.10}
$$

mit

$$\vec{\rho}_\alpha(\vec{\rho}_\beta,\vec{r}_\beta) = -\frac{\mu_\beta}{m_\gamma}\vec{\rho}_\beta + \vec{r}_\beta, \tag{C.11}$$

$$\vec{r}_\alpha(\vec{\rho}_\beta,\vec{r}_\beta) = -\frac{\mu_\beta}{M_\alpha}\vec{\rho}_\beta - \frac{\mu_\alpha}{m_\gamma}\vec{r}_\beta, \tag{C.12}$$

$$x = \hat{\rho}_\beta \hat{r}_\beta \tag{C.13}$$

sowie dem Orts-Umkopplungskoeffizienten

$$
\begin{aligned}
&M^{\alpha\beta}_{\lambda L''l''}(L,l,L',l',B) \\
&= i^{L'+l'-L-l} \frac{\hat{L}^2 \hat{l}^2 \hat{L}' \hat{l}'}{2} \left(-\frac{\mu_\beta}{m_\gamma}\right)^{L''} \left(-\frac{\mu_\beta}{M_\alpha}\right)^{l''} \left(-\frac{\mu_\alpha}{m_\gamma}\right)^{l-l''} (-1)^{L+l} \sqrt{\binom{2L}{2L''}\binom{2l}{2l''}} \\
&(-1)^\lambda \hat{\lambda}^2 \sum_{\lambda',\lambda''} \hat{\lambda}'^2 \hat{\lambda}''^2 (-1)^{\lambda'+\lambda''} \begin{pmatrix} L-L'' & l-l'' & \lambda'' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & \lambda'' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&\begin{pmatrix} L'' & l'' & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L' & \lambda' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} L' & l' & B \\ \lambda'' & \lambda' & \lambda \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L-L'' & l-l'' & \lambda'' \\ L'' & l'' & \lambda' \\ L & l & B \end{Bmatrix}.
\end{aligned}
\tag{C.14}
$$

Ebenso ist es möglich, nach (ρ,ρ') statt nach (ρ,r) aufzulösen. Man erhält dann

$$
\begin{aligned}
&{}_{\alpha}\langle\, \rho r(((LS)J\tfrac{1}{2})kl)\Gamma M_\Gamma \,|\, \rho' r'(((L'S')J'\tfrac{1}{2})k'l')\Gamma' M'_\Gamma \,\rangle_\beta \\
&= \delta_{\Gamma\Gamma'}\, \delta_{M_\Gamma M'_\Gamma} \sum_X D^{\alpha\beta}(S,S',X) \sum_B C_{BX}(L,S,J,k,l,\Gamma)\, C_{BX}(L',S',J',k',l',\Gamma) \\
&\sum_\lambda \int_{-1}^{1} dx\; P_\lambda(x) \frac{\delta(\rho-\rho_\alpha(\vec{r}_\alpha,\vec{r}'_\beta))}{\rho^{L+2}} \frac{\delta(\rho'-\rho_\beta(\vec{r}_\alpha,\vec{r}'_\beta))}{\rho'^{L'+2}} \\
&\sum_{L'',L'''} r^{L+L'-L''-L'''}\, r'^{L''+L'''}\, N^{\alpha\beta}_{\lambda L''L'''}(L,l,L',l',B)
\end{aligned}
\tag{C.15}
$$

mit

$$\vec{\rho}_\alpha(\vec{r}_\alpha,\vec{r}_\beta) = \frac{M_\alpha}{m_\gamma}\vec{r}_\alpha + \frac{M_\alpha}{\mu_\beta}\vec{r}_\beta \tag{C.16}$$

$$\vec{\rho}_\beta(\vec{r}_\alpha,\vec{r}_\beta) = -\frac{M_\beta}{\mu_\alpha}\vec{r}_\alpha - \frac{M_\beta}{m_\gamma}\vec{r}_\beta, \tag{C.17}$$

$$x = \hat{r}_\alpha \hat{r}_\beta \tag{C.18}$$

sowie dem Orts-Umkopplungskoeffizienten

$$
\begin{aligned}
&N^{\alpha\beta}_{\lambda L'' L'''}(L,l,L',l',B)\\
&= \left(\frac{M_\alpha}{\mu_\beta}\right)^3 i^{L'+l'-L-l}\,\frac{\hat{L}^2\hat{L}'^2\hat{l}\hat{l}'}{2}\left(\frac{M_\alpha}{m_\gamma}\right)^{L-L''}\left(\frac{M_\alpha}{\mu_\beta}\right)^{L''}\left(-\frac{M_\beta}{\mu_\alpha}\right)^{L'-L'''}\left(-\frac{M_\beta}{m_\gamma}\right)^{L'''}(-1)^B\\
&\sqrt{\binom{2L}{2L''}\binom{2L'}{2L'''}}\,(-1)^\lambda\hat{\lambda}^2\sum_{\lambda',\lambda''}\hat{\lambda}'^2\hat{\lambda}''^2(-1)^{\lambda'+\lambda''}\begin{pmatrix} L-L'' & L'-L''' & \lambda'' \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l & \lambda'' & \lambda \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\\
&\begin{pmatrix} L'' & L''' & \lambda' \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l' & \lambda' & \lambda \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\\
&\sum_{\lambda'''}\hat{\lambda}'''^2\begin{Bmatrix} l' & L' & B \\ L & l & \lambda'''\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} l' & l & \lambda''' \\ \lambda'' & \lambda' & \lambda\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} L-L'' & L'-L''' & \lambda'' \\ L'' & L''' & \lambda' \\ L & L' & \lambda'''\end{Bmatrix}. \qquad \text{(C.19)}
\end{aligned}
$$

Beide Orts-Umkopplungskoeffizienten erhalten die Parität und weisen bei identischen Massen folgende Symmetrie auf:

$$
\begin{aligned}
M^{\alpha\gamma}_{\lambda L'' l''}(L,l,L',l',B) &= (-1)^{L+L'}\, M^{\alpha\beta}_{\lambda L'' l''}(L,l,L',l',B), &\text{(C.20)}\\
N^{\alpha\gamma}_{\lambda L'' L'''}(L,l,L',l',B) &= (-1)^{L+L'}\, N^{\alpha\beta}_{\lambda L'' L'''}(L,l,L',l',B). &\text{(C.21)}
\end{aligned}
$$

D Die Matrixelemente

Zunächst schreibt man den Operator in (5.11) noch mit Gleichung (2.16) und der Subsystem-Schrödinger-Gleichung (4.1) um:

$$H - E = \frac{M_\alpha}{\mu_\beta m_\gamma}\,\vec{p}_\alpha\vec{p}_\beta - \Big(E - \frac{M_\alpha}{\mu_\beta}\,(\hat{E}_\alpha + \hat{E}_\beta)\Big) + \frac{\eta_\alpha - \frac{M_\alpha}{\mu_\beta}}{\eta_\alpha}V_\alpha + \frac{\eta_\beta - \frac{M_\alpha}{\mu_\beta}}{\eta_\beta}V_\beta + V_\gamma. \tag{D.1}$$

Dann erhält man für die Austauschpotentiale:

$$\begin{aligned}
&K^{(\sigma\tau)(\sigma'\tau')\omega}_{\nu L\,\nu' L'}(r, r'; E)\\
&\quad= 2\Bigg(\frac{M_\alpha}{\mu_\beta m_\gamma}\;{}_\alpha\langle\,\phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega\,|\,\vec{p}_\alpha\vec{p}_\beta\,|\,\phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_\beta\\
&\quad- \Big(E - \frac{M_\alpha}{\mu_\beta}(\hat{E}^\sigma + \hat{E}^{\sigma'})\Big)\;{}_\alpha\langle\,\phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega\,|\,\phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_\beta\\
&\quad+ \frac{\eta^\sigma_\nu - \frac{M_\alpha}{\mu_\beta}}{\eta^\sigma_\nu}\;{}_\alpha\langle\,\phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega\,|\,V_\alpha\,|\,\phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_\beta\\
&\quad+ \frac{\eta^{\sigma'}_{\nu'} - \frac{M_\alpha}{\mu_\beta}}{\eta^{\sigma'}_{\nu'}}\;{}_\alpha\langle\,\phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega\,|\,V_\beta\,|\,\phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_\beta\\
&\quad+ {}_\alpha\langle\,\phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega\,|\,V_\gamma\,|\,\phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_\beta\Bigg).
\end{aligned} \tag{D.2}$$

Die Matrixelemente

$$ {}_\alpha\langle\,\phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega\,|\,\phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_\beta, \tag{D.3}$$
$$ {}_\alpha\langle\,\phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega\,|\,\vec{p}_\alpha\vec{p}_\beta\,|\,\phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_\alpha \tag{D.4}$$

enthalten keinen Wechselwirkungsoperator. Die Wechselwirkungs-Matrixelemente

$$ {}_\alpha\langle\,\phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega\,|\,V_\alpha\,|\,\phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_\beta, \tag{D.5}$$
$$ {}_\alpha\langle\,\phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega\,|\,V_\beta\,|\,\phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_\beta \tag{D.6}$$

werden unter Verwendung des Ortsumkopplungskoeffizienten N berechnet, während die beiden verbleibenden Matrixelemente

$$ {}_\alpha\langle\,\phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega\,|\,V_\beta\,|\,\phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_\alpha, \tag{D.7}$$
$$ {}_\alpha\langle\,\phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega\,|\,V_\gamma\,|\,\phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega\,\rangle_\beta \tag{D.8}$$

durch M ausgedrückt werden. Dies ergibt die günstgste Konstellation für die Anwendung der Galerkin-Methode.

D.1 Die Matrixelemente ohne Potential

Für das Matrixelement (D.3) erhält man direkt

$$\begin{aligned}
&{}_\alpha\langle\,\phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega\,|\,\phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega'\,\rangle_\beta\\
&= \delta_{\omega\omega'}\;E^{\alpha\beta}(T, T', I)\sum_X D^{\alpha\beta}(S, S', X)\\
&\sum_B C_{BX}(L, S, J, k, l, \Gamma)\,C_{BX}(L', S', J', k', l', \Gamma)\\
&\sum_\lambda \int_{-1}^{1} dx\;P_\lambda(x)\;\frac{\phi^\sigma_{\nu\,L}(\rho_\alpha(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_\beta))}{\rho^L_\alpha(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_\beta)}\;\frac{\phi^{\sigma'}_{\nu'\,L'}(\rho_\beta(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_\beta))}{\rho^{L'}_\beta(\vec{r}_\alpha, \vec{r}'_\beta)}\\
&\sum_{L'', L'''} r^{L+L'-L''-L'''}\,r'^{L''+L'''}\,N^{\alpha\beta}_{\lambda L'' L'''}(L, l, L', l', B).
\end{aligned} \tag{D.9}$$

Das Matrixelement (D.4) läßt sich auf ähnliche Weise herleiten:

$$
\begin{aligned}
&{}_\alpha\langle\, \phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega \,|\, \vec{p}_\alpha \vec{p}_\beta \,|\, \phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega' \,\rangle_\beta \\
&= \delta_{\omega\omega'}\; E^{\alpha\beta}(T,T',I) \sum_X D^{\alpha\beta}(S,S',X) \\
&\sum_B C_{BX}(L,S,J,k,l,\Gamma)\, C_{BX}(L',S',J',k',l',\Gamma) \\
&\sum_{L_1,L_1'} \sum_\lambda \int_{-1}^{1} dx\; P_\lambda(x)\; \frac{\mathcal{D}_{L_1 L}\phi^\sigma_{\nu\, L}(\rho_\alpha(\vec{r}_\alpha,\vec{r}'_\beta))}{\rho_\alpha^{L_1}(\vec{r}_\alpha,\vec{r}'_\beta)}\; \frac{\mathcal{D}_{L_1' L'}\phi^{\sigma'}_{\nu'\, L'}(\rho_\beta(\vec{r}_\alpha,\vec{r}'_\beta))}{\rho_\beta^{L_1'}(\vec{r}_\alpha,\vec{r}'_\beta)} \\
&\sum_{L'',L'''} r^{L_1+L_1'-L''-L'''}\, r'^{L''+L'''}\, Z^{\alpha\beta}_{L_1 L_1' \lambda L'' L'''}(L,l,L',l',B).
\end{aligned} \tag{D.10}
$$

Hierbei ist der Koeffizient $Z^{\alpha\beta}$ gegeben durch

$$
\begin{aligned}
&Z^{\alpha\beta}_{L_1 L_1' \lambda L'' L'''}(L,l,L',l',B) \\
&= -\left(\frac{M_\alpha}{\mu_\beta}\right)^3 i^{L'+l'-L-l}\, \frac{\hat{L}\hat{L}'\hat{l}\hat{l}'}{2} \left(\frac{M_\alpha}{m_\gamma}\right)^{L_1-L''} \left(\frac{M_\alpha}{\mu_\beta}\right)^{L''} \left(-\frac{M_\beta}{\mu_\alpha}\right)^{L_1'-L'''} \left(-\frac{M_\beta}{m_\gamma}\right)^{L'''} (-1)^B \\
&\sqrt{\begin{pmatrix} 2L_1 \\ 2L'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2L_1' \\ 2L''' \end{pmatrix}}\, \hat{L_1}^3 \hat{L_1}'^3 \begin{pmatrix} L_1 & 1 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_1' & 1 & L' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} (-1)^\lambda \hat{\lambda}^2 \sum_{\lambda',\lambda''} \hat{\lambda}'^2 \hat{\lambda}''^2 (-1)^{\lambda'+\lambda''} \\
&\begin{pmatrix} L_1-L'' & L_1'-L''' & \lambda'' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \lambda'' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L'' & L''' & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & \lambda' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&\sum_{\lambda'''} \hat{\lambda}'''^2 (-1)^{\lambda'''} \begin{Bmatrix} L' & L & \lambda''' \\ L_1 & L_1' & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l' & L' & B \\ L & l & \lambda''' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l' & l & \lambda''' \\ \lambda'' & \lambda' & \lambda \end{Bmatrix} \\
&\begin{Bmatrix} L_1-L'' & L_1'-L''' & \lambda'' \\ L'' & L''' & \lambda' \\ L_1 & L_1' & \lambda''' \end{Bmatrix}.
\end{aligned} \tag{D.11}
$$

D.2 Die Matrixelemente nicht-lokaler Potentiale

Die nukleare Wechselwirkung wird durch nicht-lokale Potentiale beschrieben. Das Matrixelement (D.7) läßt sich am schwierigsten berechnen:

$$
\begin{aligned}
&{}_\alpha\langle\, \phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega \,|\, V_\beta \,|\, \phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega' \,\rangle_\alpha \\
&= \delta_{\omega\omega'} \sum_{\sigma'',\tau''} \sum_{L'',L'''} \int_0^\infty d\rho\, \rho^2\, V^{\sigma''}_{L''L'''}(\rho) \int_0^\infty dr''\, r''^2 \\
&E^{\alpha\beta}(T,T'',I)\, E^{\beta\alpha}(T'',T',I) \sum_X D^{\alpha\beta}(S,S'',X) \sum_{X'} D^{\beta\alpha}(S'',S',X') \\
&\sum_B C_{BX}(L,S,J,k,l,\Gamma)\, C_{BX}(L'',S'',J'',k'',l'',\Gamma) \\
&\sum_{B'} C_{B'X'}(L''',S'',J'',k'',l'',\Gamma)\, C_{B'X'}(L',S',J',k',l',\Gamma) \\
&\sum_\lambda \int_{-1}^1 dx\, P_\lambda(x) \frac{\phi^\sigma_{\nu\, L}(\rho_\alpha(\vec\rho_\beta,\vec r''_\beta))}{\rho^L_\alpha(\vec\rho_\beta,\vec r''_\beta)} \frac{\delta(r - r_\alpha(\vec\rho_\beta,\vec r''_\beta))}{r^{l+2}} \\
&\sum_{L_1,l_1} r''^{L+l-L_1-l_1} \rho^{L_1+l_1} M^{\alpha\beta}_{\lambda L_1 l_1}(L,l,L'',l'',B) \\
&\sum_{\lambda'} \int_{-1}^1 dx'\, P_{\lambda'}(x') \frac{\phi^{\sigma'}_{\nu'\, L'}(\rho_\alpha(\vec\rho_\beta,\vec r''_\beta))}{\rho^{L'}_\alpha(\vec\rho_\beta,\vec r''_\beta)} \frac{\delta(r' - r_\alpha(\vec\rho_\beta,\vec r''_\beta))}{r'^{l'+2}} \\
&\sum_{L'_1,l'_1} r''^{L'+l'-L'_1-l'_1} \rho^{L'_1+l'_1} M^{\beta\alpha}_{\lambda' L'_1 l'_1}(L''',l'',L',l',B'). \qquad \text{(D.12)}
\end{aligned}
$$

Das Matrixelement (D.8) unterscheidet sich von dem obigen (D.7) nur durch die Koordinatensatzindizes. Deren Transformation liefert wegen (C.5) und (C.20) einen Faktor

$$(-1)^{S+S''}\,(-1)^{T+T''}\,(-1)^{L+L''} = (-1)^{L+S+T}\,(-1)^{L''+S''+T''} = (-1)^2 = 1 \qquad \text{(D.13)}$$

und somit

$${}_\alpha\langle\, \phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega \,|\, V_\gamma \,|\, \phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega' \,\rangle_\beta = {}_\alpha\langle\, \phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega \,|\, V_\beta \,|\, \phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega' \,\rangle_\alpha. \qquad \text{(D.14)}$$

Schließlich findet man für die Matrixelemente (D.5) und (D.6)

$$
\begin{aligned}
&{}_\alpha\langle\, \phi_\nu r(L\sigma\tau)\omega \,|\, V_\alpha \,|\, \phi_{\nu'} r'(L'\sigma'\tau')\omega' \,\rangle_\beta \\
&= \delta_{\omega\omega'}\, E^{\alpha\beta}(T,T',I) \sum_X D^{\alpha\beta}(S,S',X) \\
&\sum_{B,L''} C_{BX}(L'',S,J,k,l,\Gamma)\, C_{BX}(L',S',J',k',l',\Gamma) \\
&\sum_\lambda \int_{-1}^1 dx\, P_\lambda(x)\, \frac{\phi^\sigma_{\nu\, L}(\rho_\alpha(\vec r_\alpha,\vec r'_\beta))}{\rho^{L''}_\alpha(\vec r_\alpha,\vec r'_\beta)}\, \frac{\phi^{\sigma'}_{\nu'\, L'}(\rho_\beta(\vec r_\alpha,\vec r'_\beta))}{\rho^{L'}_\beta(\vec r_\alpha,\vec r'_\beta)} V^\sigma_{LL''}(\rho_\alpha(\vec r_\alpha,\vec r'_\beta)) \\
&\sum_{L_1,L'_1} r^{L''+L'-L_1-L'_1}\, r'^{L_1+L'_1} N^{\alpha\beta}_{\lambda L_1 L'_1}(L'',l,L',l',B) \qquad \text{(D.15)}
\end{aligned}
$$

sowie dasselbe mit $V^{\sigma'}_{L''L'}(\rho_\beta(\vec r_\alpha,\vec r'_\beta))$ und Ersetzen von L'' durch L bzw. von L' durch L''.

List of Tables

List of Figures

References

[1] R. E. Kersting, *Quantenmechanische Drei-Körper-Systeme im Coupled-Channels-Formalismus mit Sturmschen Zuständen*, Phd thesis, Universität Bonn, 1996.

[2] R. E. Kersting, *Das Neutron-Deuteron-Problem im Close-Coupling-Formalismus mit Sturmschen Funktionen*, Master's thesis, Universität Bonn, 1992.

[3] R. B. Wiringa, R. A. Smith, T. L. Ainsworth, *Nucleon-nucleon potentials with and without Δ (1232) degrees of freedom*, Amer. Phys. Soc, 1984.

[4] H. Massey and C. Mohr, *The Collision of Slow Electrons with Atoms. I.-General Theory and Elastic Collisions*, Proc. Roy. Soc. **A136**, 289 (1932).

[5] J. Wheeler, *Molecular Viewpoints in Nuclear Structure*, Phys. Rev. **52**, 1083 (1937).

[6] J. Wheeler, *On the Mathematical Description of Light Nuclei by the Method of Resonating Group Structure*, Phys. Rev. **52**, 1107 (1937).

[7] J. Wheeler, *Wave Functions for Large Arguments by the Amplitude-Phase Method*, Phys. Rev. **52**, 1123 (1937).

[8] W. Oehm, *Das atomare und das nukleare Dreiteilchenproblem: Eine vergleichende Darstellung verschiedener Lösungsmethoden*, Master's thesis, Universität Bonn, 1985.

[9] E. Alt, W. Sandhas, and H. Ziegelmann, *Calculation of proton-deuteron phase parameters including the Coulomb force*, Nucl. Phys. **A445**, 429 (1985).

[10] R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles* (McGraw-Hill, Inc., New York, 1966).

[11] S. Weinberg, *Quasiparticles and the Born Series*, Phys. Rev. **131**, 440 (1963).

[12] C. de Boor, *On Calculating with B-Splines*, Journ. of Approximation Theory **6**, 50 (1972).

[13] J. Friar *et al.*, *Benchmark solutions for a model three-nucleon scattering problem*, Phys. Rev. **C42**, 1838 (1990).

[14] Y. Wu, S. Ishikawa, and T. Sasakawa, *Three-Nucleon Bound States: Detailed Calculations of ^3H and ^3He*, Few-Body Systems **15**, 145 (1993).

[15] W. Dilg, L. Koester, and W. Nistler, *The neutron-deuteron scattering length*, Physics Letters **36B**, 208 (1971).

[16] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, Inc., New York, 1970).

[17] A. Lindner, *Drehimpulse in der Quantenmechanik* (B.G. Teubner, Stuttgart, 1984).

[18] E. Alt, P. Grassberger, and W. Sandhas, *Reduction of the Three-Particle Collision Problem to Multi-Channel Two-Particle Lippmann-Schwinger Equations*, Nucl. Phys. **B2**, 167 (1967).

[19] T. Januschke, T. Frank, W. Sandhas, and H. Haberzettl, *Neutron-deuteron scattering calculations with the Paris potential using the W-Matrix representation of the two-body input*, Phys. Rev. **C47**, 1401 (1993).

[20] C. Chen, G. Payne, J. Friar, and B. Gibson, *Low-Energy nucleon-deuteron scattering*, Physical Review **C39**, 1261 (1988).

[21] S. Yakovlev and I. Filikhin, *The method of strong channel coupling for the Faddeev equations. Low-energy nucleon-deuteron scattering*, Phys. A. Nucl. **56**, 1676 (1993).

[22] W. Sandhas, *Acta Physica Austriaca, Suppl. IX* (Springer Verlag, Berlin, Wien, 1972), pp. 57–138.

[23] J. R. Taylor, *Scattering Theory* (Robert E. Krieger Publishing Company, Malabar, Florida, 1987).

[24] E. Alt and W. Sandhas, *Coulomb Interaction in Nuclear and Atomic Few-Body Collision* (Plenum Publishing Corporation, New York, 1996).

[25] A. Reiner, *On the anomalous effective range expansion for nucleon-deuteron scattering in the $S = \frac{1}{2}$ state*, Physics Letters **28B**, 387 (1969).

[26] J. Whiting and M. G. Fulda, *Pole in $k \cot \delta$ for doublet, s-wave, n-d scattering*, Phys. Rev. **C14**, 18 (1976).

[27] C. J. Joachain, *Quantum Collision Theory* (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1975).

[28] A. Sitenko, *Lectures in Scattering Theory* (Pergamon Press, Oxford, 1971).

[29] B. Bakker, *Exploration of Phillips plot using separable Potentials*, Ph.D. thesis, Vrije Universiteit de Amsterdam, 1973.

[30] B. Bakker and W. Sandhas, *Comments on the Validity of the Unitary Pole Approximation*, Czech. Journ. of Physics **B25**, 259 (1975).

[31] G. Payne, J. Friar, B. Gibson, and I. Afnan, *Configuration Space Faddeev Calculations. I. Triton Ground State Properties*, Physical Review **C22**, 823 (1980).

[32] G. Ellerkmann, *Untersuchung des anomalen Schwellenverhaltens der elastischen Neutron-Deuteron-Streuung mit Hilfe der W-Matrix-Methode*, Master's thesis, Universität Bonn, 1990.

[33] E. Whittaker and G. Watson, *A Course of Modern Analysis* (Cambridge University Press, New York, 1965).

[34] I. Gradshteyn and I. Ryzhik, *Table of Inegrals, Series and Produkts* (Academic Press, Inc., San Diego, 1994).

Danksagung

Zunächst danke ich Herrn Prof. Dr. W. Sandhas für die interessante Themenstellung dieser Diplomarbeit und die gute Betreuung.
Selbstverständlich gilt mein Dank auch meinem betreuenden Assistenten Dr. Ralf E. Kersting, der mir noch über seine Zeit als Angehöriger der Universität Bonn hinaus stets mit Rat und Tat zur Seite stand und mir sein Programmpaket nebst Einweisung zur Weiterentwicklung überließ.

Ebenso stand mir mein Kollege in der Arbeitsgruppe Wolfgang Schadow immer mit wertvollen Ratschlägen und nützlichen Anregungen zur Verfügung, die zum Gelingen dieser Arbeit wesentlich beitrugen.
Weiterhin verdient die stete Hilfsbereitschaft meines Kommilitonen Michael Fuchs bei immer wieder aufgetretenen Rechnerproblemen meinen Dank.
Nicht zuletzt danke ich meiner Familie, die mir das Studium ermöglichte und mich in allen Belangen unterstützte.