Integralgleichungs-Rechnungen zum Neutron-Deuteron-Streuproblem mit energieabhängiger Zweiteilchen-Wechselwirkung

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität
zu Bonn

vorgelegt von
Clemens B. Kuhl
aus
Bad Honnef

Bonn, den 9. August 1996

Angefertigt mit Genehmigung
der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Universität Bonn

Referent: Prof. Dr. W. Sandhas
Korreferent: Prof. Dr. D. Schütte

Diese Arbeit ist meinem Vater gewidmet

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung

Wenig-Teilchen-Physik unternimmt den Versuch, die wohl-etablierte nicht-relativistische Quantenmechanik prinzipiell exakt, also ohne zusätzliche Annahme, auf physikalische Systeme anzuwenden. Die Kompliziertheit der so gegebenen Beschreibung der Realität beschränkt die Anzahl der betrachteten physikalischen Objekte auf einige wenige. Praktisch sind physikalische Fragestellungen, die mehr als vier solcher, als elementar vorausgesetzter, Teilchen beinhalten, nicht mehr lösbar. Da realistische und mikroskopische Beschreibungen aller elementaren Wechselwirkungen auf dem Austausch beliebig vieler Teilchen basieren, ist hier zusätzlich eine Vorgabe der Wechselwirkung in Form eines Potentials notwendig.

In dieser Arbeit wird hauptsächlich das Neutron-Deuteron-Streuproblem behandelt, eine Fragestellung, die sich offenbar mit drei nicht-elementaren Nukleonen und der starken Wechselwirkung befaßt. Allein schon der Sachverhalt, daß ein Nukleon ein Bindungszustand dreier Quarks im Rahmen einer Teilchen-Austausch-Wechselwirkung (Gluonen und Quark-Antiquark-Paare) und demnach ein Problem unendlich vieler Teilchen ist, zeigt, daß dieses Streuproblem nicht auf Quark-Niveau lösbar ist. Also wird die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung in dieser Arbeit durch ein Mesonen-Austausch-Modell parametrisiert [1, 2, 3, 4]. Die drei im Streuprozeß, und selbstverständlich im Bindungszustand des Triton, involvierten Nukleonen werden im folgenden als elementar angesehen, in diesem Rahmen wird das Deuteron als Zweinukleonen-Bindungszustand (Composite Particle) exakt beschrieben.

Zur Lösung des sich so ergebenden potentialtheoretisch formulierten quantenmechanischen Dreiteilchen-Problems hat die Wenig-Teilchen-Physik im Verlauf der vergangenen Jahrzehnte die verschiedenartigsten Ansätze [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11] entwickelt. Letztlich ergeben sich immer höchst komplizierte Bewegungsgleichungen, deren Lösung analytisch unmöglich und numerisch äußerst aufwendig ist. Je nach Darstellung des Problems im Orts- oder Impulsraum erhält man schließlich entweder hochgekoppelte zweidimensionale Integro-Differentialgleichungen [11] oder ebenso komplizierte zweidimensionale Integralgleichungssysteme [7, 8, 9, 10].

Nun hat Wenig-Teilchen-Physik immer mehrere Intentionen:

1. Die Theorie muß Rand- bzw. Anfangswertprobleme liefern. Eine Integralgleichungens-Formulierung ist eine spezielle Darstellung eines Randwertproblems, da die Randbedingungen stets enthalten sind.
2. Diese Gleichungen müssen (zumindest numerisch) lösbar sein.
3. Hat sich die Richtigkeit des Zugangs, d.h. der Theorie und der numerischen Approximation, erwiesen, so sind damit Aussagen über wesentliche physikalische Parameter möglich, die in die Theorie eingehen.

Im vorliegenden Fall des quantenmechanischen Dreiteilchen-Problems sind dies die vorgegebenen Nukleon-Nukleon-Potentiale.

Im Laufe der letzten Jahrzehnte hat sich die Beschreibung dieser Wechselwirkung weiterentwickelt von reiner, an experimentelle Daten angefitteter Phänomenologie zu einer Theorie, die meistens mittels feldtheoretischer Methoden versucht, mesonische Austauschprozesse zwischen Nukleonen zu beschreiben. Hier muß auch noch zwischen Potentialen, die in nicht-relativistische bzw. zumindest kinematisch relativistische Bewegungsgleichungen eingehen, unterschieden werden[1]. Alle diese sogenannten realistischen Potentiale reproduzieren die experimentellen Zweiteilchen-Daten mehr oder minder hervorragend, jedoch unterscheiden sich Dreiteilchen-Vorhersagen bemerkenswert. So liefert etwa das Paris-Potential [12], eine energieunabhängige Parametriesierung der energieabhängigen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung, eine Triton-Bindungsenergie, die etwa um 1 MeV unter dem experimentellen Wert [13] liegt, Bonn-A [14], eine energieunabhängige Version des Bonn-Potentials, reproduziert bis auf 2% [16] das Experiment, Bonn-B [14], ebenfalls energieunabhängig, differiert um etwa 5% [16] vom Experiment. Beim energieabhängigen Bonn-Potential [17], das eine zumindest kinematisch relativistische Zweinukleonen-Dynamik liefert, und außerdem in Energiebereiche jenseits der Pionen-Produktions-Schwelle fortgesetzt worden ist [18], ergibt sich zur experimentellen Triton-Bindungsenergie eine Diskrepanz von mehr als 2 MeV [19].

An solchen Unterschieden allein im Bindungsproblem, die offensichtlich auf der Konstruktion der Potentiale und also auf dem physikalischen Ansatz und Formalismus basieren, zeigt sich nur, welche Bedeutung Dreiteilchen-Rechnungen auch heute haben. Dasselbe gilt für ähnliche Differenzen bei theoretischen Vorhersagen im Streuproblem und dort auftretende Diskrepanzen im Vergleich zum Experiment, wo Dreiteilchen-Kräfte eine Rolle spielen können.

Das energieabhängige Bonn-Potential scheint nun aus mehrfachen Gründen die vielleicht interessanteste Parametrisierung der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung zu sein. Es liefert eine zumindest kinematisch relativistische Beschreibung der Nukleon-Nukleon-Dynamik im Rahmen von Integralgleichungsformulierungen, was durch die konstruktionsbedingte Darstellung im Impulsraum nahegelegt wird. Das energieabhängige Bonn-Potential basiert auf, wenn auch umstrittenen, feldtheoretischen Überlegungen im Rahmen einer „Old-Fashioned Perturbation Theory", die mesonische Austauschprozesse beschreiben [17]. Es ist energieabhängig infolge der korrekten Berücksichtigung der Energieabhängigkeit der Mesonen-Propagatoren. Die energieunabhängigen Versionen vernachlässigen dagegen diese Abhängigkeit, sind demzufolge nur Näherungen. Ursprüngliches Ziel dieser Arbeit war es, die Qualität der energieabhängigen Version des Bonn-Potentials zu überprüfen.

Die oben genannten Intentionen der Few-Body-Theory bilden sich auch in dieser

[1] Die Bonn-Potentiale werden von deren Konstrukteuren stets als relativistisch bezeichnet.

Arbeit ab:

Zur Formulierung des Stoßproblems werden die etablierten AGS-Integralgleichungen [6, 7] verwendet, eine direkte Verallgemeinerung der wohlbekannten T-Operator-Lippmann-Schwinger-Gleichung des Zweinukleonen-Problems auf drei solcher Teilchen. Sie lassen sich in Matrix-Schreibweise in der Form

$$\mathcal{T} = \mathcal{V} + \mathcal{V}\mathcal{G}_0\mathcal{T}, \tag{1.1}$$

also als inhomogene Integralgleichung schreiben; allerdings sind jetzt $\mathcal{V}$ ein Potential-Matrix und $\mathcal{G}_0$ eine Dreiteilchen-Matrix-Green-Funktion.

In der naheliegenden Impulsraum-Darstellung und nach Drehimpuls-Zerlegung (d.h. im wesentlichen nach Abspaltung der Winkelabhängigkeit der Impulse) schreiben sie sich als hochgradig gekoppeltes zweidimensionales Integralgleichungssystem [9, 10]. Die Zweidimensionalität dieses Systems hat eine tiefere physikalische Ursache: sie ist direkte Folge des Aufbruchs des Subsystems in den Zwischenzuständen des Streuprozesses.

Ein solches Gleichungssystem ist nur auf Vektor- oder Parallelrechnern numerisch vernünftig lösbar. Demnach ist eine intelligente Approximation, die zu einer numerischen Vereinfachung eines solchen Systems führt, äußerst wünschenswert. Zudem dienen Dreiteilchen-T-Matrizen als Input für Vierteilchen-AGS-Gleichungen, die qua constructione ebenfalls wieder, sofern exakt geschrieben, mehrdimensionale Gleichungssysteme liefern[2]. Solche Rechnungen sind, zumindest für das Streuproblem, gegenwärtig und in nächster Zukunft numerisch nicht exakt realisierbar.

Nun geht in den Kern $\mathcal{V}\mathcal{G}_0$ der Dreiteilchen-Gleichungen im Impulsraum der Zweiteilchen-T-Operator off-Shell ein, in jeder Darstellung eine Funktion zweier Variabler, im vorliegenden Fall also $\mathrm{T}(\mathrm{E}+\mathrm{i}0;\vec{p}\,',\vec{p})$. Gelingt es, diese Funktion als Produkt zweier Funktionen einer Variablen $T_1(\vec{p}\,')T_2(\vec{p})$ zu schreiben (separable Darstellung der T-Matrix) oder durch solche Produkte mit möglichst wenigen Termen zu approximieren [7, 9, 10], so wird das Integralgleichungssystem eindimensional und ist auf jedem Großrechner lösbar.

Eine separable Approximation des Zweiteilchen-T-Operators wird durch deren W-Matrix-Darstellung [21] geliefert. Dies ist eine exakte Darstellung des Off-Shell-T-Operators durch maximal vier, letztlich sogar nur zwei separable Terme und einen nichtseparablen Restterm R

$$T = T_{sep} + R \tag{1.2}$$

für alle Energien. Als Lösung einer inhomogenen Integralgleichung im Impulsraum,

[2]Es sei darauf hingewiesen, daß dieser Sachverhalt typisch für Impulsraumdarstellungen von Bewegungsgleichungen von Mehrteilchen-Systemen ist und nicht etwa Spezifikum der AGS-Gleichungen.

in deren Inhomogenität und Kern die Zweiteilchen-Potentiale eingehen, liefert die W-Matrix somit für jede, auch energieabhängige Wechselwirkung sofort eine separable Approximation der T-Matrix. Andere Verfahren zur Konstruktion eines separablen T-Operators, wie etwa die EST-Methode [22], die auf einer separablen Entwicklung des Zweiteilchen-Potentials beruht, stoßen im energieabhängigen Fall sofort auf große Schwierigkeiten.

Hier ist äußerst wichtig, daß die separablen Terme alle wesentlichen, die Struktur des Off-Shell-T-Operators bestimmenden Singularitäten, wie etwa den Pol an der Bindungsenergie und die Schnitte in den Streuenergien enthalten. Zusätzlich wird half-on- und on-Shell (d.h. mit k=$\sqrt{E}$)

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} \,|\, T(E+i0) \,|\, \vec{k} \,\rangle &= T(E+i0;\vec{p},\vec{k}) = T_{sep}(E+i0;\vec{p},\vec{k}) \\ \langle \vec{k} \,|\, T(E+i0) \,|\, \vec{p} \,\rangle &= T(E+i0;\vec{k},\vec{p}) = T_{sep}(E+i0;\vec{k},\vec{p}) \\ \langle \vec{k} \,|\, T(E+i0) \,|\, \vec{k} \,\rangle &= T(E+i0;\vec{k},\vec{k}) = T_{sep}(E+i0;\vec{k},\vec{k}) \end{aligned} \tag{1.3}$$

der T-Operator exakt dargestellt.

Off-Shell allerdings verschwindet der Restterm nicht; die separable Approximation der T-Matrix, d.h. die W-Matrix-Methode, besteht darin, ihn zu vernachlässigen. Prinzipiell kann die Qualität dieser Approxiation für Dreiteilchen-Rechnungen durch verfeinerte, allerdings auch numerisch äußerst aufwendige Methoden abgeschätzt werden (Quasi-Particle Method).

In Kapitel 2 dieser Arbeit wird ein kurzer Überblick über das nukleare, also kurzreichweitige quantenmechanische Dreiteilchen-Problem gegeben, allerdings wird der Aufbruch [28], d.h. die Reaktion n+d $\rightarrow$ n+n+p nicht betrachtet. Dabei wird etwas detaillierter auf die AGS-Formulierung dieser erstmals von Faddeev [8] mathematisch untersuchten Fragestellung eingegangen und zwar hauptsächlich in der lästigen, aber unumgänglichen Drehimpulszerlegung. Insbesondere wird auf die Zweidimensionalität der sich dort ergebenden Bewegungsgleichungen hingewiesen.

In Kapitel drei folgen einige Anmerkungen zu den verschiedenen Versionen des Bonn-Potentials.

In vierten Kapitel wird die W-Matrix-Darstellung des quantenmechanischen Dreiteilchen-Problems formuliert. Zuerst wird die W-Matrix als vollständige Lösung des quantenmechanischen Zweiteilchen-Problems im Impulsraum im Rahmen einer Integralgleichungs-Formulierung vorgestellt. Es wird sich zeigen, daß hier zwischen Potentialen unterschieden werden muß, die eine nicht-relativistische bzw. relativistische Zweinukleonen-Dynamik liefern. Danach werden die AGS-Gleichungen mit der separablen W-Matrix-Approximation der dort eingehenden Off-Shell-T-Matrix angegeben. Schließlich wird auf das effektive Potential $\mathcal{V}$ in den AGS-Gleichungen eingegangen und erläutert, warum das Potential im Falle des energieabhängigen Bonn-Potentials modifiziert werden muß.

In Kapitel fünf wird der Versuch unternommen, einen Überblick zu geben, welches die wichtigen und bedeutenden Observablen des Neutron-Deuteron-Streuprozesses sind. Im sechstem Kapitel findet sich ein sehr kurzer Hinweis auf die numerische Problematik. Im siebten Kapitel werden die Ergebnisse präsentiert.

2 Das Dreiteilchen-Problem in der Quantenmechanik

2.1 Kinematik und Notationen

Im folgenden werden drei, nicht identische elementare Teilchen betrachtet, die ausschließlich durch reine Zweiteilchen-Kräfte wechselwirken. Diese Kräfte werden durch translations- und rotationsinvariante Zweiteilchen-Potentiale $V_{i,j}$ beschrieben. In Analogie zum Zweiteilchen-Problem, bei dem die Einführung von Schwerpunkts- und Relativkoordinaten zur Separation des Schwerpunktimpulses in der Hamiltonfunktion führt und somit im CM-System die Anzahl der Freiheitsgrade von sechs auf drei reduziert, werden im Dreiteilchen-Problem Jacobi-Koordinaten [7] eingeführt. Das sind die Schwerpunktskoordinate $\vec{X}$ aller drei Teilchen, der Relativvektor irgendzweier Teilchen (in dieser Arbeit natürlich der des gebundenen Zweiteilchen-Clusters), die im folgenden qua definitione als Subsystem bezeichnet werden, und der Relativvektor des dritten Teilchen, bezogen auf den Schwerpunkt des Subsystems.

$$\vec{X} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{3} m_i \, \vec{x}_i}{\sum\limits_{i=1}^{3} m_i}, \qquad \vec{r}_3 = \vec{x}_1 - \vec{x}_2, \qquad \vec{R}_3 = \vec{x}_3 - \left(\frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2}{m_1 + m_2} \right), \tag{2.4}$$

(diese Beziehungen gelten analog für jede zyklische Vertauschung der Zahlen (123)). In diesem Koordinaten-System separiert der Schwerpunktimpuls in der Hamiltonfunktion erneut, im CM-System reduziert sich die Anzahl der Freiheitsgrade von neun auf sechs.

Folgende Notation hat sich durchgesetzt: der generalisierte Relativimpuls des Subsystems wird mit $\vec{p}$, der des dritten Teilchens mit $\vec{q}$ bezeichnet. Bilden Teilchen eins und zwei das Subsystem, so werden $\vec{p}$ und $\vec{q}$ mit 3 indiziert. In diesem Spezialfall sind die Impulse explizit gegeben durch:

$$\vec{p}_3 = \frac{m_2 \vec{k}_1 - m_1 \vec{k}_2}{m_1 + m_2} \tag{2.5}$$

$$\vec{q}_3 = \frac{(m_1 + m_2)\vec{k}_3 - m_3(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)}{m_1 + m_2 + m_3} \tag{2.6}$$

Das gilt wiederum für jede zyklische Vertauschung der Zahlen (1,2,3), etwa (α, β, γ), weswegen die Impulse generell mit $\vec{p}_\alpha$ und $\vec{q}_\alpha$ bezeichnet werden.

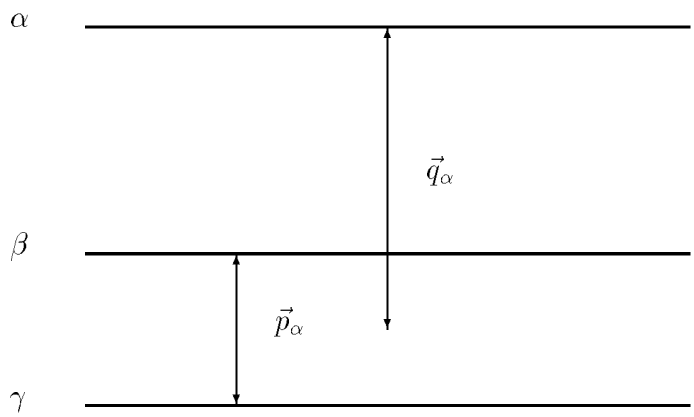

Abbildung 1: Die Relativimpulse.

Der Gesamtimpuls des Dreiteilchensystems ist gegeben durch

$$\vec{P} = \sum_{\alpha=1}^{3} \vec{k}_\alpha; \tag{2.7}$$

beim Übergang von der ursprünglichen Impulsbasis $\left| \vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3 \right\rangle$ zur Basis aus Gesamtimpuls und den beiden Relativimpulsen $\left| \vec{P}, \vec{p}_\alpha, \vec{q}_\alpha \right\rangle$ kann in allen Summanden des Hamiltonoperators eine, die Gesamtimpulserhaltung dokumentierende, δ-Distribution abgespalten werden, so daß es völlig ausreicht, im CM-System die Basis $\left| \vec{p}_\alpha, \vec{q}_\alpha \right\rangle$ zu betrachten. In dieser Basis hat der Dreiteilchen-Hamiltonoperator die Form

$$H = \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2\mu_\alpha} + \frac{\vec{q}_\alpha^{\,2}}{2M_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^{3} V_\alpha, \tag{2.8}$$

die beiden reduzierten Massen μ_α und M_α sind gegeben durch

$$\mu_\alpha = \frac{m_\beta m_\gamma}{m_\beta + m_\gamma} \qquad M_\alpha = \frac{m_\alpha(m_\beta + m_\gamma)}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma}. \tag{2.9}$$

Hier wird schon darauf verwiesen, daß im Falle der Neutron-Deuteron-Streuung selbstverständlich alle m_α gleich sind, so daß , falls in „natürlichen“ Einheiten (siehe Anhang A.7) gerechnet wird, die reduzierten Massen durch $\mu_\alpha = \frac{1}{2}$ und $M_\alpha = \frac{2}{3}$ gegeben sind.

In der gesamten Arbeit werden alle Zweiteilchen-Operatoren mit einem Dach gekennzeichnet, so ist etwa der Hamiltonoperator des Deuteron-Subsystems gegeben durch

$$\hat{H}_\alpha = \frac{\hat{\vec{p}}_\alpha^{\,2}}{2\mu_\alpha} + \hat{V}_\alpha. \tag{2.10}$$

Zum Abschluß dieses Abschnitts sei noch darauf hingewiesen, daß sich jeder Impulssatz ($\vec{p}_\alpha$, $\vec{q}_\alpha$) für festes $\vec{P}$ umrechnen läßt in jeden anderen Impulssatz ($\vec{p}_\gamma$, $\vec{q}_\gamma$). Diese Transformationen sind in Anhang A.1 explizit angegeben und werden mit

$$\vec{p}_\gamma = \vec{p}(\vec{p}_\alpha, \vec{q}_\alpha) \qquad \vec{q}_\gamma = \vec{q}(\vec{p}_\alpha, \vec{q}_\alpha) \tag{2.11}$$

bezeichnet.

2.2 Integralgleichungsformulierung des Dreiteilchen-Problems

Das Streuproblem zweier Teilchen kann direkt und ohne große Schwierigkeiten mittels der Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{T} \tag{2.12}$$

gelöst werden. Diese Integralgleichung ergibt sich sofort aus den Mølleroperatoren, die freie Impulszustände auf Streuzustände abbilden. Das Bindungsproblem kann ebenfalls direkt über eine Integralgleichung für die Formfaktoren der Bindungswellenfunktion, aus denen sich Bindungszustände sofort bestimmen lassen, gelöst werden. Beide Verfahren lassen sich auf das Dreiteilchen-Problem verallgemeinern.

2.2.1 Die Kanalzustandsräume $\mathcal{H}_\alpha$

Zuerst werden Kanalzustände als Verallgemeinerung der freien Zustände beim Zweiteilchen-Problem eingeführt [7]. Kanalzustände im Falle dreier Teilchen beschreiben anschaulich die freie Relativbewegung eines gebundenen Zweiteilchen-Subsystems und eines dritten freien Teilchens. Sie sind gegeben durch

$$|\, n, \vec{q}\ \rangle_\alpha = |\ n\ \rangle_\alpha \ \otimes \ \ |\ \vec{q}\ \rangle_\alpha, \tag{2.13}$$

wobei $|n\rangle_\alpha$ den n-ten Bindungszustand im Kanal α bezeichnet. Offenbar sind Kanalzustände Eigenzustände folgenden Kanal-Hamiltonoperators

$$H_\alpha = \frac{\vec{q}_\alpha^{\,2}}{2M_\alpha} + \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2\mu_\alpha} + V_\alpha = \frac{\vec{q}_\alpha^{\,2}}{2M_\alpha} + \hat{H}_\alpha \tag{2.14}$$

mit den Eigenwerten $E_{\alpha,n} = \hat{E}_{\alpha,n} + \frac{\vec{q}_\alpha^{\,2}}{2M_\alpha}$, wobei $\hat{H}_\alpha$ durch (2.10) gegeben ist. Die so definierten Zustände $|\ n, \vec{q}\ \rangle_\alpha$ bilden eine Basis in $\mathcal{H}_\alpha$, d.h.

$$_\alpha\langle\ \vec{q}\,', m\,|\, n, \vec{q}\ \rangle_\alpha \ \ = \ \ \delta_{mn}\ \delta(\vec{q}_\alpha\,' - \vec{q}_\alpha) \tag{2.15}$$

$$\mathbf{1}_\alpha = \sum_{n=1}^{\infty} \int d^3q \;\; | \; n, \vec{q} \; \rangle_\alpha \;\; {}_\alpha\langle \; \vec{q}, n \; | \, , \tag{2.16}$$

jedoch sind zwei verschiedene Kanalzustandsräume $\mathcal{H}_\alpha$ und $\mathcal{H}_\beta$ im allgemeinen nicht orthogonal, sondern „liegen schief zueinander". Es bleibt noch anzumerken, daß sich der Dreiteilchen-Hamiltonoperator dann auch in der Form

$$H = H_\alpha + \bar{V}_\alpha \qquad \bar{V}_\alpha = V - V_\alpha \qquad V = \sum_{\alpha=1}^{3} V_\alpha \tag{2.17}$$

schreiben läßt.

2.2.2 Die Kanal-Mølleroperatoren

Ganz analog zum Zweiteilchen-Problem lassen sich auf jedem Kanalzustandsraum Kanal-Mølleroperatoren $\Omega_\alpha^{(\pm)}$ als Abbildungen

$$\Omega_\alpha^{(\pm)} : \mathcal{H}_\alpha \longrightarrow \mathcal{H}$$

$$\Omega_\alpha^{(\pm)} = s - \lim_{t \to \mp\infty} \; \exp(iHt) \; \exp(-iH_\alpha t) \; P_\alpha \tag{2.18}$$

von $\mathcal{H}_\alpha$ nach $\mathcal{H}$ definieren. Dabei ist $\mathcal{H}$ der vollständige Dreiteilchen-Hilbertraum und $s - \lim$ die starke Konvergenz. Die Mølleroperatoren bilden Kanalzustände aus $\mathcal{H}_\alpha$ auf Streuzustände $| \; n, \vec{q} \; \rangle_\alpha^{(\pm)}$ aus $\mathcal{H}$ ab:

$$| \; n, \vec{q} \; \rangle_\alpha^{(\pm)} \;\; = \;\; \Omega_\alpha^{(\pm)} \;\; | \; n, \vec{q} \; \rangle_\alpha \tag{2.19}$$

(siehe Anhang A.2.2). Hier ist P_α der Projektionsoperator auf $\mathcal{H}_\alpha$. Die Streuzustände erfüllen folgende Beziehungen:

$$H \;\; | \; n, \vec{q} \; \rangle_\alpha^{(\pm)} \;\; = \;\; E_{\alpha,n} \;\; | \; n, \vec{q} \; \rangle_\alpha^{(\pm)} \qquad E_{\alpha,n} = \hat{E}_{\alpha,n} + \frac{q_\alpha^2}{2M_\alpha} \tag{2.20}$$

$$H \; \Omega_\alpha^{(\pm)} = \Omega_\alpha^{(\pm)} \; H_\alpha \qquad \text{(Intertwining Relation)} \tag{2.21}$$

Demzufolge sind Streuzustände Eigenzustände des vollen Hamiltonoperators H, sie erfüllen folgende Orthonormalitäts-Beziehung

$${}_\beta^{(\pm)}\langle \; \vec{q}\,', m \,|\, n, \vec{q} \; \rangle_\alpha^{(\pm)} \;\; = \;\; \delta_{\beta\alpha} \; \delta_{mn} \; \delta(\vec{q}_\beta\,' - \vec{q}_\beta) \tag{2.22}$$

Ein Beweis dazu findet sich in Anhang A.2.2. Die Mølleroperatoren bilden somit die Kanalzustandsräume, die i.a. nicht orthogonal sind, auf paarweise orthogonale Teilräume von $\mathcal{H}$ ab.

Andererseits gilt offenbar für den adjungierten Operator (Anhang A.2.2)

$$\Omega_\alpha^{(\pm)\,\dagger} \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha^{(\pm)} \;=\; \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha \tag{2.23}$$

auf dem Abschluß von $\Omega_\alpha^{(\pm)}(\mathcal{H}_\alpha)$, der mit $\mathcal{H}_\alpha^{(\pm)}$ bezeichnet werden soll. Der so gesicherte Definitionsbereich von $\Omega_\alpha^{(\pm)\,\dagger}$ kann auf den ganzen Hilbertraum $\mathcal{H}$ fortgesetzt werden durch

$$\Omega_\alpha^{(\pm)\,\dagger} \mid \Psi\ \rangle^{(\pm)} \;=\; 0 \quad \textit{für alle} \quad \mid \Psi\ \rangle^{\pm} \;\in\; \mathcal{H} \;\setminus\; \mathcal{H}_\alpha^{(\pm)} \tag{2.24}$$

Dieser Sachverhalt bedeutet insbesondere, daß für die Dreiteilchen-Bindungswellenfunktion $\mid \Psi_m \rangle$ und einen Streuzustand $\mid m, \vec{q}\ \rangle_\beta^{(\pm)}$ folgende Beziehungen gelten:

$$\Omega_\alpha^{(\pm)\,\dagger} \mid \Psi_m\ \rangle \;=\; 0 \qquad \Omega_\alpha^{(\pm)\,\dagger} \mid m, \vec{q}\ \rangle_\beta^{(\pm)} \;=\; 0 \tag{2.25}$$

Die Mølleroperatoren sind offenbar isometrisch:

$$\Omega_\alpha^{(\pm)\,\dagger}\, \Omega_\alpha^{(\pm)} \;=\; 1 \qquad \Omega_\alpha^{(\pm)}\, \Omega_\alpha^{(\pm)\,\dagger} \;=\; P_\alpha \tag{2.26}$$

2.2.3 Die AGS-Gleichungen

Die grundlegende Größe der Streutheorie ist der S-Operator; er liefert die Übergangsamplituden dafür, daß ein Streuzustand in ferner Zukunft in einen wohldefinierten freien Zustand übergeht, kurz

$$\begin{aligned}
& S_{\beta,m;\alpha,n}\,(\vec{q}\,'_\beta, \vec{q}_\alpha) \\
&= \lim_{t\to\infty}\ {}_{t,\beta}\langle\ \vec{q}\,', m \,|\, n, \vec{q},\ \rangle_{\alpha,t}^{(+)} \\
&= \lim_{t\to\infty} {}_\beta\langle\ \vec{q}\,', m\ |\exp(iH_\beta t)\ \exp(-iHt)\ \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha^{(+)} && (2.27)\\
&= {}^{(-)}_{\ \beta}\langle\, \vec{q}\,', m \,|\, n, \vec{q}\ \rangle_\alpha^{(+)} \\
&= {}_\beta\langle\ \vec{q}\,', m\ \mid\ \Omega_\beta^{(-)\dagger}\, \Omega_\alpha^{(+)}\ \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha && (2.28)
\end{aligned}$$

In dieser Form, als Operatoren $S_{\beta\alpha} = \Omega_\beta^{(-)\,\dagger}\Omega_\alpha^{(+)}$ zwischen den Kanalzustandsräumen, ist $S_{\beta\alpha}$ genau die S-Matrix im Wechselwirkungsbild, denn Einsetzen der Definitionsgleichungen der Mølleroperatoren und ihrer adjungierten liefert sofort

$$S_{\beta\alpha} = \lim_{t\to\infty}\ \lim_{t'\to-\infty} \exp(iH_\beta t)\, \exp(-iH(t-t\,')\, \exp(-iH_\alpha t\,'), \tag{2.29}$$

offenbar eine Darstellung der S-Matrix durch den Zeitentwicklungs-Operator im Wechselwirkungs-Bild.

Gleichung (2.27) bietet die Möglichkeit, die für die Übergänge eigentlich verantwortlichen Größen, die also die gesamte Dynamik enthalten, genauer zu bestimmen:

$$
\begin{aligned}
&S_{\beta,m;\alpha,n}\,(\vec{q}_\beta{}', \vec{q}_\alpha) \\
&\quad = \lim_{t\to\infty}\ {}_\beta\langle\ \vec{q}\,', m \mid \exp(iH_\beta t)\ \exp(-iHt)\ \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha^{(+)} \\
&\quad = \lim_{t\to\infty} \exp(i\ (E_{\beta,m} - E_{\alpha,n})\ t)\ \ {}_\beta\langle \vec{q}\,', m \mid\ \ \Omega_\alpha^{(+)}\ \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha \\
&\quad = \lim_{t\to\infty} \exp(i\ (E_{\beta,m} - E_{\alpha,n})\ t) \\
&\qquad\qquad\qquad \lim_{\epsilon\to 0+}\ i\epsilon\ \ {}_\beta\langle \vec{q}\,', m \mid G\ (E_{\alpha,n} + i\epsilon)\ \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha
\end{aligned}
\tag{2.30}
$$

Wie nicht anders zu erwarten, wird der S-Operator durch die vollständige Dreiteilchen-Resolvente bestimmt.

Im Zweiteilchen-Problem gelingt es, mit der Resolventenbeziehung $\hat{G}(\hat{z}) = \hat{G}_0(\hat{z}) + \hat{G}_0(\hat{z})\,\hat{V}(\hat{z})\,\hat{G}(\hat{z}) = \hat{G}_0(\hat{z}) + \hat{G}(\hat{z})\,\hat{V}(\hat{z})\,\hat{G}_0(\hat{z})$ die Resolvente $\hat{G}(\hat{z})$ weiter zu zerlegen und den genauen dynamischen Verlauf des Prozesses zu bestimmen. Beide Gleichungen liefern sofort $\hat{G}(\hat{z}) = \hat{G}_0(\hat{z}) + \hat{G}_0(\hat{z})\left(\ \hat{V}(\hat{z}) + \hat{V}(\hat{z})\,\hat{G}(\hat{z})\,\hat{V}(\hat{z})\ \right)\hat{G}_0(\hat{z})$. Werden Zweiteilchen-Übergangsoperatoren $\hat{T}(\hat{z})$ durch $\hat{T}(\hat{z}) = \hat{V}(\hat{z}) + \hat{V}(\hat{z})\hat{G}(\hat{z})\hat{V}(\hat{z})$ definiert, so ist offenbar $\hat{G}(\hat{z}) = \hat{G}_0(\hat{z}) + \hat{G}_0(\hat{z})\,\hat{T}(\hat{z})\,\hat{G}_0(\hat{z})$. Aus dieser Beziehung und aus der Resolventengleichung erhält man sofort die wohlbekannten Integralgleichungen $\hat{T}(\hat{z}) = \hat{V}(\hat{z}) + \hat{V}(\hat{z})\,\hat{G}_0(\hat{z})\,\hat{T}(\hat{z})$ bzw. $\hat{T}(\hat{z}) = \hat{V}(\hat{z}) + \hat{T}(\hat{z})\ \hat{G}_0(\hat{z})\,\hat{V}(\hat{z})$. Der gleiche Weg kann in Dreiteilchen-Fall beschritten werden, wenn man zusätzlich berücksichtigt, daß Übergänge zwischen verschiedenen Kanälen möglich sein müssen. Aus den Beziehungen zwischen den vollständigen und den Kanalresolventen (A.2.3)

$$
G(z) = G_\alpha(z) + G_\alpha(z)\,\bar{V}_\alpha(z)\,G(z) = G_\beta(z) + G(z)\,\bar{V}_\beta(z)\,G_\beta(z) \tag{2.31}
$$

erhält man sofort

$$
\begin{aligned}
&G(z) = G_\beta(z)\ \delta_{\beta\alpha} \\
&\quad +\ \ G_\beta(z)\,(1 - \delta_{\beta\alpha}) + G_\beta(z)\ \left(\bar{V}_\beta(z) + \bar{V}_\beta(z)\,G(z)\,\bar{V}_\alpha(z)\right)\ G_\alpha(z)
\end{aligned}
\tag{2.32}
$$

Zieht man das $G_\beta(z)(1-\delta_{\beta\alpha})$ in die Klammer, so ergibt sich nach kurzer Rechnung:

$$
G(z) = G_\alpha(z)\,\delta_{\beta\alpha} + G_\beta(z)\ U_{\beta\alpha}(z)\ G_\alpha(z), \tag{2.33}
$$

wobei

$$
\begin{aligned}
&U_{\beta\alpha}(z) = \bar{\delta}_{\beta\alpha}\,G_0^{-1}(z) \\
&\quad +\ \ V(z) - V_\beta(z) - V_\alpha(z) + \delta_{\beta\alpha}\,V_\alpha(z) + \bar{V}_\beta(z)\,G(z)\,\bar{V}_\alpha(z)
\end{aligned}
\tag{2.34}
$$

Die $U_{\beta\alpha}$ sind die Dreiteilchen-Übergangsoperatoren im Wechselwirkungsbild, wie eine genauere Untersuchung der S-Matrix sofort zeigt; ganz in Analogie zum Zweiteilchen-Problem läßt sich nämlich auch hier eine verallgemeinerte Reduktionsformel angeben, die einen Zusammenhang zwischen der S-Matrix $S_{\beta,m;\alpha,n}(\vec{q}'_\beta, \vec{q}_\alpha)$ und den $U_{\beta\alpha}$ herstellt:

$$
\begin{aligned}
& S_{\beta,m;\alpha,n}(\vec{q}'_\beta, \vec{q}_\alpha) \\
& \quad = {}^{(-)}_{\beta}\langle\, \vec{q}\,', m \,|\, n,\ \vec{q}\ \rangle^{(+)}_{\alpha} \\
& \quad = \lim_{t\to\infty} \langle\ \vec{q}\,', m \,|\, \exp(iH_\beta\, t)\, \exp(-iHt) \,|\, n, \vec{q}\ \rangle^{(+)}_{\alpha} \\
& \quad = \lim_{t\to\infty} \lim_{\epsilon\to 0+} (\pm i\epsilon) \exp\Big(i\,(\,E'_{\beta,m} - E_{\alpha,n})\,t\Big) \\
& \qquad\qquad\qquad {}_{\beta}\langle\ \vec{q}\,', m \,|\, G(E_{\alpha,n} \pm i\epsilon) \,|\, n, \vec{q}\ \rangle_{\alpha},
\end{aligned}
\tag{2.35}
$$

wobei $E_{\alpha,n} = \frac{q_\alpha^2}{2M_\alpha} + \hat{E}_{\alpha,n}$ und $E'_{\beta,m} = \frac{q'^2_\beta}{2M_\beta} + \hat{E}_{\beta,m}$ ist. Mit Hilfe der Beziehung $G(z) = G_\alpha(z)\,\delta_{\alpha\beta} + G_\alpha(z)U_{\alpha\beta}(z)G_\beta(z)$ ergibt sich sofort für die Darstellung der vollständigen Dreiteilchen-Greenfunktion in der Kanalzustandsbasis:

$$
\begin{aligned}
{}_{\beta}\langle\ \vec{q}\,', m \,|\, G(z) \,|\, n,\ \vec{q}\,\rangle_{\alpha} &= \delta_{\beta\alpha}\, \delta_{mn}\, \delta(\,\vec{q}'_\beta - \vec{q}_\alpha\,) \frac{1}{z - E_{\alpha,n}} \\
&+ \frac{1}{z - E'_{\beta,m}}\ {}_{\beta}\langle\, \vec{q}\,', m \,|\, U_{\beta\alpha}(z) \,|\, n, \vec{q}\,\rangle_{\alpha}\ \frac{1}{z - E_{\alpha,n}}.
\end{aligned}
\tag{2.36}
$$

Während Gleichung (2.34) zeigt, daß $U_{\beta\alpha}$ in der Kanalzustandsbasis im wesentlichen durch die vollständige Dreiteilchen-Greenfunktion mit ihren wohlbekannten Polen und Schnitten festgelegt wird, macht Gleichung (2.36) deutlich, daß G in der Kanalzustandsbasis zwei zusätzliche Pole besitzt. Sie sind letztlich dafür verantwortlich, daß die S-Matrix, gegeben durch Gleichung (2.28), wohldefiniert und endlich ist. Für $z = E_{\alpha,n} \pm i\epsilon$ ergibt sich nämlich

$$
\begin{aligned}
& S_{\beta,m;\alpha,n}(\vec{q}\,', \vec{q}) = \lim_{t\to\infty} \lim_{\epsilon\to 0+} (\pm\, i\epsilon) \\
& \left(\frac{\mp i}{\epsilon}\, \delta_{\beta\alpha}\delta_{mn}\, \delta(\vec{q}'_\alpha - \vec{q}_\alpha) + \frac{\exp\Big(i\,(\,E'_{\beta,m} - E_{\alpha,n})\,t\Big)}{E'_{\beta,m} - E_{\alpha,n} \pm i\epsilon}\, {}_{\beta}\langle\, \vec{q}\,', m \,|\, U_{\beta\alpha} \,|\, n, \vec{q}\,\rangle_{\alpha} \right).
\end{aligned}
\tag{2.37}
$$

Damit und wegen der distributionstheoretischen Beziehung (A.20) erhält man sofort

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{S}_{\beta,m;\alpha,n}(\vec{\boldsymbol{q}}\,', \vec{\boldsymbol{q}}) &= \boldsymbol{\delta}_{\beta\alpha}\ \boldsymbol{\delta}_{mn}\ \boldsymbol{\delta}(\,\vec{\boldsymbol{q}}'_\beta - \vec{\boldsymbol{q}}_\alpha\,) \\
&- \ \ \boldsymbol{2\,\pi\, i\, \delta} \Big(\boldsymbol{E}'_{\beta,m} - \boldsymbol{E}_{\alpha,n}\Big)\ {}_{\beta}\langle\, \vec{\boldsymbol{q}}\,', \boldsymbol{m} \,|\, \boldsymbol{U}_{\beta\alpha} \,|\, \boldsymbol{n}, \vec{\boldsymbol{q}}\,\rangle_{\alpha}.
\end{aligned}
\tag{2.38}
$$

Dieses in direkter Analogie zum Zweiteilchen-Fall gewonnene Ergebnis zeigt, daß die $U_{\beta\alpha}$ die Übergangsoperatoren im Wechselwirkungsbild und damit eine direkte Verallgemeinerung des wohlbekannten Zweiteilchen-$\hat{T}$-Operators sind. Offensichtlich sind die Übergangsamplituden genau die Residuen der vollständigen Greenfunktion. Zudem werden die $U_{\beta\alpha}$ durch eine Integralgleichung bestimmt, deren algebraische Struktur die einer Lippmann-Schwinger Gleichung ist; selbstverständlich erhält man jetzt ein gekoppeltes Gleichungssystem für die verschiedenen kanalabhängigen $U_{\beta\alpha}$. Diese Kopplung wird bedingt durch die verschiedenen nicht-orthogonalen Kanalzustandsräume $\mathcal{H}_\alpha$.

Mit Hilfe von (2.31) und (2.33) läßt sich sehr einfach zeigen (siehe dazu Anhang A.3), daß die Übergangsamplituden die AGS-Operator-Integralgleichungen

$$\boldsymbol{U}_{\beta\alpha}(\boldsymbol{z}) = (\mathbf{1} - \boldsymbol{\delta}_{\beta\alpha})\ \boldsymbol{G}_0^{-1}(\boldsymbol{z}) + \sum_{\gamma=1}^{3} (\mathbf{1} - \boldsymbol{\delta}_{\beta\gamma})\ \boldsymbol{G}_0^{-1}(\boldsymbol{z})\, \boldsymbol{G}_0(\boldsymbol{z})\, \boldsymbol{T}_\gamma(\boldsymbol{z})\, \boldsymbol{G}_0(\boldsymbol{z})\, \boldsymbol{U}_{\gamma\alpha}(\boldsymbol{z}) \tag{2.39}$$

erfüllen. Die hier auftretenden T_γ sind die Fortsetzungen der $\hat{T}_\gamma$ des Subsystems vom Zweiteichen-Raum auf den Dreiteilchen-Hilbertraum; sie erfüllen die Gleichungen

$$T_\gamma = V_\gamma + V_\gamma\, G_0\, T_\gamma \tag{2.40}$$

und stehen zu den $\hat{T}_\gamma$ in folgender Beziehung

$${}_\gamma\langle\ \vec{p}\,', \vec{q}\,' \,|\, T_\gamma(z) \,|\, \vec{q}, \vec{p}\ \rangle_\gamma = \delta(\ \vec{q}_\gamma^{\,\prime} - \vec{q}_\gamma)\,\langle\ \vec{p}\,' \,|\, \hat{T}_\gamma(\,z - \frac{q_\gamma^2}{2M_\gamma})\,|\,\vec{p}\ \rangle. \tag{2.41}$$

Definiert man operatorwertige Matrizen durch

$$\mathcal{T}_{\beta\alpha} = U_{\beta\alpha} \tag{2.42}$$

$$\mathcal{V}_{\beta\alpha} = \bar{\delta}_{\beta\alpha}\, G_0^{-1}(z) \tag{2.43}$$

$$\mathcal{G}_{0;\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} G_0(z)\, T_\alpha(z)\, G_0(z), \tag{2.44}$$

so lassen sich die AGS-Gleichungen in offensichtlicher Lippmann-Schwinger Form angeben

$$\boldsymbol{\mathcal{T}} = \boldsymbol{\mathcal{V}} + \boldsymbol{\mathcal{V}}\boldsymbol{\mathcal{G}}_0\boldsymbol{\mathcal{T}}. \tag{2.45}$$

2.2.4 Das Bindungsproblem

Eine integrale Formulierung des Bindungsproblems läßt sich auf elementare Weise herleiten. Die Gleichung für die bereits korrekt antisymmetrisierten Bindungszustände (der Antisymmetrisierungs-Operator $\mathcal{A}$ kommutiert mit H) lautet hier offensichtlich

$$|\Psi_n\rangle = \lim_{\epsilon\to 0+} \frac{\pm i\epsilon}{z - H}\,|\Psi_n\rangle \tag{2.46}$$

Wegen der Resolventenbeziehung (A.11)

$$G = G_0 + G_0\, V\, G \tag{2.47}$$

ist

$$|\Psi_n\rangle = \lim_{\epsilon\to 0+} (\pm i\epsilon)\,[G_0(E_n+i\epsilon)\,|\Psi_n\rangle + G_0(E_n+i\epsilon)\,V(E_n+i\epsilon)G(E_n+i\epsilon)\,|\Psi_n\rangle]\,. \tag{2.48}$$

Ausführen des Grenzwertes und Umordnen liefert

$$(1 - G_0(E_n)\,V_\gamma(E_n))\,|\Psi_n\rangle = G_0(E_n)\,\bar{V}_\gamma(E_n)\,G(E_n)\,|\Psi_n\rangle. \tag{2.49}$$

Multiplikation mit T_γ von links und Benutzung von

$$T_\gamma(E_n) = V_\gamma(E_n) + T_\gamma(E_n)\,G_0(E_n)\,V_\gamma(E_n) \tag{2.50}$$

ergibt

$$V_\gamma(E_n)\,|\Psi_n\rangle = T_\gamma(E_n)\,G_0(E_n)\,\bar{V}_\gamma(E_n)\,|\Psi_n\rangle, \tag{2.51}$$

was sich auch folgendermaßen

$$\sum_{\gamma=1}^{3} \bar{\delta}_{\beta\gamma}\,V_\gamma(E_n)\,|\Psi_n\rangle = \sum_{\gamma=1}^{3} \bar{\delta}_{\beta\gamma}\,T_\gamma(E_n)\,G_0(E_n)\,\bar{V}_\gamma(E_n)\,|\Psi_n\rangle \tag{2.52}$$

zusammenfassen läßt. Mit der Definition sogenannter Formfaktoren $|F_n\rangle_\alpha$

$$|F_n\rangle_\alpha = \bar{V}_\alpha(E_n)\,|\Psi_n\rangle \tag{2.53}$$

ergibt sich offenbar sofort

$$|\boldsymbol{F}_n\rangle_\beta = \sum_{\gamma=1}^{3} (\mathbf{1} - \boldsymbol{\delta}_{\beta\gamma})\,\boldsymbol{T}_\gamma(\boldsymbol{E}_n)\,\boldsymbol{G}_0(\boldsymbol{E}_n)\,|\boldsymbol{F}_n\rangle_\gamma. \tag{2.54}$$

Dies ist die homogene AGS-Integralgleichung für die Formfaktoren, die wegen der Gleichungen (2.49) und (2.51) mit der Bindungswellenfunktion in folgendem Zusammenhang stehen

$$|\boldsymbol{\Psi}_n\rangle = \sum_{\gamma=1}^{3} \boldsymbol{T}_\gamma(\boldsymbol{E}_n)\,\boldsymbol{G}_0(\boldsymbol{E}_n)\,|\boldsymbol{F}_n\rangle_\gamma. \tag{2.55}$$

Dieses Ergebnis unterstreicht noch einmal, daß der AGS-Formalismus zur Behandlung des Dreikörper-Problems die direkte Verallgemeinerung der wohlbekannten Integralgleichungstheorie zur Lösung des Zweiteilchen-Problems ist.

2.3 Die Antisymmetrisierung

2.3.1 Der antisymmetrisierte Hilbertraum $\mathcal{AH}$.

In der Kernphysik können Neutronen und Protonen als identische Teilchen angesehen werden, falls Isospin-Freiheitsgrade eingeführt werden. Folglich müssen die Hilberträume $\mathcal{H}$ und $\mathcal{H}_\alpha$ antisymmetrisiert werden.

Sei $\mathcal{A}$ der Antisymmetrisierungsoperator für drei identische Teilchen [33]

$$\mathcal{A} = \frac{1}{3!} \sum_{\pi \in \mathcal{I}_3} (sign\, \pi)\, \mathcal{P}_\pi, \tag{2.56}$$

wobei $\mathcal{P}_\pi$ der der Permutation π zugeordnete Vertauschungsoperator, $sign\ \pi$ das Signum der Permutation, also +1, wenn π gerade, oder -1, wenn π ungerade ist, und $\mathcal{I}_3$ die Menge aller Permutationen der Zahlen (1,2,3) sind. Dann besteht eine Basis des korrekt antisymmetrisierten physikalischen Hilbertraums $\mathcal{AH}$ für das Neutron-Deuteron-Streuproblem aus den Zuständen

$$\left\{ N\, \mathcal{A} \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha^{(\pm)},\ \alpha = 1,2,3 \right\}. \tag{2.57}$$

Hierbei ist N ein Normierungsfaktor, der sehr leicht bestimmt werden kann. Wegen

$$\mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha^{(\pm)} = \lim_{\epsilon \to 0+} (\pm i\epsilon)\, G(E_{\alpha,n} \pm i\epsilon) \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha \tag{2.58}$$

ist offenbar

$$\mathcal{A} \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha^{(\pm)} = \lim_{\epsilon \to 0+} (\pm i\epsilon)\, G(E_{\alpha,n} \pm i\epsilon)\, \frac{1}{3!} \sum_{\pi \in \mathcal{I}_3} (sign\, \pi)\, \mathcal{P}_\pi \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha, \tag{2.59}$$

denn der Antisymmetrisations-Operator muß mit dem Dreiteilchen-Hamiltonoperator und deswegen auch mit der vollen Resolvente kommutieren. Nach der üblichen Konvention (Kapitel 2.1) ist in $\mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha$ Teilchen α frei, Teilchen β und γ gebunden und (α, β, γ) eine zyklische Permutation von (1,2,3). Im folgenden sind die sechs Permutationen von α, β und γ) in bestimmter Weise schematisch angeordnet.

$$\begin{tikzcd}
1(2,3) \arrow[d] & 3(1,2) \arrow[r] & 2(3,1) \arrow[d] \\
1(3,2) \arrow[r] & 3(2,1) \arrow[u] & 2(1,3)
\end{tikzcd}$$

Abbildung 2: Die sechs Permutationen der Zahlen 1,2 und 3; dargestellt als Folge von Transpositionen und Zyklen.

$\alpha, (\beta, \gamma)$ bedeutet, Kanal α wird betrachtet, also bilden Teilchen β und γ das gebundene Subsystem. Offenbar bewirkt jede Transposition nur das Vertauschen der Konstituenten des Subsystems, jeder Zyklus dagegen einen Wechsel des Kanals. Ist in jedem Kanal der Subsytemzustand korrekt antisymmetrisiert, so ist offenbar

$$\mathcal{A} \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha^{(\pm)} = \frac{1}{3!}\, 2 \sum_{\gamma=1}^{3} \mid n, \vec{q}\ \rangle_\alpha^{(\pm)}, \tag{2.60}$$

denn das *signum* einer Transposition ist negativ, das eines Zykus jedoch positiv.

Die so konstruierten vollständig antisymmetrischen Streuzustände müssen noch richtig normiert werden. Mit der Bedingung

$$1 = \left\| \mathcal{A} \mid n, \vec{q} \;\rangle_\alpha^{(\pm)} \right\| N^2 \tag{2.61}$$

erhält man wegen der Orthogonalität der Streuzustände sofort

$$N = \sqrt{3} \tag{2.62}$$

Werden die korrekt antisymmetrisierten und normierten Streuzustände, die offenbar nicht mehr kanalabhängig sind, mit $\mid n, \vec{q} \;\rangle_\mathcal{A}^{(\pm)}$ bezeichnet, so ist wegen Gleichung (2.60)

$$\mid n, \vec{q} \;\rangle_\mathcal{A}^{(\pm)} := N \; \mathcal{A} \; \mid n, \vec{q} \;\rangle^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{\gamma=1}^{3} \mid n, \vec{q} \;\rangle_\gamma^{(\pm)}. \tag{2.63}$$

2.3.2 Konsequenzen der Antisymmetrisierung des Hilbertraums

Wird die S-Matrix mit Hilfe der korrekt antisymmetrisierten und normierten Streuzustände $\mid n, \vec{q} \;\rangle_\mathcal{A}^{(\pm)}$ bestimmt -sie wird im weiteren mit $(\mathcal{A}S)$ bezeichnet-, so erhält man daraus sofort Bedingungen, wie die Übergangsamplitude, i.e. das Matrixelement von $U_{\beta\alpha}$ in den Kanalzustandsbasen, zu antisymmetrisieren ist. Einerseits ist

$$\begin{aligned} \mathcal{A}S_{mn}(\vec{q}\,', \vec{q}) &= \;{}_\mathcal{A}^{(-)}\langle \; \vec{q}\,', m \mid n, \vec{q} \;\rangle_\mathcal{A}^{(+)} \\ &= 3 \;\; {}_\beta^{(-)}\langle \; \vec{q}\,', m \mid \mathcal{A}\mathcal{A} \mid n, \; \vec{q} \;\rangle_\alpha^{(+)} \\ &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \;\; {}_\beta^{(-)}\langle \; \vec{q}\,', m \mid n, \vec{q} \;\rangle_\alpha^{(+)} \end{aligned} \tag{2.64}$$

andererseits wegen $\mathcal{A}^2 = \mathcal{A}$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}S_{mn}(\vec{q}\,', \vec{q}) &= \;{}_\beta^{(-)}\langle \; \vec{q}\,', m \mid \mathcal{A} \mid n, \vec{q} \;\rangle_\alpha^{(+)} \\ &= \sum_{\alpha \text{ oder } \beta=1}^{3} \;\; {}_\beta^{(-)}\langle \; \vec{q}\,', m \mid n, \vec{q} \;\rangle_\alpha^{(+)}. \end{aligned} \tag{2.65}$$

Das bedeutet, daß die antisymmetrisierte S-Matrix, wie in der Notation schon vorweggenommen, völlig unabhängig von den Kanalindizes ist.

$$\begin{aligned} \mathcal{A}S_{mn}(\vec{q}\,', \vec{q}) &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \;\; {}_\beta^{(-)}\langle \; \vec{q}\,', m \mid n, \vec{q} \;\rangle_\alpha^{(+)} \\ &= \sum_{\alpha=1}^{3} \;\; {}_\beta^{(-)}\langle \; \vec{q}\,', m \mid n, \vec{q} \;\rangle_\alpha^{(+)} \qquad \text{für jedes } \beta \in \{1, 2, 3\} \end{aligned} \tag{2.66}$$

Die Reduktionsformel (2.38) der antisymmetrisierten S-Matrix lautet

$$\begin{aligned}\delta_{mn} \; - \; \mathcal{A}\, S_{mn}(\vec{q}\,', \vec{q})\delta(\,\vec{q}\,', \vec{q}\,) \\ = \; 2\,\pi\, i\, \delta\,(E'_m - E_n) \sum_{\alpha=1}^{3} {}_{\beta}\langle\; \vec{q}\,', m\,|\, U_{\beta\alpha}\,|\, n, \vec{q}\,\rangle_{\alpha},\end{aligned} \tag{2.67}$$

da nun die linke Seite unabhängig von jedem Kanalindex ist, kann die rechte Seite nicht mehr von β abhängen. Die Kanalindizes an den Dreiteilchen-Energien können natürlich für den Fall identischer Teilchen weggelassen werden, es ist dann $E_{\beta,m} = E_m$. Das bedeutet, daß die antisymmetrisierten Übergangamplituden, die jetzt mit $(\mathcal{AT})_{mn}(z; \vec{q}\,', \vec{q})$ bezeichnet werden sollen, unabhängig von jedem Kanalindex sind.

$$\begin{aligned}(\mathcal{AT})_{mn}(z; \vec{q}\,', \vec{q}) = \sum_{\alpha=1}^{3} {}_{1}\langle\; \vec{q}\,', m\,|\, U_{1\alpha}(z)\,|\, n, \vec{q}\,\rangle_{\alpha} \\ = \; \sum_{\alpha=1}^{3} {}_{2}\langle\; \vec{q}\,', m\,|\, U_{2\alpha}(z)\,|\, n, \vec{q}\,\rangle_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{3} {}_{3}\langle\; \vec{q}\,', m\,|\, U_{3\alpha}(z)\,|\, n, \vec{q}\,\rangle_{\alpha}\end{aligned} \tag{2.68}$$

Etwas anders formuliert besagt dieser Sachverhalt, daß der Zustand

$$|\; n, \vec{q}\;\rangle_{\mathcal{AU}(z);\beta} := \sum_{\alpha=1}^{3} \; U_{\beta\alpha}(z) \;\; |\; n, \vec{q}\;\rangle_{\alpha} \tag{2.69}$$

vollständig antisymmetrisch und im Kanalzustandsraum $\mathcal{H}_\beta$ enthalten sein muß und daß das Skalarprodukt von $|\; n, \vec{q}\;\rangle_{\mathcal{AU}(z);\beta}$ mit einem Zustand ${}_{\beta}\langle\; \vec{q}\,', m|$ nicht mehr vom Kanalindex β abhängen darf. Der Index β soll nur noch daran erinnern, in welchem Kanalzustandsraum man sich befindet, ansonsten hat er jede physikalische Bedeutung verloren.

2.3.3 Die antisymmetrisierten AGS-Übergangsamplituden

Mit Hilfe der AGS-Operatorgleichungen (2.39) lassen sich jetzt sehr einfach Integralgleichungen für die korrekt antisymmetrisierten Übergangsamplituden angeben. Es ist

$$\begin{aligned}|\; n, \vec{q}\;\rangle_{\mathcal{AU}(z);\beta} = G_0^{-1}(z) \;\; \sum_{\alpha=1}^{3} \; \bar{\delta}_{\alpha\beta} \;\; |\; n, \vec{q}\;\rangle_{\alpha} \\ + \;\; \sum_{\gamma=1}^{3} \; G_0^{-1}(z)\, G_0(z)\, \bar{\delta}_{\beta\gamma}\, T_\gamma(z)\, G_0(z) \;\; |\; n, \vec{q}\;\rangle_{\mathcal{AU}(z);\gamma}.\end{aligned} \tag{2.70}$$

Daraus ergibt sich für Matrixelemente des Aufbruchprozesses ${}_{\beta}\langle\, \vec{q}\,', \vec{p}\,'\,|\, n, \vec{q}\;\rangle_{\mathcal{AU}(z);\alpha}$, die hier benutzt werden müssen, da Gleichung (2.70) ansonsten keine Integralgleichung ist (die Amplituden für den Neutron-Deuteron-Streuprozeß erhält man aus den Aufbruchsamplituden durch Überintegration mit Kanalzuständen: der Aufbruch legt den Streuprozeß fest),

$$
\begin{aligned}
{}_\beta\langle\, \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, n, \vec{q}\ \rangle_{\mathcal{AU}(z);\alpha} &= \sum_{\alpha\neq\beta} {}_\beta\langle\ \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, G_0^{-1}(z) \,|\, n, \vec{q}\ \rangle_\alpha \\
&+ \sum_{\gamma\neq\beta} {}_\beta\langle\ \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, G_0^{-1}(z)\, G_0(z)\, T_\gamma(z)\ G_0(z)\ |\, n, \vec{q}\ \rangle_{\mathcal{AU}(z);\gamma}.
\end{aligned}
\tag{2.71}
$$

Einschieben zweier Einsen

$$
\mathbf{1}_\gamma = \int\ d^3\, p\ d^3\, q \,|\, \vec{p}, \vec{q}\ \rangle_\gamma\ {}_\gamma\langle\ \vec{q}\, \vec{p}\ | \tag{2.72}
$$

in $\mathcal{H}_\gamma$ liefert letztlich

$$
\begin{aligned}
{}_{\langle}\, \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, n, \vec{q}\ \rangle_{\mathcal{AU}(z)} &= \sum_{\alpha\neq\beta} {}_\beta\langle\, \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, G_0^{-1}(z) \,|\, n, \vec{q}\ {}_\alpha\rangle \\
&+ \int\!\!\int d^3p''\, d^3q'' d^3p'''\ \sum_{\gamma\neq\beta} {}_\beta\langle\, \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, G_0^{-1}(z) \,|\, \vec{p}\,'', \vec{q}\,''\, \rangle_\gamma
\end{aligned}
$$
$$
\frac{1}{z - \frac{p\,''^2}{2\mu} - \frac{q\,''^2}{2M}} \hat{T}\left(z - \frac{q\,''^2}{2M}; p\,''^2, p\,'''^2\right) \frac{1}{z - \frac{p\,'''^2}{2\mu} - \frac{q\,''^2}{2M}} \langle\, \vec{q}\,'', \vec{p}\,''' \,|\, n, \vec{q}\ \rangle_{\mathcal{AU}(z)}.
\tag{2.73}
$$

Dabei sind auf der rechten Seite sämtliche Indizes weggelassen worden, da sie für identische Teilchen, ebenso wie die auftretenden Massen, kanalunabhängig sein muß. Das gleiche gilt wegen Gleichung (2.69) auch für die Größen

$$
{}_\beta\langle\, \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, n, \vec{q}\ \rangle_{\mathcal{AU}(z);\beta} =: \langle\, \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, n, \vec{q}\ \rangle_{\mathcal{AU}(z)} \tag{2.74}
$$

Es sei darauf hingewiesen, daß die in der Integralgleichung auftretenden effektiven Potentiale $\sum_{\gamma\neq\beta}\ {}_\beta\langle\, \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, G_0^{-1}(z) \,|\ \ n, \vec{q}\rangle_\gamma$ ebenfalls kanalunabhängig sind und es gilt

$$
{}_\beta\langle\, \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, G_0^{-1}(z) \,|\ \ n,\ \vec{q}\rangle_\gamma = \int\ d^3\, p\ \left(z - \frac{p^2}{2\mu} - \frac{q^2}{2M}\right)\ {}_\beta\langle\, \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, \vec{p}, \vec{q}\rangle_\alpha\ \langle\, \vec{p} \,|\, n\, \rangle \tag{2.75}
$$

Hier ist ${}_\beta\langle\, \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, \vec{p}, \vec{q}\rangle_\alpha$ ein sogenannter Umkopplungskoeffizient. Seine Berechnung ist extrem kompliziert, das Ergebnis wird nur für den Fall der partialwellenzerlegten AGS-Gleichungen (Abschnitt 2.4.4) angegeben. Im wesentlichen bewirkt er zwar eine Verringerung der in (2.73) auftretenden Integrationen, jedoch ist die Dimension der resultierenden Integralgleichung größer als drei, was die Zweidimensionalität der partialwellenzerlegten AGS-Gleichung (siehe Abschnitt (2.4.4) zur Folge hat. Im übrigen ist auch eine dreidimensionale Integralgleichung selbst mit modernsten Vektorrechnern nicht numerisch zu lösen; das scheint erst mit leistungsstarken Parallelrechnern machbar.

2.4 Die Drehimpulszerlegung

2.4.1 Invarianzen und Kopplungsschema

Die Invarianzen des nuklearen Zwei- und Dreiteilchen-Problems sind

1. Rotationsinvarianz im gesamten Hilbertraum
2. Paritätsinvarianz gegen Raumspiegelungen
3. Rotationsinvarianz im Isospin-Raum bei ladungsunabhängigen Potentialen
4. Zeitumkehrinvarianz,

die dazugehörigen Erhaltungsgrößen werden in Tabelle (1) aufgelistet.

Erhaltungsgröße	Zweikörperproblem	Dreikörperproblem
Gesamtdrehimpuls	$\vec{J}$	$\vec{\Gamma}$
Gesamtparität	π	Π
Gesamtisospin	$\vec{T}$	$\vec{I}$

Tabelle 1: Erhaltungsgrößen.

Um die Drehimpulsentwicklung optimal vornehmen zu können, muß eine Kopplungsreihenfolge festgelegt werden, die natürlich durch die Erhaltungsgrößen nahegelegt wird. In dieser Arbeit wird die Kanalspinbasis benutzt, d.h. man koppelt auf dem Zweiteilchen-Level zur wohlbekannten LSJ-T-Basis um, bildet aus dem Subsystem-Gesamtdrehimpuls und dem Spin des dritten Teilchens den Kanalspin, der wiederum mit dessen Bahndrehimpuls ℓ zum Gesamtdrehimpuls $\vec{\Gamma}$ gekoppelt wird. Im Detail:

$$\left.\begin{array}{r} \text{Subsystem-Bahndrehimpuls } \vec{L}_\gamma \\ \left.\begin{array}{l} \text{Einteilchen-Spin } \vec{s}_\alpha \\ \text{Einteilchen-Spin } \vec{s}_\beta \end{array}\right\} \text{Subsystem-Spin } \vec{S}_\gamma \end{array}\right\} \text{Subsystem-Gesamtdrehimpuls } \vec{J}_\gamma$$

$$\left.\begin{array}{l} \text{Einteilchen-Isospin } \vec{\tau}_\alpha \\ \text{Einteilchen-Isospin } \vec{\tau}_\beta \end{array}\right\} \text{Subsystem-Isospin } \vec{T}_\gamma$$

Abbildung 3: Kopplung des Subsystems.

$$
\left.\begin{array}{r}
\text{Relativ-Bahndrehimpuls } \vec{\ell}_\gamma \\[2ex]
\left.\begin{array}{l}
\text{Subsystem-Gesamtdrehimpuls } \vec{J}_\gamma \\[2ex]
\text{Einzelteilchen-Spin } \vec{\tau}_\gamma
\end{array}\right\} \text{ Kanalspin } \vec{k}_\gamma
\end{array}\right\} \text{ Gesamtdrehimpuls } \vec{\Gamma}
$$

$$
\left.\begin{array}{l}
\text{Subsystem-Isospin } \vec{T}_\gamma \\[2ex]
\text{Einzelteilchen-Isospin } \vec{\tau}_\gamma
\end{array}\right\} \text{ Gesamtisospin } \vec{I}_\gamma
$$

Abbildung 4: Kopplung des dritten Teilchens an das Subsystem.

Die LSJ-T-Basis bzw. die Kanalspin-Basis sind also gekennzeichnet durch folgende Zustände

$$|x, L, (s_\alpha, s_\beta)S, J, M_J\rangle_\gamma \otimes |(\tau_\alpha, \tau_\beta)T, M_T\rangle_\gamma, \tag{2.76}$$

$$|x, ((J, s)k, \ell)\Gamma, M_\Gamma\rangle_\gamma \otimes |(T, \tau)I, M_I\rangle_\gamma. \tag{2.77}$$

x bezeichnet hier möglicherweise vorhandene andere Quantenzahlen. Zum genaueren Verständnis werden in Tabelle 2 alle auftretenden Quantenzahlen aufgelistet. Hier

Quanten-zahl	Bezeichnungen	Projektion	Kopplungs-schema
s	*Nukleonen* - Spin	m_s	
τ	- Isospin	m_τ	
L	*Subsystem* - Bahndrehimpuls	M_L	
S	- Spin	M_S	$(s_\alpha s_\beta)S$
J	- Gesamtdrehimpuls	M_J	(LS)J
T	- Isospin	M_T	$(\tau_\alpha\tau_\beta)T$
$\pi = (-1)^L$	- Parität		
$c_2 = (SJT)$	- Kanal		
k	Kanalspin	m_k	$(Js_\gamma)k$
ℓ	Relativ-Bahndrehimpuls	m_ℓ	
$c_3 = (c_2 k\ell)$	*Dreiteilchen* - Kanal		
Γ	- Gesamtdrehimpuls	M_Γ	$(k\ell)\Gamma$
$\Pi = (-1)^{L+1}$	- Parität		
I	- Gesamtisospin	M_I	$(T\tau_\gamma)I$

Tabelle 2: Bezeichnungen und Kopplungsschema.

sind c_2 und c_3 Abkürzungen, die aus Gründen der Übersichtlichkeit in dieser Arbeit verwendet werden sollen. Da der Spin bzw. Isospin eines Nukleons $\sigma = \tau = \frac{1}{2}$ beträgt, werden diese Größen in den Basis-Zuständen nicht mehr notiert.

2.4.2 Die drehimpulszerlegte Dreiteilchen-Basis aus freien Zuständen

Die freie, drehimpulszerlegte Dreiteilchen-Basis erhält man direkt aus der Kopplung der Zweiteilchen-LSJ-T-Basis

$$| \, p, LSJM_J \; \rangle_\gamma \, | \; TM_T \; \rangle_\gamma =: | \; p, LSJM_J; TM_T \; \rangle_\gamma =: | \; p, L, c_2, M_J, M_T \; \rangle_\gamma \tag{2.78}$$

mit Zuständen

$$\Big| \; s_\gamma, m_{s_\gamma} \; \rangle_\gamma \; | \; q, \ell \; \rangle_\gamma \; | \; \ell, m_\ell \; \rangle_\gamma \; \Big| \; \tau_\gamma, m_{\tau_\gamma} \; \rangle_\gamma \tag{2.79}$$

des dritten freien Teilchens in der oben angegebenen Reihenfolge. Zur Konstruktion der drehimpulszerlegten freien Einteilchen-Basis wurde auf die wohlbekannte Beziehung

$$| \; \vec{p} \; \rangle = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_\ell=-\ell}^{+\ell} | \; p, \ell \; \rangle \; | \; \ell, m_\ell \; \rangle \, \langle \, m_\ell, \ell \, | \, \hat{p} \, \rangle \quad mit \quad p = | \, \vec{p} \, | \quad und \quad \hat{p} = \frac{\vec{p}}{p} \tag{2.80}$$

zurückgegriffen. Dieses Verfahren liefert als Dreiteilchen-Basis

$$| \; p, q, L, S, J, s_\gamma, k, \ell, \Gamma M_\Gamma, T\tau_\gamma, IM_I \; \rangle_\gamma =: | \; p, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I \; \rangle_\gamma \tag{2.81}$$

mit

$$\begin{aligned} &{}_\gamma\langle \, M_{I\,'} I\,', M_{\Gamma\,'}\Gamma\,', c_3' \, , L\,' \, , q\,', p\,' \, | \, p, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I \, \rangle_\gamma \\ &= \frac{\delta(p\,' - p)}{p^2} \, \frac{\delta(q\,' - q)}{q^2} \, \delta_{L\,'L} \, \delta_{c_3'c_3} \, \delta_{\Gamma\,'\Gamma} \, \delta_{M_{\Gamma}\,'M_\Gamma} \, \delta_{I\,'I} \, \delta_{M_I\,'M_I} \end{aligned} \tag{2.82}$$

$$\mathbf{1}_\gamma = \sum_{L, c_3, \Gamma, M_\Gamma, I, M_I} \int dp \, p^2 \, dq \, q^2 \; |p, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I\rangle_\gamma \;\; {}_\gamma\langle \, M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3, L, q, p| \, , \tag{2.83}$$

wobei $\delta_{c_3'\,c_3} = \delta_{c_2'\,c_2} \, \delta_{k\,'k} \, \delta_{\ell\,'\ell}$ ist. Natürlich gelten in der freien drehimpulszerlegten Zweiteilchen-Basis die analogen Beziehungen

$$\begin{aligned} &{}_\gamma\langle \, M_{T\,'}, M_{J\,'}, c_2' \, , L\,' \, , p\,' \, | \, p, L, c_2, M_J, M_T \, \rangle_\gamma \\ &= \frac{\delta(p\,' - p)}{p^2} \, \delta_{L\,'L} \, \delta_{c_2'c_2} \, \delta_{M_J\,'M_J} \, \delta_{M_T\,'M_T} \end{aligned} \tag{2.84}$$

$$\widehat{\mathbf{1}}_\gamma = \sum_{L, c_2, M_J, M_T} \int dp \, p^2 \; | \; p, L, c_2, M_J, M_T \; \rangle_\gamma \;\; {}_\gamma\langle \; M_T, M_J, c_2, L, p \; | \, , \tag{2.85}$$

wobei wiederum $\delta_{c_2'c_2} = \delta_{S\,'S} \, \delta_{J\,'J} \, \delta_{T\,'T}$ ist.

2.4.3 Partialwellenzerlegung der Kanalzustände

Gemäß Gleichung (2.13) werden Kanalzustände $|\, n, \vec{q}\,\rangle_\gamma$ definiert durch

$$|\, n, \vec{q}\,\rangle_\gamma = |\, n\,\rangle_\gamma \;\otimes\; |\,\vec{q},\, s\, m_s,\, t\, m_t\rangle_\gamma, \tag{2.86}$$

wobei $|\, n\,\rangle_\gamma$ den n-ten Subsystem-Bindungszustand im Kanal γ bezeichnet. Wegen (A.4) läßt sich der Bindungszustand immer in der Form

$$|\, n\,\rangle_\gamma = \sum_{L, c_2, M_T} \int dp\, p^2 \;|\, n, c_2, M_J, M_T\rangle_\gamma \tag{2.87}$$

schreiben. Mit Hilfe der Drehimpulszerlegung (2.80) eines Zustands $|\,\vec{p}\,\rangle$ und unter Berücksichtigung des Spins und Isospins $|\, s, m_s\rangle_\gamma\, |\, t, m_t\rangle_\gamma$ des dritten Teilchens, ergibt sich durch simples Umkoppeln sofort die nach Drehimpulsen zerlegte Basis des Kanalzustandsraumes $\mathcal{H}_\alpha$ (siehe Anhang(A.4))

$$|\, n, q, c_2, k, \ell, \Gamma M_\Gamma, I M_I\rangle_\gamma = |\, n, q, c_3, \Gamma M_\Gamma, I, M_I\rangle \tag{2.88}$$

$$\begin{aligned} &{}_\gamma\langle\, M_{I'} I', M_{\Gamma'} \Gamma', c_3', q', n' \,|\, n, q, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I\,\rangle_\gamma \\ &= \frac{\delta(q'-q)}{q^2}\, \delta_{n'n}\, \delta_{c_3' c_3}\, \delta_{\Gamma'\Gamma}\, \delta_{M_{\Gamma'} M_\Gamma}\, \delta_{I'I}\; \delta_{M_{I'} M_I} \end{aligned} \tag{2.89}$$

$$\mathbf{1}_\gamma = \sum_{n, c_3, \Gamma, M_\Gamma, I M_I} \int dq\, q^2\; |n, q, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I\rangle_\gamma \;\; {}_\gamma\langle M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3, q, n|\,. \tag{2.90}$$

Hier bleibt anzumerken, daß die Summation über c_3 im wesentlichen die Summation über k und l bedeutet. Die $c_2 = (SJT)$ werden durch die Bindungszustände festgelegt. Falls mehrere mit verschiedenen c_2 vorhanden sind, muß natürlich auch darüber summiert werden. Explizit hat ein Kanalzustand in dieser Basis die Form

$$\begin{aligned} |\, n, \vec{q}, s m_s, \tau m_\tau\,\rangle = &\sum_{\Gamma, M_\Gamma, I, M_I, k, m_k, \ell, m_\ell} \int dq\, q^2\; |\, n, q, c_2, k, \ell, \Gamma M_\Gamma, I, M_I\rangle_\gamma \\ &\langle\, M_I I \,|\, T M_T, \tau m_\tau\,\rangle\, \langle\, m\ell \,|\, k m_k, \ell m_\ell\,\rangle\, \langle\, m_k k \,|\, J M_J, s m_s\,\rangle\, \langle\, m_\ell \ell \,|\, \hat{q}\,\rangle, \end{aligned} \tag{2.91}$$

wobei berücksichtigt wurde, daß es nur einen Bindungszustand mit festem c_2 und M_T gibt.

2.4.4 Die Darstellung der AGS-Übergangsoperatoren in der nach Partialwellen zerlegten Kanalzustandsbasis

In Abschnitt (2.3.2) war durch Gleichung (2.69)

$$| \, n, \vec{q} \, \rangle_{\mathcal{AU}(z);\beta} = \sum_{\alpha=1}^{3} \; U_{\beta\alpha}(z) \; | \, n, \vec{q} \, \rangle_{\alpha}$$

gezeigt worden, daß $| \, n, \; \vec{q} \, \rangle_{\mathcal{AU}(z);\beta}$ ein vollständig antisymmetrischer Zustand aus $\mathcal{H}_\beta$ ist. Daraus folgt selbstverständlich, daß

$$| \, n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \; \rangle_{\mathcal{AU}(z);\beta} := \sum_{\alpha=1}^{3} \; U_{\beta\alpha}(z) \; | \, n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \; \rangle_{\alpha} \tag{2.92}$$

ebenfalls ein vollständig antisymmetrischer Zustand aus $\mathcal{H}_\beta$ ist. Deshalb erhält man die korrekt antisymmetrisierten Übergangsamplituden

$$\sum_{\alpha=1}^{3} \; {}_{\beta}\langle \; M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3', L', q', m \, | \, U_{\beta\alpha}(z) \; | \, n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I, \rangle_{\alpha} \tag{2.93}$$

in der drehimpulszerlegten Kanalzustandsbasis. Diese Übergangsamplituden sind von den Kanalindizes unabhängig. Für die Aufbruchs-Übergangsamplituden in dieser Basis ergibt sich nach Gleichung (2.71)

$$\begin{aligned}
&{}_{\beta}\langle \, M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3', L', q', p' \, | \, n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \, \rangle_{\mathcal{AU}(z);\beta} = \\
&\quad \sum_{\alpha \neq \beta} \; {}_{\beta}\langle \, M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3', L', q', p' \, | \, G_0^{-1}(z) \, | \, n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \, \rangle_{\alpha} \, + \\
&\quad \sum_{\gamma \neq \beta} \; {}_{\beta}\langle \, M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3', L', q', p' | \, T_\gamma(z) G_0(z) \, | n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \rangle_{\mathcal{AU}(z);\gamma}.
\end{aligned} \tag{2.94}$$

Der zweite Summand auf der rechten Seite soll im folgenden genauer untersucht werden. Durch Einschieben zweier Einsen in $\mathcal{H}_\gamma$ erhält man sofort

$$\begin{aligned}
&\sum_{\gamma \neq \beta} \; {}_{\beta}\langle \, M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3', L', q', p' | \, T_\gamma(z) G_0(z) \, | n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \rangle_{\mathcal{AU}(z);\gamma} = \\
&\quad \sum_{c_3'', L'', L'''} \; \sum_{\gamma \neq \beta} \int dp'' \, p''^2 \, dq'' \, q''^2 \, dp''' \, p'''^2 \\
&\quad {}_{\beta}\langle \, M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3', L', q', p' \, | \, p'', q'', L'', c_3'', \Gamma M_\Gamma, I M_I \, \rangle_{\gamma} \\
&\quad \hat{T}^{c_2''}_{L'' L'''} \left(z - \frac{q''^2}{2M} \, ; p''^2, p'''^2 \right) \frac{1}{z - \frac{p'''^2}{2\mu} - \frac{q''^2}{2M}} \\
&\quad {}_{\gamma}\langle \, M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3'', L''', q'', p''' \, | \, n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \, \rangle_{\mathcal{AU}(z);\gamma}
\end{aligned} \tag{2.95}$$

Gemäß Anhang (A.5) ist der Umkopplungsfaktor gegeben durch

$$
{}_{\beta}\langle\, M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3', L', q', p' \,|\, p'', q'', L'', c_3'', \Gamma M_\Gamma, I M_I \,\rangle_\gamma =
$$
$$
q'^{L'+L''} \sum_{\hat{l}}^{lmax} \sum_{h=0}^{L'+L''} \left(\frac{q''}{q'}\right)^h U_{\Gamma I}^{c_3' c_3''}(\hat{l}, h)\, \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} dx\, P_{\hat{l}}(x) \frac{\delta(p' - p_\beta''(x))\, \delta(p'' - p_\gamma'(x))}{p'^2\, p''^2\, p_\beta''^{L'}(x) p_\gamma'^{L''}(x)}, \tag{2.96}
$$

wobei

$$
p_\beta''(x) = \sqrt{q''^2 + \frac{1}{4} q'^2 + q'' q' x} \qquad\qquad p_\gamma'(x) = \sqrt{q'^2 + \frac{1}{4} q''^2 + q'' q' x}, \tag{2.97}
$$

$2\, l_{max} = L' + l' + L'' + l''$ und $P_l(x)$ ein Legendre-Polynom l-ter Ordnung ist. Man erkennt, daß die beiden auftretenden δ-Distributionen es ermöglichen, zwei der insgesamt vier Integrationen auszuführen, um letztlich ein zweidimensionales Integralgleichungssystem zu erhalten. Solche Gleichungssysteme sind heute numerisch lösbar, allerdings nur unter großem Aufwand auf Vektor- und Parallelrechnern.

Das Auftreten einer zweidimensionalen Integralgleichung beruht formal auf dem Einschieben einer Eins aus *freien* Zuständen; wird stattdessen eine Eins aus *Kanal*zuständen benutzt, so ergibt sich ein eindimensionales Gleichungssystem, in dem nur die ${}^3S_1 - {}^3D_1$-Welle der T-Matrix des Subsystems erscheint, während in (2.95) über alle Subsystem-Partialwellen summiert wird. Der physikalische Grund ist offensichtlich: Einschieben einer Eins aus Kanalzuständen verbietet ein Aufbrechen des Subsystems in den Zwischenzuständen. Eine solche Beschreibung entspricht demnach einer „quantenmechanischen" Formulierung des klassischen Neutron-Deuteron-Streuproblems. Es bleibt festzuhalten, daß allein schon die Möglichkeit zum Aufbruch des Subsystem-Clusters in den Zwischenzuständen notwendig die Zweidimensionalität des Integralgleichungssystems bedingt.

Jetzt soll erneut Gleichung (2.94) oder genauer der Zustand

$$
T_\gamma(z) G_0(z) \,|\, n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \rangle_{\mathcal{AU}(z);\gamma} \tag{2.98}
$$

unter der zusätzlichen Annahme, daß der Zweiteilchen-$\hat{T}$-Operator separabel darstellbar ist, also

$$
\hat{T}(\hat{z}) = \sum_{r,s} |\ \Phi_r\ \rangle\, t_{rs}(\hat{z})\, \langle\ \Psi_s\ | \qquad T_\gamma(z) = \sum_{r,s} \int d^3q\ |\ \vec{q},\ \Phi_r\ \rangle_\gamma\, t_{rs}(z)\, {}_\gamma\langle\ \Psi_s,\ \vec{q}\ |, \tag{2.99}
$$

betrachtet werden. Der Zweiteilchen-$\hat{T}$-Operator hat in der LSJ-Basis die Darstellung

$$
\hat{T}(\hat{z}) = \sum_{r,s} \sum_{J, J_3, L', L} \int dp\, p^2\, dp'\, p'^2
$$
$$
|\ p', J, J_3, L'\ \rangle \langle\, L', J_3, J, p' \,|\, \Phi_r \,\rangle\, t_{rs}^{c_2}(\hat{z})\, \langle\, \Psi_s \,|\, p, J, J_3, L \,\rangle \langle\ L, J_3, J, p\ |\,. \tag{2.100}
$$

Mit den Formfaktoren

$$|J, J_3, L;\ \Phi_r\,\rangle = \int dp\, p^2\ |\ p, J, J_3, L\ \rangle\,\langle\, L, J_3, J, p\,|\,\Phi_r\,\rangle \tag{2.101}$$

vereinfacht sich diese Darstellung zu

$$\hat{T}(\hat{z}) = \sum_{r,s} \sum_{J,J_3,L,L'}\ |\ J, J_3, L';\ \Phi_r\ \rangle\, t^{c_2}_{rs}(\hat{z})\,\langle\ \Phi_s;\ L, J_3, J\ |\,. \tag{2.102}$$

Ganz analog ergibt sich für den Dreiteilchen-T-Operator

$$T_\gamma(z) = \sum_{r,s} \sum_{L',c_2,k',k,\ell',\ell,\Gamma,M_\Gamma,I,MI} \int dq\, q^2$$

$$|\ q, L', c_2, k', \ell', \Gamma M_\Gamma, IM_I;\ \Phi_r\ \rangle_\gamma\ t^{c_2}_{rs}(z - \frac{q^2}{2M})\ {}_\gamma\langle\ \Psi_s;\ M_I I, M_\Gamma\Gamma, \ell, k, c_2, L, q\ | \tag{2.103}$$

wobei die hier auftretenden Dreiteilchen-Formfaktoren

$$|\ q, L, c_2, k, \ell, \Gamma M_\Gamma, IM_I,\ \Phi_r\ \rangle_\gamma \tag{2.104}$$

sich aus der geeigneten Zusammenkopplung der Subsystem–Formfaktoren (2.104) und der freien Basis des dritten Teilchens ergeben. Mit diesen Größen erhält man für (2.98)

$$\begin{aligned} &T_\gamma(z)\, G_0(z)\ |n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I\rangle_{\mathcal{AU}(z);\gamma} = \\ &\quad \sum_{r,s} \sum_{L'',L''',c2'',k'',\ell''} \int dq''\, q''^2 \\ &\quad |\ q'', L'', c_2'', k'', \ell'', \Gamma M_\Gamma, IM_I,\ \Phi_r\ \rangle_\gamma\ t^{c_2}_{rs}(z - \frac{q''^2}{2M}) \\ &\quad {}_\gamma\langle\ \Psi_s,\ M_I I, M_\Gamma\Gamma, \ell'', k'', c_2'', L''', q''\,|\,G_0(z)\,|\,n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I\,\rangle_{\mathcal{AU}(z);\gamma} \end{aligned} \tag{2.105}$$

Schon an dieser Stelle sieht man, daß die Bestimmungsgrößen der Integralgleichung, nämlich

$${}_\gamma\langle\ \Psi_s,\ M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3'', L''', q''\,|\,G_0(z)\,|\,n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I\,\rangle_{\mathcal{AU}(z);\gamma} \tag{2.106}$$

nur dann die exakten Übergangsoperatoren in der Kanalzustandsbasis sind, wenn sich die Kanalzustände in folgender Weise

$${}_\gamma\langle\ \Psi_s,\ M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3, L, q\ |\ G_0\,(z) = {}_\gamma\langle\ M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3, L, q, n\ | \tag{2.107}$$

durch die Formfaktoren (2.104) darstellen lassen. Um eine Integralgleichung für diese Bestimmungsgrößen zu erhalten, ist es außerdem notwendig, die Gleichung

$$\begin{aligned} &|\ n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I\ \rangle_{\mathcal{AU}(z);\alpha} = \\ &\quad \sum_{\alpha\neq\beta} G_0^{-1}(z)\ |\ n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I\ \rangle_\alpha + \\ &\quad \sum_{\gamma\neq\beta} T_\gamma(z) G_0(z)\,|\ n, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I\ \rangle_{\mathcal{AU}(z);\gamma} \end{aligned} \tag{2.108}$$

mit $G_0(z)$ zu multiplizieren und Matrixelemente mit den Formfaktoren

$$_\beta\langle\ \Psi_s,\ M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3', L', q'\ | \tag{2.109}$$

zu bilden. Berücksichtigt man zusätzlich (2.107) und führt in Analogie zu Gleichung (2.69) total antisymmetrisierte Zustände in $\mathcal{H}\gamma$ durch

$$\begin{aligned}(\mathcal{AU})(z)G_0(z)\,|\ q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I,\ \Phi_s\ \rangle_\gamma :=\\ \sum_{\alpha=1}^{3} U_{\gamma\alpha}\, G_0(z)\ |\ q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I,\ \Phi_s\ \rangle_\alpha\end{aligned} \tag{2.110}$$

ein, so läßt sich das Integralgleichungssystem in der Form

$$\begin{aligned}&_\beta\langle\ \Psi_m,\ M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3', L', q'\,|\,G_0(z)\,(\mathcal{AU})(z)\,G_0(z)\,|\,q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I,\ \Phi_n\ \rangle_\beta =\\ &\quad\sum_{\alpha\neq\beta}{}_\beta\langle\ \Psi_m,\ M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3', L', q'\,|\,G_0(z)\,|\,q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I,\ \Phi_n\ \rangle_\alpha +\\ &\quad\sum_{r,s}\ \sum_{c_3'', L'', L'''}\ \sum_{\gamma\neq\beta}\int dq''\, q''^2\\ &\quad\langle\ \Psi_m,\ M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3', L', q'\ |\ G_0(z)\,|\,q'', L'', c_3'', \gamma M_\gamma, IM_I,\ \Phi_r\ \rangle_\gamma\ t_{rs}^{c_2''}(z-\frac{q''^2}{2M})\\ &\quad_\gamma\langle\ \Psi_s,\ M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3'', L''', q''\,|\,G_0(z)\,(\mathcal{AU})(z)\,G_0(z)\,|\,q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I,\ \Phi_n\ \rangle_\gamma\end{aligned} \tag{2.111}$$

schreiben. Um dieses System in eine übersichtlichere Form zu bringen, werden folgende Bezeichnungen für die antisymmetrisierten kanalunabhängigen Übergangsamplituden

$$\begin{aligned}&{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})^{mn}_{c_2'c_2;k'k,\ell'\ell;L'L}(z;q',q) :=\\ &\quad_\beta\langle\ \Psi_m,\ M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3', L', q'\,|\,G_0(z)\,(\mathcal{AU})(z)\,G_0(z)\,|\,q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I,\ \Phi_n\ \rangle_\beta\end{aligned} \tag{2.112}$$

und für die antisymmetrisierten, ebenfalls kanalunabhängigen effektiven Potentiale

$$\begin{aligned}&{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{mn}_{c_2'c_2;k'k,\ell'\ell;L'L}(z;q',q) :=\\ &\quad\sum_{\alpha\neq\beta}{}_\beta\langle\ \Psi_m,\ M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3', L', q'\,|\,G_0(z)\,|\,q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, IM_I,\ \Phi_n\ \rangle_\alpha\end{aligned} \tag{2.113}$$

eingeführt. Damit erhält das Gleichungssystem folgende kompaktere Form

$$\begin{aligned}&{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})^{mn}_{c_2'c_2;k'k,\ell'\ell;L'L}(\boldsymbol{z};\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}) = {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{mn}_{c_2'c_2;k'k,\ell'\ell;L'L}(\boldsymbol{z};\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q})\\ &\quad\sum_{r,s}\ \sum_{c_2'',k'',\ell'',L'',L'''}\int \boldsymbol{dq''}\,\boldsymbol{q''^2}\ {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{mr}_{c_2'c_2'';k'k'',\ell'\ell'';L'L''}(\boldsymbol{z};\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}'')\ \boldsymbol{t}^{c_2''}_{rs}(\boldsymbol{z}-\frac{\boldsymbol{q''^2}}{\boldsymbol{2M}})\\ &\quad{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})^{s,n}_{c_2''c_2;k''k;\ell''\ell;L'''L}(\boldsymbol{z};\boldsymbol{q}'',\boldsymbol{q}).\end{aligned} \tag{2.114}$$

Dieses, mit Hilfe eines separablen T-Operators gewonnene Integralgleichungssystem ist zwar unendlich gekoppelt, aber definitiv eindimensional und mit einem vergleichsweise erträglichen numerischen Aufwand lösbar. Es beinhaltet, wie die zweidimensionale exakte Version grundsätzlich alle nur möglichen Subsystem-Partialwellen. Allerdings muß erneut darauf hingewiesen werden, daß die Eindimensionalität wesentlich aus der Separabilität des T-Operators resultiert. Praktisch alle semirealistischen und realistischen Potentiale liefern keine separablen Zweiteilchen-Übergangsoperatoren. Um solche zu erhalten, können beispielsweise die Potentiale separabel genähert werden; das führt sofort zu einem separablem T-Operator. Dieses Verfahren läßt sich zumindest für energieunabhängige Potentiale gut begründen. Allerdings zeigt sich, daß alle separablen Approximationen stark vom Rang der Separabilität, d.h. von der Anzahl der Summanden in der separablen Approximation (2.99) abhängen. Erst bei hinreichend hohem Rang liefert diese Methode vernünftige Ergebnisse. Je mehr Summanden allerdings benötigt werden, um so größer wird das Integralgleichungssystem: die Zahl der Kopplungen und insbesondere die Dimension des nach Diskretisierung resultierenden linearen Gleichungssystems nehmen gewaltig zu, so daß seine numerische Lösung sehr aufwendig wird.

Optimal ist natürlich eine separable Darstellung des T-Operators aus einem Term. In Kapitel vier wird gezeigt, wie mittels der W-Matrix-Methode eine separable Approximation der partialwellenzerlegten T-Matrix für alle, auch energieabhängige Potentiale in Impulsraum konstruiert werden kann, die im Falle eines nichtgekoppelten Kanals aus einem Term, im Falle eines gekoppelten Kanals aus vier Termen besteht.

2.5 Das Bindungsproblem in der partialwellen-zerlegten Kanalzustandsbasis

Ganz analog zu (2.95) ergibt sich für die homogene Gleichung der Bindungszustands-Formfaktoren (2.55) bei exakter Berücksichtigung der T-Matrix ein zweidimensionales homogenes Integralgleichungssystem. Ist T wieder separabel darstellbar (2.99), so erhält man in direkter Analogie zu Abschnitt 2.4.4 mit der Definition

$$^{\Gamma,I}(\mathcal{AF}_n)^m_{c_2';k',\ell';L'}(E_n;q') := {}_\gamma\langle\ \Psi_m,\ M_I I, M_\Gamma\Gamma, k', \ell', c_2', L', q' \,|\, G_0(z) \,|\, F_n\,\rangle_\gamma \tag{2.115}$$

$$^{\Gamma,I}(\mathcal{AF}_n)^m_{c_2';k',\ell';L'}(E_n;q') = \sum_{r,s} \sum_{c_2,k,\ell,L} \int dq q^2\, {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{m,r}_{c_2'c_2;k'k,\ell'\ell;L'L}(E_n;q',q)\ t^{c_2}_{rs}\left(z-\frac{q^2}{2M}\right)\ {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AF}_n)^s_{c_2;k;\ell;L}(E_n;q). \tag{2.116}$$

3 Einige Erläuterungen zum Bonn-Potential

Das Bonn-Potential ist Ergebnis des Versuchs, mit Hilfe eines Mesonen-Austausch-Potential-Modells die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung zu beschreiben. Im Rahmen bestimmter feldtheoretischer Modellvorstellungen werden Nukleonen als elementare Teilchen betrachtet -ansonsten wäre das Zweinukleonen-Problem auch nicht peripher lösbar. Im folgenden wird nur mit einigen Anmerkungen auf die Konstruktion des Bonn-Potentials eingegangen [25, 17], im wesentlichen sollen einige wenige technische Details angesprochen werden, damit deutlich wird, wie man mit dem energieabhängigen und der energieunabhängigen Version des Bonn-Potentials umzugehen hat. Andererseits erscheint es dem Autor dieser Arbeit kompliziert zu verstehen, wie die verschiedenen Bonn-Potentiale konstruktionsmäßig miteinander zusammenhängen. Es sei betont, daß in diesem Abschnitt keine sogenannt „natürlichen“ Einheiten verwendet werden. Der Verständlichkeit halber sind hier Impulse und Energien in Einheiten von MeV angegeben; $\hbar$ und die Nukleonenmasse m haben die üblichen Werte (m=938.926 MeV, $\hbar$=197.3286 MeV f).

Historisch gesehen existierte zuerst eine energieunabhängige Version [15]. Der Ansatz zu dessen Konstruktion greift zurück auf die Bethe-Salpether-Gleichung (BS). Bethe und Salpeter haben mittels Überlegungen, die auf relativistischen Feldtheorien (Feynman-Graphen) basieren, gezeigt, daß die relativistische Zweinukleonen-Übergangsamplitude als Lösung folgender Integralgleichung (als Operatoren geschrieben)

$$\hat{M} = \hat{K} + \hat{K}\,\hat{G}\,\hat{M} \tag{3.1}$$

oder explizit in der Impulsraum-Darstellung

$$\hat{M}(P;p',p) = \hat{K}(P;p',p) + \int d^4q\,\hat{K}(P;p',q)\,\hat{G}(P;q)\,\hat{M}(P;q,p), \tag{3.2}$$

dargestellt werden kann. Hier sind P=(P_0,0) der relative Vierer-Impuls im Center-of Momentum System und p$'$, p und q die Vierer-Impulse der Ausgangs-, Eingangs- und Zwischenzustände. Der die Wechselwirkung wiedergebende Kern $\hat{K}$ dieser Gleichung besteht aus der Summe aller irreduziblen Zweinukleonen-Diagramme

$$\hat{K}(P;p',q) = \sum_{n=1}^{\infty} V^{(2n)}(P;p',p) \tag{3.3}$$

(der Index 2n bezieht sich hier auf die Potenz der Kopplungskonstante des Meson-Nukleon-Vertex) und der relativistische Zweiteilchen-Propagator ist durch

$$G(P;q) = \frac{i}{(2\pi)^4}\frac{1}{\left(\frac{1}{2}\gamma_\mu P^\mu + \gamma_\mu q^\mu - m + i\epsilon\right)_{(1)}\left(\frac{1}{2}\gamma_\mu P^\mu - \gamma_\mu q^\mu - m + i\epsilon\right)_{(2)}} \tag{3.4}$$

gegeben (die Indizes 1 und 2 bezeichnen hier die beiden Nukleonen). Um zu dieser vierdimensionalen kovarianten Gleichung [15, 17] eine Lösung zu finden, bedarf es generell einiger Näherungen: zum einen wird die Wechselwirkung, exakt gegeben durch den Austausch beliebig vieler Mesonen, durch Ein-Boson-Austausch parametrisiert (dazu müssen künstliche, d.h. real nicht existierende Austausch-Mesonen eingeführt werden). Außerdem muß der relativistische, d.h. vierdimensionale Zweinukleonen-Propagator durch einen dreidimensionalen kovarianten Propagator ersetzt werden.

Um dies zu erreichen wird in der Regel die BS-Gleichung (3.2) durch ein äquivalentes Gleichungssystem

$$\hat{M} = \hat{W} + \hat{W}\,\hat{g}\,\hat{M} \tag{3.5}$$

$$\hat{W} = \hat{V}^{(2)} + \hat{V}^{(2)}\left(\hat{G} - \hat{g}\right)\hat{W} \tag{3.6}$$

ersetzt. Man erhält es sofort wegen

$$\left(1 - \hat{V}^{(2)}\left(\hat{G} - \hat{g}\right)\right)\hat{M} - \hat{V}^{(2)}\,\hat{g}\,M = \hat{K} \tag{3.7}$$

und der Definition

$$\left(1 - \hat{V}^{(2)}\left(\hat{G} - \hat{g}\right)\right)\hat{W} = \hat{V}^{(2)} \tag{3.8}$$

durch Einsetzen. Dieses, bis auf die Ein-Boson-Austausch-Parametrisierung exakte Gleichungssystem wird approximiert, indem auf der rechten Seite von Gleichung (3.6) der zweite Summand vernachlässigt wird. Blankenbecler und Sugar [15][17] haben gezeigt, daß mit der kovarianten Wahl

$$\hat{g}(P_0; q) = \delta(q_0)\,\tilde{g}(P_0; \vec{q}), \tag{3.9}$$

wobei

$$\tilde{g}(P_0; \vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\,\frac{m^2}{E_q}\,\frac{\Lambda_1^{(+)}(\vec{q})\,\Lambda_2^{(+)}(-\vec{q})}{\frac{P_0^2}{4} - E_q^2 + i0}, \tag{3.10}$$

$P_0 = \sqrt{s}$ die totale Center-of Momentum Energie, $\mathrm{E}_q = \sqrt{m^2 + \vec{q}^{\,2}}$ und $\Lambda_i^{(+)}(\vec{q})$ die kovarianten Projektions-Operatoren für beide Teilchen auf positive Energien sind, eine unitaritätserhaltende Approximation des Zweinukleonen-Propagators geliefert wird. Hier ist $\sqrt{s} = 2\sqrt{m^2 + \vec{k}^2}$ und $\vec{k}$ der nicht-relativistische On-Shell-Relativ-Impuls des Zweinukleonen-Systems. Damit und mit den Definitionen (Minimal Relativity)

$$\bar{M}(\sqrt{s}; \vec{p}\,', \vec{p}) = \sqrt{\frac{m}{E_{p'}}}\,\hat{M}(\sqrt{s}; \vec{p}\,', \vec{p})\sqrt{\frac{m}{E_p}} \tag{3.11}$$

und

$$\bar{V}(\sqrt{s}; \vec{p}\,', \vec{p}) = \sqrt{\frac{m}{E_{p'}}}\,\hat{V}(\sqrt{s}; \vec{p}\,', \vec{p})\sqrt{\frac{m}{E_p}} \tag{3.12}$$

erhält man sofort folgende Gleichung

$$\bar{M}(P_0;\vec{p}\,',\vec{p}) = \bar{V}^{(2)}(P_0;\vec{p}\,',\vec{p}) + m \int d^3q \, \frac{\bar{V}^{(2)}(P_0;\vec{p}\,',\vec{q})\,\bar{M}(P_0;\vec{q},\vec{p})}{\vec{k}^2 - \vec{q}^{\,2} + i\epsilon}. \tag{3.13}$$

Dieses Ergebnis, das offensichtlich die Form einer nicht-relativistischen Lippmann-Schwinger-Gleichung aufweist, erlaubt es, Zweinukleonen-Übergangsamplituden im üblichen, nicht-relativistischen Integralgleichungs-Formalismus auszurechnen. Aus diesem Grunde behaupten auch die Konstrukteure des Bonn-Potentials, sie hätten ein relativistisches Potential so formuliert, daß es in üblicher, also nicht-relativistischer Weise behandelt werden kann[3].

Die Blankenbecler-Sugar-Reduzierung der Bethe-Salpeter-Gleichung ignoriert [14] allerdings offensichtlich die Retardierung der ausgetauschten Mesonen. In dieser Approximation hat der Mesonen-Propagator die Form [17]

$$\frac{-1}{(\vec{p}\,' - \vec{p})^2 + m_\alpha^2}, \tag{3.14}$$

während er in zeitgeordneter Störungstheorie durch [17]

$$\frac{1}{\omega_q \, (E_p - E_{p'} - \omega_q)} \tag{3.15}$$

gegeben ist, wobei

$$\omega_q = \sqrt{(\vec{p}\,' - \vec{p})^2 + m_\alpha^2}. \tag{3.16}$$

und m_α die entsprechende Mesonen-Ruhemasse ist.

Die Konstruktion des energieabhängigen Bonn-Potentials vollzieht sich auf einer ganz anderen Ebene. Hier wird auf originär feldtheoretische Weise[4] über Lagrangedichten, Störungstheorie, der Konstruktion einer S-Matrix (ohne explizite Konstruktion von Streuzuständen oder Angabe eines Zeitentwicklungsoperators) und des daraus reduzierten T-Operators folgende Gleichung

$$\begin{aligned} &\hat{T}(\hat{E}^{rel} + i0) = \hat{V}^{(2)}(\hat{E}^{rel}) + \hat{V}^{(2)}(\hat{E}^{rel})\,\hat{G}_0(\hat{E}^{rel} + i0)\,\hat{T}(\hat{E}^{rel} + i0) \\ \text{mit} \quad &\langle\, \vec{p}\,|\,\hat{G}_0(\hat{E}^{rel} + i0)\,|\,\vec{p}\,'\,\rangle = \frac{1}{\hat{E}^{rel} - 2\sqrt{m^2 + \vec{p}^{\,2}} + i0}\,\delta(\vec{p} - \vec{p}\,'). \end{aligned} \tag{3.17}$$

$$\hat{E}^{rel} = \begin{cases} 2\sqrt{m^2 + k^2} & : \; k = \sqrt{m\hat{E}}\ ,\ \hat{E} \geq 0 \\ 2m + \hat{E} & : \; \hat{E} < 0 \end{cases} \tag{3.18}$$

[3] Daß es Veröffentlichungen mit relativistischen Korrekturen dazu gibt, sei hier nur erwähnt.

[4] Dem Autor dieser Arbeit ist vollkommen klar, daß die Bethe-Salpeter-Gleichung, wie schon oben erwähnt, selbstverständlich feldtheoretischen Ursprungs ist, jedoch wird im Rahmen des energieabhängigen Bonn-Potentials mit anderen elementaren feldtheoretischen Methoden gearbeitet.

abgeleitet. Hier ist $\hat{E}$ die Relativ-Energie des Zweiteilchen-Subsystems. Die Gleichung ist offenbar von Lippmann-Schwinger-Typ, allerdings relativistisch verallgemeinert. Demnach wird jedem Zweinukleonen-Übergangsoperator bei jeder Energie eine relativistische $\hat{T}$-Matrix $\hat{T}(\hat{E}^{rel} + i0)$ zugeordnet, die wegen

$$\hat{E}^{rel} = \begin{cases} 2\sqrt{m^2 + \vec{k}^2} & : \ k = \sqrt{m\hat{E}}\ ,\ \hat{E} \geq 0 \\ 2m + \hat{E} & : \ \hat{E} < 0 \end{cases} \tag{3.19}$$

außerdem die nicht-relativistische Energie beinhaltet. Das gilt offensichtlich auch off-Shell. Selbstverständlich ist $V^{(2)}$ hier wieder eine feldtheoretische und letztlich auch nur numerisch angefittete Ein-Boson-Austausch-Approximation des vollen Mesonen-Austauschpotentials. Allerdings wird in diesem Rahmen die Energieabhängigkeit des Mesonen-Propagators korrekt berücksichtigt.

Um die Notation zu vereinfachen, soll hier für diese Arbeit folgendes vereinbart werden:

$$\begin{aligned} \hat{T}(\hat{E} + i0; \vec{p}\,', \vec{p}) &= \langle\, \vec{p}\,' \,|\, \hat{T}(\hat{E} + i0) \,|\, \vec{p}\,\rangle = \\ &\hat{V}(\hat{E}; \vec{p}\,', \vec{p}) + \sum_{L''} \int d^3q\, \frac{\hat{V}(\hat{E}; \vec{p}\,', \vec{q})\, \hat{T}(\hat{E} + i0; \vec{q}, \vec{p})}{\hat{E} + i0 - h(\vec{q})}, \end{aligned} \tag{3.20}$$

wobei

$$\begin{array}{lll} \hat{E} = \hat{E}_{nrel} & h_0(\vec{q}) = \frac{\vec{q}\,^2}{m} & \text{energieunabhängiges Bonn-Potential} \\ \hat{E} = \hat{E}^{rel} & h_0(\vec{q}) = 2\sqrt{m^2 + \vec{q}\,^2} & \text{energieabhängiges Bonn-Potential} \end{array} \tag{3.21}$$

die nicht-relativistischen bzw. relativistischen Zweinukleon-Energien sind; hier ist

$$\hat{E}_{nrel} = \begin{cases} \frac{\vec{k}^2}{m} & : \ k = \sqrt{m\hat{E}},\ \hat{E} \geq 0 \\ \hat{E} & : \ \hat{E} < 0. \end{cases} \tag{3.22}$$

Zusätzlich soll im folgenden stets $\vec{q}\,^2 = q^2$ gelten.

4 Die W-Matrix-Methode

Ziel dieses Kapitels ist es, die vollständig antisymmetrisierten AGS-Gleichungen im Rahmen des W-Matrix-Formalismus darzustellen. Dazu wird zuerst die W-Matrix vorgestellt, mit deren Hilfe das Zweinukleonen-Problem vollständig gelöst werden kann. Zudem ermöglicht sie eine Darstellung des Off-Shell-Übergangsoperators $\hat{T}(\mathrm{z})$, z=$\hat{\mathrm{E}}+i0$ durch maximal vier separable Terme und einen nicht-separablen Restterm. In allen Termen ist ein in weiten Bereichen frei zu wählender Parameter k enthalten. Es folgt eine quantenmechanisch korrekte Formulierung dieses Sachverhalts. Dann werden die AGS-Gleichungen mit der separablen W-Matrix-Approximation des $\hat{T}$-Operators, d.h. bei Vernachlässigung des Restterms, angegeben. Es folgt eine Diskussion der effektiven Potentiale in der W-Matrix-Darstellung. Zum Schluß werden zwei Verfahren vorgestellt, wie man den Parameter k festlegen muß, um optimale Ergebnisse bei Dreiteilchen-Rechnungen zu erhalten.

4.1 Die W-Matrix und die vollständige Lösung des Zweiteilchen-Problems

Um keine Mißverständnisse aufkommen zu lassen, sollen zuerst einige Bemerkungen über die Wahl der Einheiten und die gewählten Bezeichnungen gemacht werden. Alle Dreiteilchen-Rechnungen werden in sogenannt „natürlichen“ Einheiten durchgeführt. Das hat zur Folge, das die Zweiteilchen-Potentiale in der Drehimpulszerlegung die Dimension [f] haben und die Impulse in Einheiten von [f^{-1}] gegeben sind (siehe hierzu Anhang A.7). Andererseits liefern die Potential-Routinen sämtliche Bonn-Potentiale im Impulsraum in Einheiten von [MeV^{-2}]; Impulse und Energien haben die Dimension MeV. Die Zweiteilchen-Potentiale in natürlichen Einheiten gehen aus denen in Einheiten von MeV^{-2} durch Multiplikation mit $mc\hbar \approx 2 \cdot 10^5$ [MeV f] hervor. Da die Werte der Potentialfunktion in Einheiten von MeV numerisch sehr klein sind $\left(\left|\hat{V}_{L',L}(E;p',p)\right| \leq 10^{-5}\mathrm{MeV}^{-2}\right)$ hat diese Multiplikation stabilisierende Auswirkungen. Auch wenn es inkonsistent ist, werden bei der Beschreibung des Zweiteilchen-W-Matrix-Formalismus keine „natürlichen“ Einheiten verwendet, da dies beim energieabhängigen Bonn-Potential zu größeren Verständnisschwierigkeiten führen würde[5]. „Natürliche“ Einheiten werden erst wieder bei der Darstellung des Dreiteilchen-Formalismus verwendet.

Im folgenden ist m immer die Nukleonenmasse m=938.926 MeV, k [MeV] im Streuproblem der On-Shell-Relativimpuls und $\hat{E}$ die Relativenergie des Zweiteilchen-Subsystem ebenfalls in MeV; beide letztgenannten Größen beziehen sich also

[5]Es stimmt eben **nicht**, daß natürliche Einheiten durch $\hbar = m = c = 1$ charakterisiert werden können; das sieht manchmal nur so aus (siehe Anhang A.7).

auf das CM-System. Sämtliche Impulse und Energien sind in Einheiten von MeV gegeben. Demnach ist nicht-relativistisch für ein Zweinukleonen-System $\hat{E} = \frac{k^2}{m}$ und im relativistischen Fall ergibt sich $\hat{E} = 2\sqrt{m^2 + k^2}$ (zur Umrechnung in „natürliche" Einheiten siehe Anhang A.7). Alle im folgenden auftretenden Impulse sind solche im CM-System.

4.1.1 Die übliche Integralgleichungsformulierung des Zweiteilchen-Problems

Wie allgemein bekannt [24], wird das Zweiteilchen-Streuproblem beschrieben durch den $\hat{T}$-Operator, der die Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$\hat{T}(\hat{z}) = \hat{T}(\hat{z}) + \hat{V}(\hat{z})\,\hat{G}_0(\hat{z})\,\hat{T}(\hat{z}) \qquad \hat{G}_0(\hat{z}) = \frac{1}{\hat{z} - \hat{H}_0} \tag{4.23}$$

erfüllt. Hierbei ist $\hat{H}_0$ der Operator der kinetischen Energie des Systems. Physikalisch relevant sind hier allerdings nur solche $\hat{T}$-Operatoren $\hat{T}(\hat{E}$+i0), die durch den Limitierungsprozeß

$$\hat{T}(\hat{E} + i0) = \lim_{\epsilon \to 0+} \hat{T}(\hat{E} + i\epsilon) \tag{4.24}$$

aus den $\hat{T}(\hat{z})$ hervorgehen. Hierbei ist $\hat{E}$ die Energie des Zweiteilchen-Systems. Die Lösung der singulären Integralgleichung (4.23) liefert wegen

$$\mid \vec{p}\ \rangle^{(+)} = \mid \vec{p}\ \rangle + \hat{G}_0(\hat{z})\,\hat{T}(\hat{z}) \mid \vec{p}\ \rangle \tag{4.25}$$

sofort die Streuzustände im Impulsraum und die S-Matrix, mit deren Hilfe die Phasen, die Observablen des Streuprozesses, bestimmt werden. Der Vollständigkeit halber wird hier noch die Off-Shell-$\hat{T}$-Matrix-Gleichung in der LSJ-Basis im Impulsraum für ein realistisches Zweiteilchen-Potential

$$\hat{T}^{c_2}_{L'L}(\hat{z};p',p) = \hat{V}^{c_2}_{L'L}(\hat{E};p',p) + \sum_{L''} \int dq\, q^2\, \frac{\hat{V}^{c_2}_{L'L''}(\hat{E};p',q)\,\hat{T}^{c_2}_{L''L}(\hat{z};q,p)}{\hat{z} - h_0(q)} \tag{4.26}$$

angegeben, wobei hier und in der gesamten Arbeit

$$h_0(q) = \begin{cases} \frac{q^2}{m} & \text{für das energieunabhängige Bonn-Potential} \\ \\ 2\sqrt{m^2+q^2} & \text{für das energieabhängige Bonn-Potential} \end{cases} , \tag{4.27}$$

$\hat{z} = \hat{E}$+i0, $\hat{E}$ die Relativenergie des Zweiteilchen-Systems sind (also im CM- bzw. im Center-of-Momentum-System) und folgende Fallunterscheidung

$$\hat{E} = \begin{cases} \frac{k^2}{m} & \text{für das energieunabhängige Potential} \\ \\ 2\sqrt{m^2+k^2}, \quad k = \sqrt{m\hat{E}_{nrel}} & \text{für das energieabhängige Potential} \end{cases} \tag{4.28}$$

gilt. Im folgenden wird der Abkürzung halber $\hat{E}^{rel} := 2\sqrt{m^2 + k^2}, \quad k = \sqrt{m\hat{E}_{nrel}}$ im Streuproblem gesetzt.

Die Lippmann-Schwinger-Gleichung für das Zwei-Teilchen-Bindungsproblem

$$| \, n \, \rangle = \hat{G}_0(\hat{z}) \, \hat{V}(\hat{E}) \, | \, n \, \rangle \tag{4.29}$$

kann durch Einführung sogenannter Formfaktoren $| \, g_n(\hat{z}) \, \rangle = \hat{V}(\hat{E}) \, | \, n \, \rangle$ sofort in die Form

$$| \, g_n(\hat{z}) \, \rangle = \hat{V}(\hat{E}) \, \hat{G}_0(\hat{z}) \, | \, g_n(\hat{z}) \, \rangle \tag{4.30}$$

gebracht werden, die identisch mit der homogenen Gleichung des $\hat{T}$-Operators ist. Explizit ist in der LSJ-Basis für realistische Potentiale

$$g^{c_2}_{n,L}(p, \hat{E}) = \sum_{L'} \int dq' \, q^2 \, \frac{\hat{V}^{c_2}_{LL'}(\hat{E}; p, q) \, g^{c_2}_{n,L'}(q, \hat{E})}{\hat{E} - h_0(q)}, \tag{4.31}$$

wobei jetzt mit

$$\hat{E} = \begin{cases} \hat{E}_n & \text{Bindungszustand für das energieunabhängige Bonn-Potential} \\ \\ 2m + \hat{E}_n & \text{Bindungszustand für das energieabhängige Bonn-Potential} \end{cases} \tag{4.32}$$

zwischen nicht-relativistischer und relativistischer Bindungsenergie unterschieden werden muß. Im Falle des Bindungsproblems ist analog $\hat{E}^{rel} := \hat{E}^{rel}_n := 2m + \hat{E}_n$.

4.1.2 Das Zweiteilchen-Problem in der W-Matrix-Formulierung

Bekanntermaßen [25] läßt sich aus der Gleichung (4.26) für die Half-On-Shell-$\hat{T}$-Matrix des Streuproblems $\hat{T}_{L'L}(\hat{E}+i0; p, k), \; k = \sqrt{m\hat{E}_{nrel}}$, sofort die nicht-singuläre, für reelle Potentiale reelle Integralgleichung

$$\begin{aligned} W^{c_2}_{L'L}(\hat{E}; p, k) &= \hat{U}^{c_2}_{L'L}(\hat{E}; p, k) \, + \\ &\sum_{L''} \int dq \, q^2 \, \frac{\hat{U}^{c_2}_{L'L''}(\hat{E}; p, q) - \hat{U}^{c_2}_{L'L''}(\hat{E}; p, k)}{\hat{E} - h_0(q)} \, q^{2L''} \, W^{c_2}_{L''L}(\hat{E}; q, k) \end{aligned} \tag{4.33}$$

herleiten. Hier ist $\hat{E}$ wieder die CM-Energie des Zweiteilchensystems und

$$\hat{U}^{c_2}_{L'L}(\hat{E}; p, q) = \frac{\hat{V}^{c_2}_{L'L}(\hat{E}; p, q)}{p^{L'} q^L} \tag{4.34}$$

eine unsymmetrische Potentialfunktion, die für p $\rightarrow$ 0 und q $\rightarrow$ 0 nicht verschwindet, sondern es gilt [25]

$$\lim_{p \to 0} \lim_{q \to 0} \hat{U}^{c_2}_{L'L}(\hat{E}; p, q) = C_{L'L}(\hat{E}). \tag{4.35}$$

Da also $\hat{U}^{c_2}_{L'L}(\hat{E};p,q) \neq \hat{U}^{c_2}_{LL'}(\hat{E};q,p)$ ist, muß die W-Matrix ebenfalls nicht symmetrisch sein. Der Zusammenhang zwischen Half-On-Shell-$\hat{T}$- und W-Matrix ist dann gegeben durch [25, 27]

$$\hat{T}^{c_2}_{L'L}(\hat{E}+i0;p,k) = \sum_{L''} p^{L'}\, W^{c_2}_{L'L''}(\hat{E};p,k)\,(F^{c_2})^{-1}_{k;L''L}(E+i0)\,k^l, \tag{4.36}$$

wobei die Jost-Matrix $F^{c_2}_{k;L'L}(\hat{E}+i0)$ im W-Matrix-Formalismus folgendermaßen

$$F^{c_2}_{k;L'L}(\hat{E}+i0) = \delta_{L'L} \; - \int dq\, q^2\, q^{2L'}\, \frac{W^{c_2}_{L'L}(\hat{E};q,k)}{\hat{E}+i0-h_0(q)} \tag{4.37}$$

dargestellt und von den Streuenergien in den Bereich der Bindungsenergien fortgesetzt werden kann (d.h. für nicht-relativistische Bewegungsgleichungen von $\hat{E} \geq 0$ zu $\hat{E} < 0$ und für ein relativistische von $\hat{E} = 2\sqrt{m^2+k^2},\; k \geq 0$ hin zu $\hat{E} = 2m+\epsilon,\; -2m \leq \epsilon < 0$). Man kann sehr einfach zeigen [25], daß diese Gleichung, die ursprünglich nur für Zweiteilchen-Streuenergien unter der Bedingung $k = \sqrt{m\hat{E}_{nrel}}$ abgeleitet ist, auch im Bereich möglicher Bindungsenergien ihre Gültigkeit behält; allerdings ist in diesem Energiebereich k ≥ 0 reell, aber sonst beliebig. Bindungsenergien $\hat{E}_n$ lassen sich durch die Jost-Matrix charakterisieren; es gilt nämlich

$$\hat{E}^{c_2^D}_n \text{ ist Bindungszustand} \qquad \Leftrightarrow \qquad \det F^{c_2^D}_{k;L'L}(\hat{E}^{c_2^D}_n + i0) = 0. \tag{4.38}$$

Die zugehörigen Radialteile der normierten Bindungswellenfunktion sind dann durch

$$\Psi^{c_2^D}_{n,L}(p) = p^L\, \frac{1}{\hat{E}^{c_2^D}_n - h_0(p)} \sum_{L'} W^{c_2^D}_{k;LL'}(\hat{E}^{c_2^D}_n;p,k)\, C^{c_2^D}_{n,L'} \tag{4.39}$$

gegeben, wobei die Koeffizienten $C^{c_2^D}_{n,L'}$ durch die Bedingung

$$\sum_{L'} F^{c_2^D}_{LL'}(\hat{E}^{c_2^D}_n + i0)\, C^{c_2^D}_{n,L'} = 0 \tag{4.40}$$

und durch die Normierung der Wellenfunktion [25, 26]

$$\sum_L \int dp\, p^2 \left\{ \left| \Psi^{c_2^D}_{n,L}(p) \right|^2 - \sum_{L'} \int dq\, q^2\, \Psi^{c_2^D\,*}_{n,L}(p) \frac{\partial \hat{V}^{c_2^D}_{LL'}(\hat{E}^{c_2^D}_n;p,q)}{\partial \hat{E}}\, \Psi^{c_2^D}_{n,L'}(q) \right\} = 1 \tag{4.41}$$

vollständig bestimmt werden. Mit anderen Worten: im W-Matrix-Formalismus löst derselbe Algorithmus sowohl das Streu- als auch das Bindungsproblem. Da die W-Matrix-Gleichung nicht-singulär ist, enthält offenbar die inverse Jost-Matrix die gesamte singuläre Struktur der Zweiteilchen-$\hat{T}$-Matrix, nämlich die Pole an den Bindungsenergien und den Schnitt an den Streuenergien. Demnach sind in ihr praktisch alle wesentlichen Informationen über das Zweiteilchen-Problem enthalten.

Es bleibt noch anzumerken, daß es selbstverständlich auch Off-Shell-W-Matrizen $\hat{W}_{k;L'L}(\hat{E};p',p)$ gibt [25], die durch die Gleichung

$$W^{c_2}_{k;L'L}(\hat{E};p',p) = \hat{U}^{c_2}_{L'L}(\hat{E};p',p) + \sum_{L''} \int dq\, q^2 \, \frac{\hat{U}^{c_2}_{L'L''}(\hat{E};p,q) - \hat{U}^{c_2}_{L'L''}(\hat{E};p,k)}{\hat{E} - h_0(q)} \, q^{2L''} \, W^{c_2}_{k;L''L}(\hat{E};q,p) \quad (4.42)$$

bestimmt werden. Hier, wie bei der Jost-Matrix, ist die explizite Notation des Parameters k offenbar notwendig. Die Off-Shell-W-Matrizen spielen im Rahmen dieser Arbeit nur eine sehr untergeordnete Rolle.

Da Gleichung (4.33) für nicht-relativistische und relativistische Integralgleichungen marginal verschieden ist, werden sie hier der Vollständigkeit halber explizit angegeben:

Nicht-relativistische Integralgleichung(z.B. Potential Bonn-B)

$$W^{c_2}_{L'L}(\hat{E};p,k) = \hat{U}^{c_2}_{L'L}(\hat{E};p,k) + \sum_{L''} \int dq\, q^2 \, \frac{\hat{U}^{c_2}_{L'L''}(\hat{E};p,q) - \hat{U}^{c_2}_{L'L''}(\hat{E};p,k)}{\hat{E} - \frac{q^2}{m}} \, q^{2L''} \, W^{c_2}_{L''L}(\hat{E};q,k) \quad (4.43)$$

wobei

$$k = \begin{cases} \sqrt{m\hat{E}}, & \hat{E} \geq 0 \\ \text{beliebig} & \hat{E} < 0 \end{cases} \quad (4.44)$$

Relativistische verallgemeinerte Integralgleichung (z.B. Potential OBEPT)

$$W^{c_2}_{L'L}(\hat{E}^{rel};p,k) = \hat{U}^{c_2}_{L'L}(\hat{E}^{rel};p,k) + \sum_{L''} \int dq\, q^2 \, \frac{\hat{U}^{c_2}_{L'L''}(\hat{E}^{rel};p,q) - \hat{U}^{c_2}_{L'L''}(\hat{E}^{rel};p,k)}{\hat{E}^{rel} - 2\sqrt{m^2+q^2}} \, q^{2L''} \, W^{c_2}_{L''L}(\hat{E}^{rel};q,k) \quad (4.45)$$

wobei

$$k = \begin{cases} \sqrt{mE_{nrel}}, & \hat{E}^{rel} = 2\sqrt{m^2+k^2} \geq 2m \\ \text{beliebig}, & \hat{E}^{rel} = 2m + \hat{E}_n, \ -2m \leq \hat{E}_n < 0 \end{cases} \quad (4.46)$$

4.2 Die separable Approximation der Off-Shell-$\hat{\mathbf{T}}$-Matrix im W-Matrix-Formalismus

Die wirkliche Bedeutung der W-Matrix für Mehrteilchen-Rechnungen (d.h. drei und mehr Teilchen) wird erst deutlich, wenn man berücksichtigt, daß sie eine Zerlegung der Off-Shell-$\hat{T}$-Matrix in einen separablen Anteil ${}^{sep}\hat{T}$ aus höchstens vier Summanden und einen Restterm liefert [25]. Bekanntlich läßt sich die $\hat{T}$-Matrix folgendermaßen

$$\hat{T}^{c_2}_{L'L}(\hat{E}+i0;p',p) = p^{L'}\left[\sum_{\hat{L},\hat{L}'} W^{c_2}_{L'\hat{L}'}(\hat{E};p',k)\,\Delta^{c_2}_{k;\hat{L}'\hat{L}}(\hat{E}+i0)\,{}^{\dagger}W^{c_2}_{\hat{L}L}(\hat{E};k,p) + \right.$$
$$\left.\left(W^{c_2}_{k;L'L}(\hat{E};p',p) - \sum_{\hat{L},\hat{L}'} W^{c_2}_{L'\hat{L}'}(\hat{E};p',k)\,(W^{c_2})^{-1}_{\hat{L}'\hat{L}}(\hat{E};k,k)W^{c_2}_{\hat{L}L}(\hat{E};k,p)\right)\right] p^L$$
$$= {}^{sep}\hat{T}^{c_2}_{L'L}(\hat{E}+i0;p',p,k) \;+\; \hat{R}^{c_2}_{L'L}(\hat{E};p',p,k) \tag{4.47}$$

schreiben. Hier ist der sogenannte Propagator $\Delta^{c_2}_{k;L'L}(\hat{E}+i0)$ durch

$$\Delta^{c_2}_{k;L'L}(\hat{E}+i0) = \sum_{\hat{L}} (F^{c_2})^{-1}_{k;L'\hat{L}}(\hat{E}+i0)\;({}^{\dagger}W^{c_2})^{-1}_{\hat{L}L}(\hat{E};k,k) \tag{4.48}$$

gegeben. Er hat die Form einer hermiteschen 2×2-Matrix, kann also diagonalisiert werden, so daß ${}^{sep}\hat{T}$ letztlich aus zwei Summanden besteht. Der mit runden Klammern gekennzeichnete Term in (4.47) beinhaltet nur Half-On-Shell- oder On-Shell-W-Matrizen, ist also reell und außerdem nicht-singulär[6]. Demnach enthält der separable Term

$${}^{sep}\hat{T}^{c_2}_{L'L}(\hat{E}+i0;p',p) = p^{L'}\sum_{\hat{L},\hat{L}'} W^{c_2}_{L'\hat{L}'}(\hat{E};p',k)\,\Delta^{c_2}_{k;\hat{L}'\hat{L}}(\hat{E}+i0)\,{}^{\dagger}W^{c_2}_{\hat{L}L}(\hat{E};k,p)\,p^L \tag{4.49}$$

den gesamten Imaginärteil der $\hat{T}$-Operators, sein vollständiges Residuum und wegen des Auftretens der inversen verallgemeinerten Jost-Funktion alle Informationen über den Pol bei der Bindungsenergie und den Schnitt in den Streuenergien und damit alle physikalisch relevanten Strukturen. Insbesondere ist die Approximation der exakten $\hat{T}$-Matrix durch die separablen Anteile half-on-Shell exakt

$$\hat{R}^{c_2}_{L'L}(\hat{E};k,p,k) = \hat{R}^{c_2}_{L'L}(\hat{E};p,k,k) = 0. \tag{4.50}$$

Diese optimal erscheinende separable Approximation der Off-Shell-$\hat{T}$-Matrix macht in einer Hinsicht Probleme: ${}^{sep}\hat{T}$ ist in jedem Zweiteilchen-Kanal c_2 im Bindungsenergiebereich $\hat{E}<0$ bzw. $0\leq\hat{E}=2m+\epsilon<2m,\ \epsilon<0$ von einem völlig freien

[6] Nullstellen der On-Shell-W-Matrix treten gleichermaßen im separablen wie im nicht-separablen Ausdruck auf und haben keinen Einfluß auf die Off-Shell-T-Matrix.

Parameter k abhängig. Die Erfahrung zeigt, daß die Berechnung von Dreiteilchen-Observablen sensibel auf Variationen des k-Verlaufs reagieren. Insbesondere gibt es kein beweisbares a-priori-Kriterium, welche Werte k als Funktion k=k($\hat{E}$,p,q,c_2) durchlaufen muß, damit überall $\hat{T}_{L'L}(\hat{E}$+i0;p,q) $\approx$ ${}^{sep}\hat{T}_{L'L}(\hat{E}$+i0;p,q) gilt und der Restterm vernachlässigbar ist. Auf dem Zweiteilchen-Niveau ist es wegen der drei unabhängigen Variablen $\hat{E}$,p,q praktisch unmöglich, numerisch durch einen Fit den optimalen k-Verlauf zu bestimmen. Das in dieser Arbeit verwendete Kriterium (siehe Abschnitt 4.6) greift auf die Hilbert-Schmidt-Norm des Kerns der Dreiteilchen-Integralgleichung zurück, was letztlich zu einer Abhängigkeit des k-Verlaufs von der Dreiteilchen-Energie führt; ein Sachverhalt, der bedingt, daß bei jeder Dreiteilchenenergie erst ein neuer k-Verlauf bestimmt werden muß, bevor die eigentlichen Rechnungen gestartet werden können. Trotz dieser Unzulänglichkeit und anderer Mißstände (siehe 4.6) ergaben sich bei Verwendung dieses Kriteriums die besten Resultate.

Sowohl in den separablen Term als auch in den Restterm der Darstellung der vollen Off-Shell-$\hat{T}$-Matrix durch W-Matrizen geht die inverse On-Shell-W-Matrix ein. Sie ist wegen (4.36) direkt proportional der inversen On-Shell-$\hat{T}$-Matrix. Da die verallgemeinerte Jost-Matrix, von Bindungszuständen abgesehen, stets endlich ist, ist die On-Shell-W-Matrix genau dann nicht invertierbar, wenn die On-Shell-$\hat{T}$-Matrix nicht invertierbar ist. In diesem Fall versagt offenbar die W-Matrix-Methode, da sowohl $\hat{T}^{sep}$ wie $\hat{R}$ singulär werden. Dieses pathologische Verhalten kann für nichtrelativistische negative Zweiteilchen-Energien ϵ durch Veränderung des k-Verlaufs beseitigt werden. Im Bereich möglicher Steuenergien ist dies wegen k=$\sqrt{m\hat{E}^{rel}} \geq 0$ bzw. k=$\sqrt{m\hat{E}_{nrel}} \geq 0$ nicht möglich. Hier ist ein Verfahren entwickelt worden [53], welches letztlich durch Projektion der W-Matrix-Darstellung der Off-Shell-$\hat{T}$-Matrix auf Sturmsche Funktionen und geeignete Umordnung dieser Reihenentwicklung die Nullstellen der On-Shell-$\hat{T}$-Matrix zu umgehen scheint. Wegen des zusätzlichen großen numerischen Aufwands (es werden nach Angaben in [53] zwanzig bis vierzig Sturmsche Funktionen im Impulsraum benötigt) ist auf die Anwendung dieses Verfahrens hier verzichtet worden.

4.3 Kanalzustände und Formfaktoren im W-Matrix-Formalismus

Um offensichtlich zu machen, daß (4.49) wirklich eine separable Approximation der $\hat{T}$-Matrix ist, werden geeignete W-Matrix-Formfaktoren eingeführt. Damit deutlich wird, daß es sich dabei um wohldefinierte Hilbertraumzustände handelt, wird das Verfahren kurz anhand des $\hat{T}$-Operators erläutert.

Bekanntlich läßt sich das Bild eines Half-on-Shell-Zustandes unter dem Zweiteilchen-Übergangsoperator $\hat{T}$ in der LSJ-T-Basis (jedenfalls für ladungsunabhängige Potentiale) folgendermaßen

$$\begin{aligned}\hat{T}(\hat{z})k, L, c_2, M_J, M_T = &\sum_{c_2', L', M_{J'}, M_{T'}} \int dp\, p^2 \, | p, L', c_2', M_{J'}, M_{T'} \rangle \\ &\langle M_{T'}, M_{J'}, c_2', L', p \,|\, \hat{T}(\hat{z}) \,|\, k, L, c_2, M_J, M_T \rangle \\ &= \sum_{L'} \int dp\, p^2 \, | p, L', c_2, M_J, M_T \rangle \hat{T}^{c_2}_{L'L}(\hat{z}; p, k)\end{aligned} \tag{4.51}$$

darstellen; die Zustände

$$| L, c_2, M_J, M_T \rangle_{\hat{T}(\hat{z}),k} := \sum_{L'} \int dp\, p^2 \, | p, L', c_2, M_J, M_T \rangle \, \hat{T}^{c_2}_{L'L}(\hat{z}; p, k) \tag{4.52}$$

sind also wohldefiniert. Dann ist offenbar

$$\langle M_{T'}, M_{J'}, c_2', L'', p' \,|\, L, c_2, M_J, M_T \rangle_{\hat{T}(\hat{z}),k} = \hat{T}^{c_2}_{L''L}(\hat{z}; p', k)\, \delta_{c_2' c_2}\, \delta_{M_{J'} M_J} \delta_{M_{T'} M_T} \tag{4.53}$$

Bildet man ganz analog Zweiteilchen-W-Matrix-Formfaktoren[7].

$$| L, c_2, M_J, M_T \rangle_{W(\hat{E}),k} := \sum_{L'} \int dp\, p^2 \, | p, L', c_2, M_J, M_T \rangle \, p^{L'} \, W^{c_2}_{L'L}(\hat{E}; p, k) \tag{4.54}$$

bzw.

$${}_{k,\dagger W(\hat{E})}\langle M_T, M_J, c_2, L | := \sum_{L'} \int dp\, p^2 \; {}^{\dagger}W^{c_2}_{LL'}(\hat{E}, k, p)\, p^{L'} \langle M_T, M_J, c_2, L', p | \tag{4.55}$$

so ergibt sich

$$\begin{aligned}&\langle M_{T'}, M_{J'}, c_2', L'', q \,|\, L, c_2, M_J, M_T \rangle_{W(E),k} = \\ &\quad q^{L''} W^{c_2}_{L''L}(\hat{E}; q, k)\, \delta_{c_2' c_2}\, \delta_{M_{J'} M_J} \delta_{M_{T'} M_T}\end{aligned} \tag{4.56}$$

und

$$\begin{aligned}&{}_{k,\dagger W(\hat{E})}\langle M_T, M_J, c_2, L \,|\, q, L'', c_2', M_{J'} M_{T'} \rangle \\ &\quad = {}^{\dagger}W^{c_2}_{LL''}(\hat{E}; k, q)\, q^{L''}\, \delta_{c_2 c'}\, \delta_{M_J M_{J'}} \delta_{M_T M_{T'}} \\ &\quad = q^{L''}\, W^{c_2}_{L''L}(\hat{E}; q, k)\, \delta_{c_2 c'}\, \delta_{M_J M_{J'}} \delta_{M_T M_{T'}}\end{aligned} \tag{4.57}$$

Hier muß daran erinnert werden, daß selbstverständlich ${}^{\dagger}W \neq W$. Mit diesen Größen wird sofort deutlich werden, daß (4.49) ein separabler Ausdruck ist.

[7] Diese Bezeichnung hat sich eingebürgert, sie steht in keinerlei Zusammenhang zu experimentell meßbaren Formfaktoren und kennzeichnet nur einen wohldefinierten Hilbertraum-Zustand.

Zuerst jedoch wird (4.49) aus numerischen Gründen in die Form

$$
{}^{sep}\hat{T}^{c_2}_{L'L}(\hat{E}+i0;p',p) = p^{L'} \sum_{\hat{L},\hat{L}'} \widetilde{W}^{c_2}_{L'\hat{L}'}(\hat{E};p',k)\,\widetilde{\Delta}^{c_2}_{k;\hat{L}'\hat{L}}(\hat{E}+i0)\,{}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L}L}(\hat{E};k,p)\,p^{L} \tag{4.58}
$$

gebracht; dabei ist

$$
\widetilde{\Delta}^{c_2^D}_{k;L'L}(\hat{E}+i0) = C^{c_2^D\;-1}_{n,L'}\;\Delta^{c_2^D}_{k;L'L}(\hat{E}+i0)\,C^{c_2^D\;-1}_{n,L} \tag{4.59}
$$

ein normierter Propagator in den Kanälen eines Zweiteilchen-Bindungszustandes, ansonsten ist $\mathrm{C}^{c_2}_{n,L}=1$.

$$
\widetilde{W}^{c_2}_{L'L} = W^{c_2}_{L'L}\,C^{c_2^D}_{n,L} \tag{4.60}
$$

sind normierte W-Matrizen. Es läßt sich sehr einfach für alle Potentiale, die in der Impulsraumdarstellung durch

$$
\hat{V}^{c_2}_{L'L}(\hat{E};p',p) \tag{4.61}
$$

gegeben sind, zeigen, daß das Residuum des normierten Propagators genau 1 ist (siehe Anhang A.6). Dann erhält man durch Einsetzen der W-Matrix-Formfaktoren sofort folgenden Ausdruck

$$
\begin{aligned}
&{}^{sep}\hat{T}^{c_2}_{L'L}(\hat{E}+i0;p',p)\\
&\quad= \langle\, M_T, M_J, c_2, L', p' \,|\, {}^{sep}\hat{T}(\hat{E}+i0) \,|\, p, L, c_2, M_J, M_T \,\rangle\\
&\quad= \sum_{\hat{L},\hat{L}',c_2',M_{J'},M_{T'}} \langle\, M_T, M_J, c_2, L', p' \,|\, \hat{L}', c_2', M_{J'}, M_{T'} \,\rangle_{\widetilde{W}(\hat{E}),k}\\
&\quad\widetilde{\Delta}^{c_2'}_{k;\hat{L}'\hat{L}}(\hat{E}+i0)\;{}_{k,\dagger\widetilde{W}(\hat{E})}\langle\, M_{T'}, M_{J'}, c_2', \hat{L} \,|\, p, L, c_2, M_J, M_T \,\rangle,
\end{aligned} \tag{4.62}
$$

der, als Operator geschrieben, die gewünschte Form

$$
{}^{sep}\mathbf{\hat{T}}(\mathbf{\hat{E}}+\mathbf{i0}) =
$$

$$
\sum_{\hat{L},\hat{L}',c_2,M_J,M_T} \left|\mathbf{\hat{L}}', \mathbf{c_2}, \mathbf{M_J}, \mathbf{M_T}\,\right\rangle_{\widetilde{\mathbf{W}}(\mathbf{\hat{E}}),\mathbf{k}}\;\widetilde{\boldsymbol{\Delta}}^{\mathbf{c_2}}_{\mathbf{k};\mathbf{\hat{L}}'\mathbf{\hat{L}}}(\mathbf{\hat{E}}+\mathbf{i0})\;{}_{\mathbf{k},\dagger\widetilde{\mathbf{W}}(\mathbf{\hat{E}})}\left\langle \mathbf{M_T}, \mathbf{M_J}, \mathbf{c_2}, \mathbf{\hat{L}}\right| \tag{4.63}
$$

aufweist. Die Radialteile der Bindungswellenfunktion (4.39) lassen sich mit Hilfe der Formfaktoren (4.54) und (4.55) sehr einfach durch

$$
\Psi^{c_2^D}_{L'}(p) = \sum_{L} \langle\, M_T, M_J, c_2^D, L', p \,|\, \hat{G}_0\left(\hat{E}^{c_2^D}\right) |\, L, c_2^D, M_J, M_T \,\rangle_{\widetilde{W}\left(\hat{E}^{c_2^D}\right),k}, \tag{4.64}
$$

bzw.

$$
\Psi^{c_2^D}_{L'}(p) = \sum_{L} {}_{k,\dagger\widetilde{W}\left(\hat{E}^{C_2^D}\right)}\langle\, M_T, M_J, c_2^D, L \,|\, \hat{G}_0\left(\hat{E}^{c_2^D}\right) |\, p, L', c_2^D, M_J, M_T \,\rangle \tag{4.65}
$$

darstellen, so daß sich für den Bindungszustand $\left|\, \Psi, c_2^D, M_J, M_T \right\rangle$

$$\begin{aligned} \left|\, \Psi, c_2^D, M_J, M_T \right\rangle &= \sum_L \hat{G}_0\left(\hat{E}^{c_2^D}\right) \left| L, c_2^D, M_J, M_T \right\rangle_{\widetilde{W}\left(\hat{E}^{c_2^D}\right),k} \\ &= \sum_L {}_{k,\dagger\widetilde{W}\left(\hat{E}^{c_2^D}\right)}\left\langle M_T, M_J, c_2^D, L \right| \hat{G}_0\left(\hat{E}^{c_2^D}\right) \end{aligned} \tag{4.66}$$

und für den vollständig antisymmetrisierten Bindungszustand in der Impulsdarstellung

$$\begin{aligned} &\langle\, M_T, M_S, \vec{p} \,|\, \Psi, M_J, M_T \,\rangle = \\ &\quad \sum_{L,L'} \langle\, M_T, M_J, c_2^D, L', p \,|\, \hat{G}_0\left(E^{c_2^D}\right) |\, L, c_2^D, M_J, M_T \,\rangle_{\widetilde{W}(\hat{E}),k} \\ &\quad \sum_{M_{L'}} \langle\, M_J J \,|\, L' M_{L'}, S M_S \,\rangle\, Y_{L',M_{L'}}(\hat{p}) \end{aligned} \tag{4.67}$$

ergibt. Hierbei ist c_2^D gegeben durch (S=1,J=1,T=0).

Um den separablen Anteil ${}^{sep}\mathrm{T}_\gamma$ des Übergangsoperators T_γ im Dreiteilchen-Raum $\mathcal{H}_\gamma$ darstellen zu können, werden Dreiteilchen-W-Matrix-Formfaktoren mittels Drehimpulskopplung durch

$$|\; q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \;\rangle_{\widetilde{W}(\hat{E}),k;\gamma} \tag{4.68}$$

und

$${}_{\gamma;k,\dagger\widetilde{W}(\hat{E})}\langle\; M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3, L, q \;|$$

mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} &{}_\gamma\langle\, M_{I'} I', M_{\Gamma'} \Gamma', c_3', p, q' \,|\, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \;\rangle_{\widetilde{W}(\hat{E}),k;\gamma} = \\ &\qquad p^{L'}\, \widetilde{W}^{c_2}_{L'L}(\hat{E}; p, k)\, \frac{\delta(q'-q)}{q^2}\, \delta_{M_{I'} M_I}\, \delta_{I'I}\, \delta_{M_{\Gamma'} M_\Gamma}\, \delta_{c_3' c_3} \end{aligned} \tag{4.69}$$

und

$$\begin{aligned} &{}_{\gamma;k,\dagger\widetilde{W}(\hat{E})}\langle\; M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3, L, q \;|\, q', p, L', c_3', \Gamma' M_{\Gamma'}, I' M_{I'} \,\rangle = \\ &\qquad {}^\dagger\widetilde{W}^{c_2}_{LL'}(\hat{E}; k, p)\, p^{L'}\, \frac{\delta(q'-q)}{q^2}\, \delta_{M_I M_{I'}}\, \delta_{II'}\, \delta_{M_\Gamma M_{\Gamma'}}\, \delta_{c_3 c_3'} \end{aligned} \tag{4.70}$$

konstruiert, so daß

$$\begin{aligned} {}^{sep}T_\gamma(E+i0) = &\sum_{\hat{L},\hat{L}',c_2,k,\ell,\Gamma,M_\Gamma,I,M_I} \left|\; q, \hat{L}', c_2, k, \ell, \Gamma M_\Gamma, I M_I \;\right\rangle_{\widetilde{W}(\hat{E}),k;\gamma} \\ &\widetilde{\Delta}^{c_2}_{k;\hat{L}',\hat{L}}\left(E - \frac{q^2}{2M} + i0\right)\; {}_{\gamma;k,\dagger\widetilde{W}(\hat{E})}\left\langle\; M_I I, M_\Gamma \Gamma, \ell, k, c_2, \hat{L}, q \;\right| \end{aligned} \tag{4.71}$$

ist, wobei $\hat{E} = E - \frac{q^2}{2M}$ die Energie des Subsystems und E die Energie des Dreinukleonen-Systems ist.

Die Kanalzustände haben die Form

$$\begin{aligned} &\left| \, q, c_2^D, k, \ell, \Gamma M_\Gamma, I M_I \, \right\rangle_\gamma = \\ &\qquad \sum_L G_0 \, (E + i0) \left| \, q, L, c_2^D, k, \ell, \Gamma M_\Gamma, I M_I \right\rangle_{\widetilde{W}(\hat{E}^{c_2^D}), k; \gamma} \end{aligned} \tag{4.72}$$

bzw.

$$\begin{aligned} &{}_\gamma\left\langle \, M_I I, M_\Gamma \Gamma, k, \ell, c_2^D, q \, \right| = \\ &\qquad \sum_L {}_{\gamma; k, \dagger \widetilde{W}(\hat{E}^{c_2^D})}\left\langle \, M_I I, M_\Gamma \Gamma, k, \ell, c_2^D, L, q \right| G_0 \, (E + i0) \, . \end{aligned} \tag{4.73}$$

Hier ist die Quantenzahl n nicht mehr notiert, da es im nuklearen Zweiteilchen-Problem nur einen Bindungszustand gibt.

Auf einen Umstand muß hier noch hingewiesen werden: Gleichung (2.107) stellt einen Zusammenhang zwischen Kanalzuständen und Formfaktoren her, der notwendig erfüllt sein muß, damit die Bestimmungsgrößen der Integralgleichungen, die ${}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})_{c_2' c_2; k'k, \ell'\ell; L'L}(E + i0; q', q)$, in der separablen Näherung identisch mit den Matrixelementen des Übergangsoperators in der Kanalzustandsbasis sind. Im W-Matrix-Formalismus lautet diese Bedingung

$$\begin{aligned} &|\, q, L, c_2, k, \ell, \Gamma M_\Gamma, I M_I \rangle_\gamma = \\ &\qquad \sum_L G_0 \, (E + i0) \left| q, L, c_2^D, k, \ell, \Gamma M_\Gamma, I M_I \right\rangle_{\widetilde{W}(\hat{E}^{c_2^D}), k; \gamma} \end{aligned} \tag{4.74}$$

E ist hier die Energie des Dreiteilchen-Systems und kann natürlich in der Form E=$\hat{E}^{c_2^D} + \frac{q^2}{2M}$ geschrieben werden. D.h. aber, daß die Dreiteilchen-W-Matrix-Formfaktoren (4.68) in den Kanälen, in denen das Deuteron existiert, genau in der durch (2.107) geforderten Relation zu den Kanalzuständen stehen. Dieses Ergebnis unterstreicht erneut die Qualität der W-Matrix-Methode: die Vernachlässigung des Restterms in (4.47) ist die einzig auftretende Näherung.

4.4 Die AGS-Gleichungen im W-Matrix-Formalismus

Die für den Neutron-Deuteron-Streuprozeß relevanten Off-Shell-Übergangsamplituden sind diejenigen, bei denen im Eingangs- und im Ausgangskanal ein Neutron-Deuteron-Paar vorhanden sein muß. Demnach sind sie durch

$$\begin{aligned} &{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})^{c_2^D c_2^D; k'k; \ell'\ell}_{L'L}(z; q', q) = \\ &{}_{\gamma; k, \dagger \widetilde{W}(\hat{E}')}\langle \, M_I I, M_\Gamma \Gamma, k', \ell', c_2^D, L', q' \, | \, G_0 \mathcal{AU} G_0 \, | \, q, L, c_2^D, k, \ell, \Gamma M_\Gamma, I M_I \, \rangle_{\widetilde{W}(\hat{E}), k; \gamma} \end{aligned} \tag{4.75}$$

gegeben, hierbei ist $G_0 \mathcal{AU} G_0 = G_0(z)\,(\mathcal{AU})(z)\,G_0(z)$, z=E+i0 und

$$(\mathcal{AU})(z)\,G_0(z)\Big|\ q, L, c_2^D, k, \ell, \Gamma M_\Gamma, I M_I\rangle_{\widetilde{W}(\hat{E}),k;\gamma} \tag{4.76}$$

genau die W-Matrix-Darstellung des total-antisymmetrischen Formfaktors (2.110) aus $\mathcal{H}\gamma$. Hier muß darauf hingewiesen werden, daß genaugenommen erst die Summe

$$\sum_{L',L} {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})_{L',L}^{c_2^D c_2^D;k'k;\ell'\ell}(z;q',q) \tag{4.77}$$

die korrekten Übergangsamplituden liefert, weil die Kanalzustände die Form (4.72) und (4.73) haben. Diese Summation kann nach Lösung des Integralgleichungssystems vorgenommen werden. Mit dem effektiven Potential

$$\begin{aligned} &{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})_{L'L}^{c_2^D c_2;k'k,\ell'\ell}(z;q',q) = \sum_{\beta\neq\alpha} \\ &{}_{\beta;k,\dagger\widetilde{W}(\hat{E}')}\langle M_I I, M_\Gamma\Gamma, k', \ell', c_2^D, L', q'\,|\,G_0(z)\,|\ \ q, L, c_2, k, \ell, \Gamma M_\Gamma, I M_I\ \rangle_{\widetilde{W}(\hat{E}),k;\alpha}. \end{aligned} \tag{4.78}$$

erhält man offenbar sofort die W-Matrix-Formulierung von (2.114)

$$\begin{aligned} {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})_{L'L}^{c_2^D c_2^D;k'k;\ell'\ell}(E+i0;q',q) &= {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})_{L'L}^{c_2^D c_2^D;k'k;\ell'\ell}(E+i0;q',q)\ + \\ &\sum_{c_2' k'',\ell'',L'',L'''} \int dq''\,q''^2\ {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})_{L'L''}^{c_2^D c_2';k'k'',\ell'\ell''}(E+i0;q',q'') \\ &\widetilde{\Delta}_{k;L''L'''}^{c_2'}(E-\frac{3q''^2}{4}+i0)^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})_{L'''L}^{c_2' c_2^D;k''k;\ell''\ell}(E+i0;q'',q) \end{aligned} \tag{4.79}$$

an; hier ist berücksichtigt worden, daß M=$\frac{2}{3}$ (siehe Abschnitt 2.1).

Andererseits werden offenbar noch sehr viel mehr Übergangsamplituden durch die AGS-Gleichungen festgelegt, nämlich wenn die Beschränkung, daß im Eingangs- und Ausgangskanal stets ein Neutron-Deuteron-Paar vorhanden sein soll, fallengelassen wird. Diese Amplituden[8]

$$\begin{aligned} &{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})_{L'L}^{c_3' c_3}(z;q',q) = \\ &{}_{\gamma;k,\dagger\widetilde{W}(\hat{E})}\langle M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3', L', q'\,|\,(G_0\mathcal{AU}G_0)\,(z)\,|\ \ q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I\rangle_{\widetilde{W}(\hat{E}),k;\gamma} \end{aligned} \tag{4.80}$$

beschreiben eine Vielzahl von physikalischen Prozessen und werden durch das Integralgleichungssystem

$$\begin{aligned} &{}^{\Gamma,I}(\boldsymbol{\mathcal{AT}})_{L'L}^{c_3' c_3}(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{i}\mathbf{o};\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}) = {}^{\Gamma,I}(\boldsymbol{\mathcal{AV}})_{L'L}^{c_3' c_3}(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{i}\mathbf{o};\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}) + \\ &\sum_{c_3'',L'',L'''} \int \boldsymbol{dq''}\,\boldsymbol{q''^2}\ {}^{\Gamma,I}(\boldsymbol{\mathcal{AV}})_{L'L''}^{c_3' c_3''}(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{i}\mathbf{o};\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}'')\ \widetilde{\boldsymbol{\Delta}}_{k;L''L'''}^{c_3''}(\boldsymbol{E}-\frac{\mathbf{3}\boldsymbol{q''^2}}{\mathbf{4}}+\boldsymbol{i}\mathbf{o}) \\ &{}^{\Gamma,I}(\boldsymbol{\mathcal{AT}})_{L'''L}^{c_3'' c_3}(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{i}\mathbf{o};\boldsymbol{q}'',\boldsymbol{q}) \end{aligned} \tag{4.81}$$

[8]Zur besseren Übersicht ist hier $c_3 = (c_2,\mathrm{k},\ell)$ gesetzt; es bleibt festzuhalten, daß gegebenenfalls tatsächlich über jede einzelne dieser Größen summiert werden muß.

bestimmt. Allerdings muß dann noch im Detail überprüft werden, ob eine zu (4.74) analoge Beziehung zwischen den Formfaktoren und den Zuständen, die die einzelnen Amplituden festlegen, erfüllt wird.

Es muß hier angefügt werden, daß diese Intregral-Gleichungen streng nur unter Voraussetzung des nicht-relativistischen Dreiteilchen-Hamilton-Operators (2.8) abgeleitet werden können und also so nur für die energieunabhängige Version des Bonn-Potentials gelten. Bei bestimmten Annahmen an einen effektiven „relativistischen“ Hamilton-Operator, wie ihn die energieabhängige Version offenbar fordert, (siehe hierzu Abschnitt 4.5.2) bleiben sie jedoch forminvariant; allerdings verändern sich die Werte der enthaltenden Parameter. So wird E zur relativistischen Dreiteilchenenergie und E-$\frac{3q^2}{4}$ muß durch die relativistische Zweiteilchen-Energie ersetzt werden. Außerdem ändert sich die funktionale Form des effektiven Potentials (siehe Abschnitt 4.5.2). Aus Gründen, die später deutlich werden, wird auf die explizite Angabe dieser Gleichungen verzichtet. Das gilt auch für den nächsten Abschnitt.

4.4.1 Das Bindungsproblem im W-Matrix-Formalismus

Nach allem, was in Abschnitt 2.5 angeführt wurde, ist es offensichtlich, daß zur Bestimmung der Formfaktoren des Triton im W-Matrix-Formalismus folgendes homogene Gleichungssystem

$$
\begin{aligned}
&{}^{\Gamma,I}(\mathcal{A}\mathcal{F}_n)^{c_3^T}_{L'}(E_T;q') = \\
&\qquad \sum_{c_3,L'',L} \int dq\, q^2 \; {}^{\Gamma,I}(\mathcal{A}\mathcal{V})^{c_3^T c_3}_{L'L''}(E_T;q',q)\; \widetilde{\Delta}^{c_3}_{k;L''L}\left(E_T - \frac{3q^2}{4}\right) {}^{\Gamma,I}(\mathcal{A}\mathcal{F}_n)^{c_3}_{L}(E_T;q)
\end{aligned}
\tag{4.82}
$$

gelöst werden muß, wobei ${}^{\Gamma,I}(\mathcal{A}\mathcal{F})^{c_3^T}_{L'}(E_T;q')$ durch

$$
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{A}\mathcal{F})^{c_3^T}_{L'}(E_T;q') = {}_{\gamma;k,\dagger\widetilde{W}(\hat{E}')}\langle\, M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3^T, L', q' \,|\, G_0 \,|\, F \,\rangle_\gamma \tag{4.83}
$$

gegeben ist. Die Bindungsenergie wird durch die Nullstelle der Fredholm-Determinante des Kerns der Integralgleichung festgelegt. Genau dort läßt sich das Gleichungssystem dann lösen.

4.5 Das effektive Potential

Wie aus (4.81) hervorgeht, werden die Lösungen der AGS-Gleichungen vollständig durch das effektive Potential

$$
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{A}\mathcal{V})^{c_3',c_3}_{L'L}(z;q',q) =
\sum_{\beta\neq\alpha} {}_{\beta;k,\dagger\widetilde{W}(\hat{E}')}\langle\, M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3', L', q' \,|\, G_0(z) \,|\, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \,\rangle_{\widetilde{W}(\hat{E}),k;\alpha} \tag{4.84}
$$

und den W-Matrix-Propagator $\widetilde{\Delta}^{c_3}_{k;L'L}(E-\frac{3}{4}q^2+i0)$ festgelegt. Während der Propagator mittels der Zweiteilchen-Gleichungen problemlos berechnet werden kann und als Singularität nur einen Pol bei der Deuteronenergie besitzt, muß das effektive Potential noch bestimmt werden. Über den sogenannten Umkopplungskoeffizienten enthält es die gesamte geometrische Struktur des zu lösenden Problems und bedingt durch die freie Greenfunktion treten kinematische Singularitäten in bestimmten Energiebereichen auf. Sie sind gerade im Hinblick auf numerische Behandlung äußerst unangenehm, da sie nicht stationär sind, d.h. in Abhängigkeit von den Impulsen q und q$'$ in der q-q$'$-Ebene wandern. Hier muß wieder zwischen Potentialen in relativistischen und nicht-relativistischen Integralgleichungen unterschieden werden. Im nicht-relativistischen Fall sind diese Singularitäten bei gegebenem q, q$'$ immerhin noch durch einen analytischen Ausdruck lokalisierbar. Selbst das geht im Falle des energieabhängigen Bonn-Potentials im Rahmen einer sehr plausiblen relativistischen Verallgemeinerung verloren. Dieser Sachverhalt verkompliziert die Numerik ungeheuer.

Generell ist G_0 durch

$$
G_0(z) = \frac{1}{z-H_0} \tag{4.85}
$$

gegeben, z=E+i0 und E ist die CM-Energie des Dreiteilchen-Systems. Im nicht-relativistischen Fall ist H_0 der übliche freie Hamiltonoperator mit den Matrixelementen

$$
\langle\, \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, H_0 \,|\, \vec{p}, \vec{q} \,\rangle = \left(p^2 - \frac{3}{4}q^2\right)\, \delta(\vec{p}\,'-\vec{p})\, \delta(\vec{q}\,'-\vec{q}). \tag{4.86}
$$

Bei einer relativistischen Beschreibung des Subsystems wird H_0 zu einem effektiven freien Dreiteilchen-Hamiltonoperator. Der Übersichtlichkeit halber wird das effektive Potential erst für eine nicht-relativistische Zweiteilchen-Wechselwirkung bestimmt und danach werden die Änderungen, die sich im relativistichen Fall ergeben, diskutiert.

4.5.1 Das effektive Potential bei einer energieunabhängigen Zweiteilchen-Wechselwirkung

Durch Einschieben zweier Einsen (2.83) in $\mathcal{H}_\alpha$ und $\mathcal{H}_\beta$ und unter Berücksichtigung von (4.69) und (4.70) erhält man

$$
\begin{aligned}
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{A}\mathcal{V})^{c_3' c_3}_{L'L}(z;q',q) = \sum_{\beta\neq\alpha}\sum_{\hat{L},\hat{L}'}\int dp\, p^2\; p^{\hat{L}} dp'\, p'^2\, p'^{\hat{L}'}\, {}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L'\hat{L}'}(\hat{E}';k,p') \\
\frac{{}_{\beta}\langle\, M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3', \hat{L}', q', p' \,|\, q, p, \hat{L}, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \,\rangle_\alpha}{z-p^2-\frac{3}{4}q^2}\; \widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L}L}(\hat{E},p,k).
\end{aligned}
\tag{4.87}
$$

Der sog. Umkopplungskoeffizient ${}_{\beta}\langle\, M_I I, M_\Gamma\Gamma, c_3', \hat{L}', p', q' \,|\, q, p, \hat{L}, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \,\rangle_\alpha$, der das Matrixelement von Zuständen verschiedener Dreiteilchen-Konfigurationen angibt, ist ein typisches Phänomen der Mehr-Teilchen-Physik (Mehr-Teilchen heißt hier mehr als zwei Teilchen). In ihm spiegelt sich die Nicht-Orthogonalität solcher Zustände, selbstverständlich geht er für $\beta=\alpha$ in die übliche Orthonormalitätsrelation über. Seine Berechnung ist äußerst länglich, das Ergebnis ist in Anhang A.5 angegeben und unabhängig von α und β. Wird es in (4.87) eingesetzt, so ergibt sich

$$
\begin{aligned}
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{A}\mathcal{V})^{c_3' c_3}_{L'L}(z;q',q) = 2\sum_{\hat{L},\hat{L}'} q'^{\hat{L}'+\hat{L}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}}\left\{\sum_{h=0}^{\hat{L}'+\hat{L}}\left(\frac{q}{q'}\right)^h U^{c_3',c_3}_{\Gamma,I}(\ell,h)\right\} \\
\frac{1}{2}\int dp\,p^2\,dp'\,p'^2\int_{-1}^{1}dx\,\frac{P_\ell(x)}{p'^{\hat{L}'}(x)\,p^{\hat{L}}(x)} \\
\frac{{}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L'\hat{L}'}(\hat{E}';k,p')\,p'^{\hat{L}'}\,p^{\hat{L}}\widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L}L}(\hat{E},p,k)}{z-p^2-\frac{3}{4}q^2}\,\frac{\delta(p'-p'(x))\,\delta(p-p(x))}{p'^2\,p^2}
\end{aligned}
\tag{4.88}
$$

mit

$$
p'(x)=\sqrt{q^2+\frac{1}{4}q'^2+qq'x} \qquad \text{und} \qquad p(x)=\sqrt{q'^2+\frac{1}{4}q^2+qq'x}. \tag{4.89}
$$

Die Integrationen über p und p' lassen sich sofort ausführen, man erhält

$$
\begin{aligned}
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{A}\mathcal{V})^{c_3' c_3}_{L'L}(z;q',q) = 2\sum_{\hat{L},\hat{L}'} q'^{\hat{L}'+\hat{L}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}}\left\{\sum_{h=0}^{\hat{L}'+\hat{L}}\left(\frac{q}{q'}\right)^h U^{c_3',c_3}_{\Gamma,I}(\ell,h)\right\} \\
\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}dx\;{}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L'\hat{L}'}(\hat{E}';k,p'(x))\,\frac{P_\ell(x)}{z-p^2(x)-\frac{3}{4}q^2}\,\widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L}L}(\hat{E},p(x),k)
\end{aligned}
\tag{4.90}
$$

Wegen $z-p^2(x)-\frac{3}{4}q^2 = qq'\left\{\frac{E-q^2-q'^2}{qq'} - x + i0\right\}$ (siehe 4.89), hier ist wieder z=E+i0, erhält man jetzt eine Darstellung des effektiven Potentials

$$
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3'c_3}_{L'L}(z;q',q) = 2\sum_{\hat{L},\hat{L}'} q'^{\hat{L}'+\hat{L}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} \left\{\sum_{h=0}^{\hat{L}'+\hat{L}} \left(\frac{q}{q'}\right)^h U^{c_3',c_3}_{\Gamma,I}(\ell,h)\right\}
$$

$$
\frac{1}{2qq'}\int_{-1}^{1} dx\; {}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L'\hat{L}'}(\hat{E}';k,p'(x))\,\frac{P_\ell(x)}{\frac{E-q^2-q'^2}{qq'} - x + i0}\,\widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L}L}(\hat{E},p(x),k), \qquad (4.91)
$$

an der sehr übersichtlich die vorhandene Singularitätenstruktur deutlich wird. Singularitätenfrei sind offenbar die Bereiche mit $\frac{E-q^2-q'^2}{qq'} > 1$ und die Gebiete mit negativer CM-Energie E. Für $-1 \leq \frac{E-q^2-q'^2}{qq'} \leq 1$ dagegen erhält das effektive Potential wegen

$$
\lim_{\epsilon\to 0+} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp \pi i \delta(x) \qquad (4.92)
$$

(hierbei bedeutet $P\,\frac{1}{x}$, daß der Cauchy-Hauptwert zu nehmen ist) einen Imaginärteil

$$
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3'c_3}_{L'L}(z;q',q) = 2\sum_{\hat{L},\hat{L}'} q'^{\hat{L}'+\hat{L}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} \left\{\sum_{h=0}^{\hat{L}'+\hat{L}} \left(\frac{q}{q'}\right)^h U^{c_3',c_3}_{\Gamma,I}(\ell,h)\right\}
$$

$$
\frac{1}{2qq'}\,P\int_{-1}^{1} dx\; {}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L'\hat{L}'}(\hat{E}';k,p'(x))\,\frac{P_\ell(x)}{\frac{E-q^2-q'^2}{qq'} - x}\,\widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L}L}(\hat{E},p(x),k)
$$

$$
-\pi i\, {}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L'\hat{L}'}(\hat{E}';k,p'(y))\,P_\ell(y)\widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L}L}(\hat{E},p(y),k) \qquad (4.93)
$$

das Hauptwertintegral kann durch ein simples Subtraktionsverfahren (siehe Anhang A.8) durch zwei gewöhnliche Integrale dargestellt werden, so daß sich letztlich folgender Ausdruck für das effektive Potential

$$
\begin{aligned}
{}^{\mathbf{\Gamma,I}}(\mathcal{AV})^{\mathbf{c_3'c_3}}_{\mathbf{L'L}}(\mathbf{z};\mathbf{q}',\mathbf{q}) = \mathbf{2}\sum_{\hat{\mathbf{L}},\hat{\mathbf{L}}'} \mathbf{q}'^{\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\mathbf{L}}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{\mathbf{max}}} \left\{\sum_{\mathbf{h}=0}^{\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\mathbf{L}}} \left(\frac{\mathbf{q}}{\mathbf{q}'}\right)^{\mathbf{h}} \mathbf{U}^{\mathbf{c_3',c_3}}_{\mathbf{\Gamma,I}}(\ell,\mathbf{h})\right\} \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2qq'}} \\
\left[\int_{-1}^{1} \mathbf{dx}\,\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{y}-\mathbf{x}}\left\{{}^{\dagger}\widetilde{\mathbf{W}}^{\mathbf{c_2'}}_{\mathbf{L'\hat{L}'}}(\hat{\mathbf{E}}';\mathbf{k},\mathbf{p}'(\mathbf{x}))\,\mathbf{P}_\ell(\mathbf{x})\widetilde{\mathbf{W}}^{\mathbf{c_2}}_{\hat{\mathbf{L}}\mathbf{L}}(\hat{\mathbf{E}},\mathbf{p}(\mathbf{x}),\mathbf{k}) - \right.\right. \\
\left.\left. {}^{\dagger}\widetilde{\mathbf{W}}^{\mathbf{c_2'}}_{\mathbf{L'\hat{L}'}}(\hat{\mathbf{E}}';\mathbf{k},\mathbf{p}'(\mathbf{y}))\,\mathbf{P}_\ell(\mathbf{y})\widetilde{\mathbf{W}}^{\mathbf{c_2}}_{\hat{\mathbf{L}}\mathbf{L}}(\hat{\mathbf{E}},\mathbf{p}(\mathbf{y}),\mathbf{k})\right\}\right] \\
+{}^{\dagger}\widetilde{\mathbf{W}}^{\mathbf{c_2'}}_{\mathbf{L'\hat{L}'}}(\hat{\mathbf{E}}';\mathbf{k},\mathbf{p}'(\mathbf{y}))\,\mathbf{P}_\ell(\mathbf{y})\widetilde{\mathbf{W}}^{\mathbf{c_2}}_{\hat{\mathbf{L}}\mathbf{L}}(\hat{\mathbf{E}},\mathbf{p}(\mathbf{y}),\mathbf{k})\log\left[\frac{\mathbf{1}+\mathbf{y}}{\mathbf{1}-\mathbf{y}}\right] \\
-\pi\,\mathbf{i}\,{}^{\dagger}\widetilde{\mathbf{W}}^{\mathbf{c_2'}}_{\mathbf{L'\hat{L}'}}(\hat{\mathbf{E}}';\mathbf{k},\mathbf{p}'(\mathbf{y}))\,\mathbf{P}_\ell(\mathbf{y})\widetilde{\mathbf{W}}^{\mathbf{c_2}}_{\hat{\mathbf{L}}\mathbf{L}}(\hat{\mathbf{E}},\mathbf{p}(\mathbf{y}),\mathbf{k})
\end{aligned} \qquad (4.94)
$$

ergibt. Hier ist $y = \frac{1+\frac{E-q^2-q'^2}{qq'}}{1-\frac{E-q^2-q'^2}{qq'}}$. Man erkennt sofort die logarithmischen Singularitäten bei $|y| = 1$, die offenbar nicht-stationär sind, da sie von den Impulsen abhängen.

Die Bedingung y=±1 liefert die Beziehung

$$q = \pm\frac{q'}{2} + \sqrt{E - \frac{3}{4}q'^2}, \tag{4.95}$$

die sich für die Inhomogenität zu

$$q = q' = \sqrt{E} \tag{4.96}$$

vereinfacht, weil dort die Impulsbeträge des ein- sowie des auslaufenden Neutrons gleich sind. Anders verhält es sich im Kern des Integralgleichungssystems (4.81), da q hier Integrationsvariable ist. In diesem Fall ist eine eingehende numerische Analyse notwendig.

4.5.2 Das effektive Potential im Falle des energieabhängigen Bonn-Potentials

Der Sachverhalt wird ungleich komplizierter, wenn das energieabhängige Bonn-Potential verwendet wird. Nach [17] ist das Potential $\hat{V}(\hat{E};\vec{p}\,',\vec{p})$ ebenso wie die T-Matrix $\hat{T}(\hat{z};\vec{p}\,',\vec{p})$ off-Shell gegeben durch

$$\hat{V}(\hat{E}^{rel};\vec{p}\,',\vec{p}) = \langle\ \vec{p}\,'\ |\hat{V}(\hat{E}^{rel})|\ \vec{p}\ \rangle \qquad \hat{T}(\hat{z};\vec{p}\,',\vec{p}) = \langle\ \vec{p}\,'\ |\hat{T}(\hat{E}^{rel}+i0)|\ \vec{p}\ \rangle, \tag{4.97}$$

wobei die Zustände $|\ \vec{p}\ \rangle$ relativistische Zustände sind und demnach die Energie $\hat{E}_p = 2\sqrt{m^2+p^2}$ bzw. $\hat{E}_p = 2m + \epsilon$ besitzen [9]. Für das Streuproblem soll on-Shell weiterhin gelten, daß die nicht-relativistische CM-Energie des Streuprozesses mit dem On-Shell-Relativimpuls $\vec{k}$ in der Relation $\hat{E} = \frac{k^2}{m}$ steht[10]. Nimmt man die Relativistik dieser Zustände ernst, so ist die in Abschnitt 2.2.3 gezeigte formale Herleitung der AGS-Gleichungen nur unter folgender Annahme möglich:

Der relativistische Hamiltonoperator H^{rel} für ein wechselwirkendes Neutron-Deuteron-System läßt sich im Center-of-Momentum-System der drei Nukleonen in der Form

$$H^{rel} = H_0^{rel} + V^{rel} \tag{4.98}$$

schreiben; hier ist H_0^{rel} der Hamiltonoperator dreier freier relativistischer Nukleonen und V^{rel} deren Wechselwirkungsanteil. Es muß darauf hingewiesen werden, daß die Konstruktion eines solchen Hamiltonoperators in quantenmechanisch korrekter Art und Weise nur im Rahmen einer effektiven Theorie möglich ist [17].

[9] Wenn im folgenden der Begriff „relativistisch“ im Zusammenhang mit der energieabhängigen Version des Bonn-Potentials benutzt wird, so ist er ausschließlich in kinematischem Sinn zu verstehen.

[10] In diesem Abschnitt werden trotz der offensichtlichen Inkonsistenz aus Gründen der Verständlichkeit erneut Impulse und Energien in Einheiten von MeV gewählt.

Ansonsten sind nämlich die Resolventenbeziehungen (2.31), die in eine Herleitung der Integralgleichungsformulierung des Dreiteilchen-Problems wesentlich eingehen, nicht mehr anwendbar. Die Einführung eines solchen effektiven Operators H^{rel} ist notwendig, da der Subsystem-Propagator $\hat{G}_0(z)$ im Falle des energieabhängigen Bonn-Potentials formal relativistisch ist und die Matrixelemente

$$\langle \vec{p}' \,|\, \hat{G}_0(z) \,|\, \vec{p} \,\rangle = \frac{1}{z - 2\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}} \, \delta(\vec{p}' - \vec{p}) \tag{4.99}$$

besitzt. Diese Zweiteilchen-Greenfunktion bestimmt aber wesentlich die freie Dreiteilchen-Greenfunktion $G_0(z)$. In diesem Zusammenhang noch einige Anmerkungen zu einer Veröffentlichung von [19]: die oben angeführte „relativistische“ Verallgemeinerung der AGS-Gleichungen entspricht genau dem Hinweis dieser Autoren, das Dreinukleonen-Problem mit dem energieabhängigen Bonn-Potential OBEPT als Zweiteilchen-Wechselwirkung könne nur dann korrekt beh andelt werden, wenn es als *Dreiteilchen-Problem mesonentheoretisch* formuliert wird; d.h. mit den Bonner Lagrangedichten für jedes der drei Nukleonen, mit der entsprechenden Zeit-geordneten Störungstheorie etc. Diese Vorgehensweise wäre zweifellos richtig. Allerdings unternimmt keiner der Autoren auch nur den Versuch, dies in die Tat umzusetzen; stattdessen versuchen sie auf folgende Weise diese Schwierigkeit zu umgehen. Sie nehmen das energieabhängige Bonn-Potential $\hat{V}(\hat{E}^{rel})$ mit $\hat{E}^{rel} = 2m + \hat{E}$, $-2m \leq \hat{E} < 0$, berechnen sich damit nicht-relativistische $\hat{T}$-Matrizen über die Gleichung

$$\begin{aligned} \hat{T}(\hat{E}) &= \hat{V}(2m + \hat{E}) + \hat{V}(2m + \hat{E})\, \hat{G}_0(\hat{E})\, \hat{T}(\hat{E}) \\ \text{mit} \;\; \langle \vec{p}' \,\, |\, \hat{G}_0(\hat{E}) \,|\, \vec{p} \,\rangle &= \frac{1}{\hat{E} - \frac{\vec{p}^2}{m}} \, \delta(\vec{p}' - \vec{p}), \end{aligned} \tag{4.100}$$

benutzen also nicht die korrekte Greenfunktion, verändern dann die Potentialparameter dergestalt, daß sich schließlich die „richtigen“ Zweiteilchen-Observablen ergeben. Die so bestimmten $\hat{T}$-Matrizen werden dann als Input zur Bestimmung der Triton-Bindungsenergie verwendet mit einem Ergebnis von E_T=-6.65 MeV im Gegensatz zu E_T=-6.48 MeV bei Benutzung von

$$\begin{aligned} \hat{T}(2m + \hat{E}) &= \hat{V}(2m + \hat{E}) + \hat{V}(2m + \hat{E})\, \hat{G}_0(2m + \hat{E})\, \hat{T}(2m + \hat{E}) \\ \langle \vec{p}' \,\, |\, \hat{G}_0(2m + \hat{E}) \,|\, \vec{p} \,\rangle &= \frac{1}{2m + \hat{E} - 2\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}} \, \delta(\vec{p}' - \vec{p}), \end{aligned} \tag{4.101}$$

also bei korrekter Greenfunktion. (Diese Bindungsenergien stammen aus einer Zweikanal-Rechnung, d.h. es liegt eine reine S-Wellen-Projektion des Zweiteilchen-Inputs vor.) Zweifellos wird auf diese Weise das o.a. Problem, relativistischen Zweiteilchen-Input in nicht-relativistischen Dreiteilchen-Rechnungen zu verwenden, umgangen; jedoch ist das Ergebnis eigentlich wertlos. Weder das Potential noch die mittels (4.100) bestimmtem Zweiteilchen-Übergangsoperatoren sind wohldefiniert. Ganz im Gegenteil verstößt die ad-hoc-Ersetzung der relativistischen Greenfunktion durch eine nicht-relativistische genau gegen den Reduktionsformalismus in der Konstruktion des energieabhängigen Bonn-Potentials, der, ausgehend von einem feld- und mesonentheoretischem relativistischem Ansatz unter korrekter Berücksichtigung des Mesonen-Propagators, schließlich eine Zweiteilchen-T-Operator liefert, der durch eine relativistische Greenfunktion bestimmt wird. Die durch (4.100) zusätzlich eingeführte Näherung nimmt allen damit berechneten Größen jegliche Aussagekraft. Zudem ist der Unterschied in den Triton-Bindungsenergien so gering, daß dadurch die inkonsistente Behandlung von Zweiteilchen-Input, der mit der energieabhängigen Version des Bonn-Potentials bestimmt wurde, im Rahnen nicht-relativistischer Dreiteilchen-Rechnungen keineswegs beseitigt wird.

Geht man also von der Existenz des H^{rel} aus, so ist die freie Dreiteilchen-Resolvente im Falle des energieabhängigen Potentials durch

$$G_0(z) = \frac{1}{z - H_0^{rel}} \tag{4.102}$$

gegeben und besitzt im Center-Of-Momentum-System die Matrixelemente

$$\begin{aligned}&\langle\, \vec{p}\,', \vec{q}\,' \,|\, G_0(z) \,|\, \vec{p}, \vec{q}\,\rangle = \\ &\qquad \frac{\delta(\vec{p}\,' - \vec{p})\,\delta(\vec{q}\,' - \vec{q})}{z - \sqrt{m^2 + (\vec{p} + \frac{1}{2}\vec{q})^2} \;-\; \sqrt{m^2 + (\vec{p} - \frac{1}{2}\vec{q})^2} \;-\; \sqrt{m^2 + \vec{q}^{\,2}}}.\end{aligned} \tag{4.103}$$

Das ergibt sich sehr einfach durch Einführen der Vierervektoren

$$P_\mu = \begin{pmatrix} E_1 + E_2 + E_3 \\ \\ \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3 \end{pmatrix} \quad p_\mu = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} E_1 - E_2 \\ \\ \vec{k}_1 - \vec{k}_2 \end{pmatrix} \quad q_\mu = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 2E_3 - (E_1 + E_2) \\ \\ 2\vec{k}_3 - (\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \end{pmatrix}, \tag{4.104}$$

so daß

$$\vec{k}_1 = \vec{p} - \frac{1}{2}\vec{q} \qquad \vec{k}_2 = -\vec{p} - \frac{1}{2}\vec{q} \tag{4.105}$$

und durch Übergang ins Center-Of-Momentum-System $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3 = 0 \;\;\Leftrightarrow\;\; \vec{q} = \vec{k}_3$. Dabei ist $\vec{q}$ der räumliche Anteil von q_μ. Gleichung (4.102) reduziert sich im nicht-relativistischen Grenzfall genau auf die Matrixelemente der freien Greenfunktion für ein nicht-relativistisches Potential.

Allerdings wird die freie Dreiteilchen-Greenfunktion wegen der auftretenden Skalarprodukte $\langle\, \vec{p} \,|\, \vec{q}\,\rangle$ explizit abhängig vom Relativwinkel zwischen $\vec{p}$ und $\vec{q}$ und folglich von den Raumwinkeln Ω_p und Ω_q. Dieser Sachverhalt macht die Konstruktion einer geeigneten Hilbertraum-Basis nahezu unmöglich.

Es sei vorweggenommen, daß alle Versuche, ausgehend von (4.103) ein effektives Potential zu konstruieren, gescheitert sind. Dabei ist offensichtlich, daß hier eine

Modifikation vorgenommen werden muß. Vernachlässigt man beispielsweise die winkelabhängigen Terme[11] so erhält das effektive Potential ${}^{\Gamma,I}(\widetilde{\mathcal{AV}})^{c_3',c_3}_{L',L}(z;q',q)$ die Form

$$
{}^{\Gamma,I}(\widetilde{\mathcal{AV}})^{c_3'c_3}_{L'L}(z;q',q) = 2\sum_{\hat{L},\hat{L}'} q'^{\hat{L}'+\hat{L}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} \left\{ \sum_{h=0}^{\hat{L}'+\hat{L}} \left(\frac{q}{q'}\right)^h U^{c_3',c_3}_{\Gamma,I}(\ell,h) \right\}
$$

$$
\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} dx \; \frac{{}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L'\hat{L}'}(\hat{E}';k,p'(x))\; P_\ell(x)\; \widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L}L}(\hat{E},p(x),k)}{z-\sqrt{m^2+\left(p(x)+\frac{1}{2}q\right)^2}-\sqrt{m^2+\left(p(x)-\frac{1}{2}q\right)^2}-\sqrt{m^2+q^2}} \tag{4.106}
$$

mit

$$
p'(x) = \sqrt{q^2+\frac{1}{4}q'^2+qq'x} \qquad \text{und} \qquad p(x) = \sqrt{q'^2+\frac{1}{4}q^2+qq'x}.
$$

Man sieht sofort, daß für jedes x zum nicht-relativistischen Grenzfall übergegangen werden kann (die Wurzeln im Nenner können in sehr guter Näherung durch ihre Taylorentwicklung erster Ordnung ersetzt werden), sofern nur q und q$'$ klein gegen m sind. Das ist sicherlich der Fall, wenn q und q$'$ die On-Shell-Impulse des Streuprozesses sind, d.h. q rsp. q$'$ sind die Impulse des einlaufenden rsp. auslaufenden Neutrons im CM-System. Demnach kann in der Inhomogenität der AGS-Gleichungen (4.81) stets das effektive Potential (4.94) für eine nicht-relativistische Zweiteilchen-Wechselwirkung verwendet werden. Gänzlich anders sind die Verhältnisse im Kern der Integralgleichung (4.81), dort ist q Integrationsvariable, eine Approximation der Wurzeln im Nenner nach Taylor ist keineswegs gerechtfertigt.

Dem Autor dieser Arbeit ist es trotz enormen zeitlichen Aufwandes nicht gelungen, dieses Problem zu umgehen; letztlich sprachen die numerischen Resultate stets ein vernichtendes Urteil. Die einzige Möglichkeit, hier weiterzukommen, sieht er darin, die freie Dreiteilchen-Greenfunktion im Rahmen eines exakten Dirac-Formalismus zu konstruieren oder, was in [19] schon angesprochen wurde, den Formalismus, der zum energieabhängigen Zweinukleonen-Bonn-Potential führt, auf drei Nukleonen zu erweitern.

4.6 Die Optimierung des Zweiteilchen-Inputs. Der k-Verlauf

Die Crux der W-Matrix-Methode ist die Festlegung des im Bereich möglicher Bindungsenergien ($\hat{E} < 0$ für nicht-relativistische Bewegungsgleichungen, für das

[11] Eine solche Approximation ist keinesfalls erlaubt; hier soll nur deutlich gemacht werden, warum selbst bei nicht-relativistischen On-Shell-Impulsen eine Modifikation des effektiven Potentials die Übergangsamplituden beeinflußt.

energieabhängige Bonn-Potential $0 \leq \hat{E}^{rel} < 2m$) völlig unbestimmten Parameters k. Wie sich herausgestellt hat, bestimmt k wesentlich die Güte der separablen Approximation der $\hat{T}$-Matrix (4.49); die damit berechneten Dreiteilchen-Übergangsamplituden reagieren sehr sensibel auf Änderungen im k-Verlauf. Grundsätzlich ist k eine Funktion von $\hat{E}$, p' und p und muß für jeden Zweiteilchen-Kanal c_2 dergestalt festgelegt werden, daß der Restterm $R^{c_2}_{L',L}(\hat{E}; p', p, k)$ minimiert wird (4.47). Der Versuch, dies auf Zweiteilchen-Niveau durch Betrachten des Restterms und Variation von k numerisch zu erreichen, ist wegen der vier völlig unabhängigen Variablen $\hat{E}$, p', p und k, von denen p' und p Werte zwischen 0 und ∞ und E zwischen $-\infty$ und einem positiven Wert annehmen, praktisch undurchführbar. Andererseits gibt es kein plausibles a-priori-Kriterium, wie k=k($\hat{E}; p', p$) festzulegen ist[12]. Die hier verwandten Methoden, den Parameter k als Funktion der Energie k=k($\hat{E}$) zu bestimmen, beruhen ausschließlich auf numerischen Verfahren und sind im wesentlichen von [28] übernommen worden. Da sie dort ausführlich beschrieben sind, werden sie hier nur kurz behandelt.

4.6.1 Ein kinematisches a-posteriori-Verfahren

Historisch gesehen [27] trat das Problem, wie k festzulegen ist, schon bei den ersten Rechnungen zur Bestimmung der Triton-Bindungenergie und der Triton-Formfaktoren (Abschnitt 4.4.1)

$$
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AF})^{c_3^T}_{L',L}(E_T; q') = \sum_{c_3, L'', L} \int dq\, q^2 \; {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3^T c_3}_{L' L''}(E_T; q', q) \; \widetilde{\Delta}^{c_3}_{k;L''L}(E_T - \frac{3q^2}{4})^{\Gamma,I}(\mathcal{AF})^{c_3}_{L}(E_T; q) \tag{4.107}
$$

auf. Es zeigte sich eine deutliche Abhängigkeit der Bindungsenergie in Abhängigkeit vom (willkürlich) gewählten k. Hier muß man sich verdeutlichen, daß k stets in Abhängigkeit vom Zweiteilchen-Kanal c_2 und von der Energie gewählt werden kann und erfahrungsgemäß auch gewählt muß, um überhaupt vernünftige Ergebnisse zu erhalten, also $k = k_{c_2}$(E). So gesehen hat das Integral in (4.91) genaugenommen die Form

$$
\int_{-1}^{1} dx \; \left[{}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L'\hat{L}'} \left(\hat{E}_T'; k', \sqrt{q^2 + \frac{1}{4} q'^2 + q q' x} \right) \frac{P_\ell(x)}{\frac{E_T - q^2 - q'^2}{q q'} - x} \right.
$$
$$
\left. \widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L}L} \left(\hat{E}_T; \sqrt{q'^2 + \frac{1}{4} q^2 + q q' x}, k \right) \right] \tag{4.108}
$$

[12]Der Autor dieser Arbeit muß zugeben, geraume Zeit mit der Suche nach einem solchen Kriterium erfolglos vertan zu haben.

mit $\hat{E}'_T = E_T - \frac{3}{4}q'^2$, $\hat{E}_T = E_T - \frac{3}{4}q^2$ und $k' = k'_{c_2}(\hat{E}'_T)$ sowie $k = k_{c_2}(\hat{E}_T)$. Um eine erste Abschätzung für einen optimalen funktionalen Verlauf $k = k(\hat{E})$ zu bekommen, muß folgendes beachtet werden:

1. für $p'(x) = k'$ und $p(x) = k$ ist die Darstellung des Zweiteilchen-Inputs exakt,
2. $-1 \leq x \leq +1$.

Ersetzt man in erster Näherung x durch seinen Mittelwert 0 und q' durch einen mittleres $\bar{q}' = Q_0$ (die Formfaktoren nehmen für $q' \to \infty$ sehr schnell ab), so erhält man

$$k(\hat{E}_T) = p(0) = \sqrt{\frac{1}{4}q^2 + Q_0^2}. \tag{4.109}$$

Mit dem Zusammenhang zwischen $\hat{E}_T$ und E_T ergibt sich

$$k(\hat{E}_T) = p(0) = \sqrt{\frac{E_T - \hat{E}_T}{3} + Q_0^2}, \tag{4.110}$$

faßt man E_T und Q_0^2 zu einem Parameter E_{off} zusammen, so erhält man letztlich ein

Kinematisches Kriterium

$$\mathbf{k(\hat{E}_T)} = \sqrt{\frac{\mathbf{E_{off} - \hat{E}_T}}{\mathbf{3}}}. \tag{4.111}$$

Die freien Parameter E_{off} (generell existiert für jeden Zweiteilchen-Kanal c_2 ein E_{off}) ist dann so festzulegen: daß die Ergebnisse verläßlicher Referenzrechnungen aus der Literatur, die die Triton-Bindungsenergie in Abhängigkeit von den berücksichtigten Zweiteilchen-Kanälen angeben, reproduziert werden.

Rechnungen, die mit den so bestimmten $k(\hat{E}_T)$ durchgeführt worden sind, liefern, verglichen mit älteren Resultaten, die konstante k benutzten, deutlich bessere Ergebnisse. Allerdings hat diese Methode einige gravierende Mängel: zum einen ist sie ein *a-posteriori*-Kriterium, denn erst die Durchführung von *Dreiteilchen*-Rechnungen gibt Aufschluß über den k-Verlauf und solche Rechnungen sind immer aufwendig, auch wenn sich das bei Triton-Rechnungen in Grenzen hält. Dabei ist der Parameter k eine originäre Zweiteilchen-Größe. Zum anderen verliert sie bei Berücksichtigung von Subsystem-Partialwellen mit höherem Gesamtdrehimpuls drastisch an Sensibilität, weil solche Wellen nur noch geringfügig zur Triton-Wellenfunktion und zur Bindungsenergie beitragen. Andererseits spielen diese bei vielen Streuobservablen eine große Rolle. Zwar kann solch ein Verfahren, den k-Verlauf zu bestimmen, auch auf Streuenergien erweitert werden (man löst die inhomogene Gleichung bei Energien $E > 0 > E_T$), jedoch ist das Anfitten der Ergebnisse an Referenzrechnungen über die Variation der E_{off} mit einem ungeheuren Aufwand an Rechenzeit verbunden.

4.6.2 Ein a-priori-Dreiteilchen-Verfahren

Dieses Verfahren basiert auf der Hilbert-Schmidt-Norm des Dreiteilchen-Kerns. Bekanntlich existiert die Norm eines jeden Hilbert-Schmidt-Operators und ist durch

$$N^2 = Tr(KK^\dagger) < \infty \tag{4.112}$$

definiert. Die AGS-Gleichungen sind sicherlich dann lösbar, wenn ihr Kern ein Hilbert-Schmidt-Operator ist. Demzufolge muß er für Bindungszustände die Beziehung

$$\begin{aligned} N^2 = \sum_{c_3',c_3,L,L',\hat{L},\hat{L}'} \int dq'\, q'^2\, dq\, q^2 \\ {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3c_3'}_{LL'}(E_T;q',q)\; {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3'c_3}_{L'\hat{L}'}(E_T;q',q)\; \widetilde{\Delta}^{c_3}_{k;\hat{L}'\hat{L}}(\hat{E}_T)\, \widetilde{\Delta}^{c_3}_{k;\hat{L}L}(\hat{E}_T) < \infty \end{aligned} \tag{4.113}$$

mit

$$\begin{aligned} {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3'c_3}_{L'L}(E_T;q',q) = 2 \sum_{\hat{L},\hat{L}'} q'^{\hat{L}'+\hat{L}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} \left\{ \sum_{h=0}^{\hat{L}'+\hat{L}} \left(\frac{q}{q'}\right)^h U^{c_3',c_3}_{\Gamma,I}(\ell,h) \right\} \\ \frac{1}{2qq'} \int_{-1}^{1} dx\; {}^\dagger\widetilde{W}^{c_2'}_{L'\hat{L}'}(\hat{E}_T';k',p'(x))\, \frac{P_\ell(x)}{\frac{E_T-q^2-q'^2}{qq'}-x}\, \widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L}L}(\hat{E}_T,p(x),k), \end{aligned} \tag{4.114}$$

erfüllen, wobei wieder

$$p'(x) = \sqrt{q^2 + \frac{1}{4}q'^2 + qq'x} \qquad \text{und} \qquad p(x) = \sqrt{q'^2 + \frac{1}{4}q^2 + qq'x}.$$

Bei diesen Integrationen werden offenbar die Beiträge bestimmter $[\hat{E}, p(x)]$ und $[\hat{E}', p'(x)]$ zur Norm des Kerns aufsummiert. Offenbar ist

$$\begin{aligned} N^2 = \sum_{c_3',c_3,L,L',\hat{L},\hat{L}'} \sum_{\tilde{L},\tilde{L}'} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} \sum_{h=0}^{\tilde{L}'+\tilde{L}} \sum_{\bar{L},\bar{L}'} \sum_{\ell'=0}^{\ell'_{max}} \sum_{h'=0}^{\bar{L}'+\bar{L}} U^{c_3,c_3'}_{\Gamma,I}(\ell,h)\, U^{c_3',c_3}_{\Gamma,I}(\ell',h') \\ \int dq'\, q'\, dq\, q\, q'^{\tilde{L}'+\tilde{L}} \left(\frac{q}{q'}\right)^h q'^{\bar{L}'+\bar{L}} \left(\frac{q}{q'}\right)^{h'} \int_{-1}^{1} dx \int_{-1}^{1} dy \\ {}^\dagger\widetilde{W}^{c_2}_{L\tilde{L}}(\hat{E}_T;k,p(x))\, \frac{P_\ell(x)}{\frac{E_T-q^2-q'^2}{qq'}-x}\, \widetilde{W}^{c_2'}_{\tilde{L}'L'}(\hat{E}_T',p'(x),k') \\ {}^\dagger\widetilde{W}^{c_2'}_{L'\bar{L}'}(\hat{E}_T';k',p'(y))\, \frac{P_\ell'(y)}{\frac{E_T-q^2-q'^2}{qq'}-y}\, \widetilde{W}^{c_2}_{\bar{L}'\hat{L}'}(\hat{E}_T,p(y),k) \widetilde{\Delta}^{c_3}_{k;\hat{L}',\hat{L}}(\hat{E}_T)\, \widetilde{\Delta}^{c_3}_{k;\hat{L},L}(\hat{E}_T); \end{aligned} \tag{4.115}$$

um die Größe der Beiträge von einem festen $[\hat{E}, p]$ abschätzen zu können, wird die Größe

$$n^{c_3 c_3'} = \int_{-1}^{1} dx \int_{-1}^{1} dy \, {}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2}_{L\tilde{L}}(\hat{E}_T; k, p(x)) \, \frac{P_\ell(x)}{\frac{E_T - q^2 - q'^2}{qq'} - x} \, \widetilde{W}^{c_2'}_{\tilde{L}'L'}(\hat{E}_T', p'(x), k')$$

$${}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L'\bar{L}'}(\hat{E}_T'; k', p'(y)) \, \frac{P_\ell'(y)}{\frac{E_T - q^2 - q'^2}{qq'} - y} \, \widetilde{W}^{c_2}_{\bar{L}'\hat{L}'}(\hat{E}_T, p(y), k) \widetilde{\Delta}^{c_3}_{k;\hat{L}',\hat{L}}(\hat{E}_T) \, \widetilde{\Delta}^{c_3}_{k;\hat{L},L}(\hat{E}_T) \tag{4.116}$$

näher betrachtet. Wählt man nun ein *festes* p und $\hat{E}_T$, die also unabhängig von x sind, und berücksichtigt, daß wegen $\hat{E}_T = E_T - \frac{3q^2}{4}$ q, wegen (4.115) ebenfalls

$$q' = -\frac{qx}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{qx}{2}\right)^2 - \frac{1}{4}q^2 + p^2} \tag{4.117}$$

q′, durch

$$p' = \sqrt{p^2 + \frac{3}{4}q^2 - \frac{3}{4}q'^2}, \qquad \hat{E}_T' = \hat{E}_T - \frac{3}{4}q'^2 \tag{4.118}$$

auch p′, $\hat{E}_T'$ und damit alle kinematischen Variablen festgelegt sind, so ergibt sich näherungsweise der Beitrag eines festgewählten $[\hat{E}, p]$ zur Hilbert-Schmidt-Norm des Integralkerns zu

$$n^{c_3 c_3'}(\hat{E}_T, p) = \int_{-1}^{1} dx \int_{-1}^{1} dy \, {}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2}_{L\tilde{L}}(\hat{E}_T; k, p) \, \frac{P_\ell(x)}{\frac{E_T - q^2 - q'^2}{qq'} - x} \, \widetilde{W}^{c_2'}_{\tilde{L}'L'}(\hat{E}_T', p', k')$$

$${}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L'\bar{L}'}(\hat{E}_T'; k', p') \, \frac{P_\ell'(y)}{\frac{E_T - q^2 - q'^2}{qq'} - y} \, \widetilde{W}^{c_2}_{\bar{L}'\hat{L}'}(\hat{E}_T, p, k) \widetilde{\Delta}^{c_3}_{k;\hat{L}',\hat{L}}(\hat{E}_T) \, \widetilde{\Delta}^{c_3}_{k;\hat{L},L}(\hat{E}_T) \tag{4.119}$$

Dabei werden natürlich (4.117) und (4.118) eingesetzt und es wird über alle x integriert, für die (4.117) positive Lösungen hat.

Mittels der Größe $n^{c_3 c_3'}(\hat{E}_T, p)$ läßt sich jetzt ein Verfahren angeben, k=k($\hat{E}_T$) festzulegen. Es ist allerdings ausschließlich *empirisch* begründbar, d.h. nachdem ausreichende Erfahrungen mit Dreiteilchen-Rechnungen bei verschiedenen k-Verläufen gesammelt worden sind, nicht etwa analytisch.

k=k ($\hat{\mathbf{E}}_\mathbf{T}$) wird so gewählt, daß $\boldsymbol{n}^{c_3 c_3'}$ ($\hat{\mathbf{E}}_\mathbf{T}$, k($\hat{\mathbf{E}}_\mathbf{T}$)) = $\mathbf{max}_p$ [$\boldsymbol{n}^{c_3 c_3'}(\hat{E}_T, p)$]

Das ist folgendermaßen zu verstehen: $n^{c_3 c_3'}(\hat{E}_T, p)$ ist eine Funktion der Subsystem-Energie $\hat{E}_T$ und des Subsystem-Impulses p. Trägt man $n^{c_3 c_3'}(\hat{E}_T, p)$ gegen $\hat{E}_T$ und p dreidimensional auf, so ergibt sich stets eine Fläche im Raum, die ein oder mehrere deutliche Maxima aufweist. Die wesentlichen Beiträge zum Integralkern liegen demnach da, wo $n^{c_3 c_3'}(\hat{E}_T, p)$ maximal wird. Dementsprechend muß k=k($\hat{E}_T$) entlang dieser Maxima verlaufen. Die Bedingung an k muß selbstkonsistent ausgewertet werden, d.h. man gibt einen k-Verlauf vor, bestimmt damit die $n^{c_3 c_3'}(\hat{E}_T, p)$, hieraus das optimalere $n^{c_3 c_3'}\left(\hat{E}_T, k(\hat{E}_T)\right)$ und wiederholt das Verfahren solange, bis die auftretenden Veränderungen im k-Verlauf vernachlässigbar werden. Dabei zeigt sich eine erste Unzulänglichkeit des Verfahrens; das so bestimmte optimale k($\hat{E}_T$) kann durchaus von der Wahl des k-Verlaufs abhängen, mit dem die Prozedur gestartet wurde. Das kinematische Verfahren, welches die einzige Methode zur Bestimmung des Start-k-Verlaufs darstellt, ist gerade bei Zweiteilchen-Kanälen mit höherem Subsystem-Gesamtdrehimpulsen zu insensibel. So zeigen sich bspw. im $^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal mehrere Maxima, so daß der mit dem kinematischem Verfahren bestimmte k-Verlauf und das $n^{c_3 c_3'}\left(\hat{E}_T, k(\hat{E}_T)\right)$ weit auseinanderliegen. Für viele Observable spielt der $^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal eine wesentliche Rolle. Mehrere Maxima in $n^{c_3 c_3'}(\hat{E}_T, p)$ stellen ohnehin ein Problem dar, weil das durch $n^{c_3 c_3'}\left(\hat{E}_T, k(\hat{E}_T)\right)$ vorgeschriebene $k(\hat{E}_T)$ nicht parametrisiert werden kann. Dort, aber nicht nur dort, treten künstliche Singularitäten im Zweiteilchen-Propagator auf; bei bestimmten k sind die On-Shell-W-Matrizen nicht invertierbar. Dann kann k($\hat{E}_T$) nicht gemäß $n^{c_3 c_3'}\left(\hat{E}_T, k(\hat{E}_T)\right)$ gewählt werden oder muß unstetig verlaufen. Unstetigkeiten im funktionalen Verlauf von k bedingen aber Unstetigkeiten im Kern der Integralgleichung, deren Auswirkungen auf die Lösung unabsehbar sind. So zogen Unstetigkeiten im k-Verlauf des $^3S_1 - {}^3D_1$-Kanals eine drastische Verschlechterung der berechneten Triton-Bindungsenergie nach sich. Aus diesen Gründen ist es im übrigen erforderlich, in allen Subsystem-Kanälen k so zu parametrisieren, daß stets

$$\lim_{\hat{E} \to -0} k(\hat{E}) = 0 \tag{4.120}$$

gelten muß, denn für Zweiteilchen-Streuenergien ist k ja so festgelegt, daß (4.120) erfüllt ist.

Ein weitere Mangel beider Verfahren liegt darin, daß sie beide explizit die Dreiteilchenenergie enthalten. Das bedeutet, daß beim Übergang zu einer neuen Energie stets der k-Verlauf neu bestimmt werden muß. Die Hoffnung, die Energieabhängigkeit sei nur schwach, erfüllte sich leider nicht. Da letztlich erst die Ergebnisse einer vollständigen Dreiteilchen-Rechnung Aussagen über die Qualität des gewählten k-Verlaufs machen, kann dieses Verfahren sehr zeitaufwendig sein und der Autor dieser Arbeit war häufig auf Intuition und Glück, die Wahl des k-Verlaufs betreffend, angewiesen.

Die oben angeführte Bedingung für eine optimalen k-Verlauf wurde numerisch in folgender Weise realisiert; α ist ein Fit-Parameter (Tabellen 16, 17, 18 und 19):

$$k(\hat{E}) = \sqrt{\frac{E_{off} - \alpha \hat{E}}{3}}. \tag{4.121}$$

5 Die Observablen des Streuprozesses

In diesem Kapitel soll eine vollständige Analyse des Neutron-Deuteron-Streuprozesses vorgenommen werden. Zu diesem Zweck muß insbesondere die Spin-Struktur der Reaktionspartner sowohl im Eingangs- wie im Ausgangskanal näher analysiert werden. Da beide Reaktanten einen solchen nicht-verschwindenden Drehimpuls besitzen, ergibt sich in einem realen Streuexperiment die Notwendigkeit, die Polarisation von Target und einfallendem Teilchenstrahl zu berücksichtigen, um die Dynamik des Streuprozesses vollständig zu bestimmen. In diesem Zusammenhang hat sich gemäß der Madison-Konventionn [29] folgende Notation durchgesetzt: ein Streuprozeß A+b→c+D teilweise polarisierter Teilchen wird in der Form A(b,c)D geschrieben. Ist die Polarisation eines Reaktanten bekannt oder wird sie experimentell bestimmt, wird dieser Reaktionspartner mit einem Pfeil gekennzeichnet. So meint also A(b,c)D ein vollständig unpolarisiertes Experiment A(b,$\vec{c}$)D ein Polarisationsexperiment, in dem die Polarisation von Teilchen c gemessen wird, A($\vec{b}$,c)D ein sog. Analysierstärke-Experiment, bei dem die Polarisation eines einlaufenden Reaktanten bekannt ist, A($\vec{b}, \vec{c}$)D ein Polarisationtransfer-Experiment, $\vec{A}$($\vec{b}$,c)D und A(b,$\vec{c}$)$\vec{D}$ Spin-Korrelations-Experimente im Ein- bzw. Ausgangskanal. Erst diese, zum Teil hochkomplizierte Experimente, die mittels polarisierter Teilchenquellen, polarisierter Targets und Doppel- und Dreifachstreuung [30] durchgeführt werden, geben Aufschluß über die Dynamik eines solchen allgemeinen Streuprozesses. Im Falle der elastischen Neutron-Deuteron-Streuung ist die Situation infolge der relativ einfachen Reaktion etwas übersichtlicher. Im folgenden wird im Rahmen einer Dichtematrix-Formulierung [30, 31] und nachfolgender Invarianz-Überlegungen [31] gezeigt, welche Größen experimentell bestimmt werden müssen, um eine vollständige dynamische Beschreibung der Reaktion ${}^1H + {}^2H \rightarrow {}^1H + {}^2H$ zu gewährleisten. Wesentlich ist, daß alle diese Größen von der Dynamik her ausschließlich durch die On-Shell-Dreiteilchen-Übergangsamplituden, also durch die Matrixelemente der $U_{\beta\alpha}$ in der ursprüglichen, nicht nach Drehimpulsen zerlegten Kanalzustandsbasis (2.86) bestimmt werden. Dabei ist der Betrag des nicht-relativistischen On-Shell-Impuls des Neutrons im CM-System mit der ebenfalls nicht-relativistischen Einschußenergie des Neutrons im Laborsystem verknüpft durch (E_D ist die Deuteron-Bindungsenergie)

$$Q = \sqrt{\frac{4}{3}(E - E_D)}. \tag{5.1}$$

5.1 Die Übergangsamplituden

Zuerst einige klärende Bemerkungen zur Notation: Die Übergangsamplituden in der nicht nach Drehimpulsen zerlegten Kanalzustandsbasis wurden bisher gemäß

(2.68) mit

$$(\mathcal{AT})_{mn}(z;\vec{q}\,',\vec{q}) = \sum_{\alpha=1}^{3} {}_{\beta}\langle\ \vec{q}\,',\ m\,|\,U_{\beta\alpha}(z)\,|\,n,\ \vec{q}\,\rangle_{\alpha} \tag{5.2}$$

bezeichnet. Diese etwas allgemeinere Notation ist für den speziellen Fall der Neutron-Deuteron-Streuung denkbar ungeeignet; indiziert sie doch die Übergangsamplituden nach verschiedenen Bindungszuständen, obwohl es im nuklearen Zweiteilchen-Problem nur einen einzigen Bindungszustand gibt, und unterdrückt deren Spin-Abhängigkeit, die infolge verschiedener Spin-Orientierungen der Reaktionspartner auftritt. Wie aus den Abschnitten 2.4.3 und A.4 bekannt ist, läßt sich ein Kanalzustand hier immer in der Form

$$|\,n,\ \vec{q}\,\rangle_{\gamma} = \Big|\ c_2^D, JM_J, TM_T\ \rangle_{\gamma}\ \otimes\ \ |\,\vec{q},\, s\,m_s,\ \tau\,m_{\tau}\rangle_{\gamma} \tag{5.3}$$

schreiben. Da in dieser Arbeit keine ladungsabhängigen Potentiale verwendet werden, fallen die Isospin-Indizes $M_T = 0$ und $m_\tau = \pm\frac{1}{2}$ weg. Aus diesen Gründen werden im folgenden die Übergangsamplituden mit $(\mathcal{AT})^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(z;\vec{q}\,',\vec{q})$ bezeichnet.

Um die $(\mathcal{AT})^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(z;\vec{q}\,',\vec{q})$ aus den ${}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})^{c_2^D c_2^D;k'k;\ell'\ell}_{L'L}(z;q\,',q)$ der Drehimpulszerlegung zu erhalten, muß diese rückgängig gemacht werden. Man erhält dann sofort

$$\begin{aligned}(\mathcal{AT})^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(z;\vec{q}\,',\vec{q}) = \sum_{\Gamma,M_\Gamma,\ell',m_{\ell'},\ell,m_\ell,k',m_{k'},k,m_k} & Y_{\ell' m_{\ell'}}(\hat{q}\,')\ Y_{\ell m_\ell}(\hat{q}) \\ \langle\, m_{\ell'}\ell', m_{k'}k'\,|\,\Gamma M_\Gamma, k', \ell'\,\rangle\ \langle\, m_\ell\ell, m_k k\,|\,\Gamma M_\Gamma, k, \ell\,\rangle & \langle\, m_s' s, M_J' J\,|\,k' m_{k'}, J, s\,\rangle \\ \langle\, m_s s, M_J J\,|\,k m_k, J, s\,\rangle \sum_{L',L} & {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})^{c_2^D c_2^D;k'k;\ell'\ell}_{L'L}(z;q\,',q),\end{aligned} \tag{5.4}$$

wobei

$$|\,\vec{q}\,'\,| = |\,\vec{q}\,| = Q \tag{5.5}$$

immer der On-Shell-Impuls im CM-System sowie J=1 und s=$\frac{1}{2}$ ist.

Dieser Ausdruck läßt sich noch vereinfachen, wenn man Translations- und Rotationsinvarianz des Dreikörper-Problems berücksichtigt. Sie eröffnen die Möglichkeit, einige der vier Raumwinkel $\hat{q}\,' = (\Theta, \Phi)$ und $\hat{q} = (\theta, \phi)$ von auslaufendem und einlaufendem Neutron bezogen auf ein einmal fest gewähltes Koordinatensystem geeignet festzulegen. Die Translationsinvarianz erlaubt es, den Schwerpunkt des Dreikörper-Systems in den Nullpunkt des Koordinatensystems zu legen. Die Rotationsinvarianz ermöglicht es, das Dreiteilchensystem so zu drehen, daß der Impuls des einlaufenden Neutrons genau auf der z-Achse des Koordinatensystem liegt und in deren Richtung zeigt, also ist $\theta = 0$ und $\phi = 0$. Die verbleibende Drehinvarianz um die z-Achse gestattet es, für das Neutron $\Phi = 0$ zu setzen. Damit läßt sich die Übergangsamplitude (5.4) des Neutrons in die Form (der Übersichtlichkeit halber wird hier und im folgenden $(\mathcal{AT})^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(z;Q,\Theta,\Phi=0) = (\mathcal{AT})^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(z;Q,\Theta)$ gesetzt)

$$
\begin{aligned}
(\mathcal{AT})^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(z;Q,\Theta) = & \sum_{\Gamma, M_\Gamma, \ell', m_{\ell'}, \ell, k', m_{k'}, k, m_k} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\, Y_{\ell' m_{\ell'}}(\Theta,0) \\
\langle\, m_{\ell'}\ell', m_{k'}k' \,|\, \Gamma M_\Gamma, k', \ell' \,\rangle\, & \langle\, 0\ell, m_k k \,|\, \Gamma M_\Gamma, k, \ell \,\rangle \langle\, m_s' s, M_J' J \,|\, k' m_{k'}, J, s \,\rangle \\
& \langle\, m_s s, M_J J \,|\, k m_k, J, s \,\rangle \sum_{L', L} {}^{\Gamma, I}(\mathcal{AT})^{c_2^D c_2^D; k'k; \ell'\ell}_{L'L}(z;Q,Q),
\end{aligned}
\tag{5.6}
$$

bringen, wobei die Übergangsamplituden offenbar nur noch Funktionen des Betrags des Neutronen-On-Shell-Impulses Q, des Streuwinkels Θ und der Energie z=E+i0 sind. Dabei ist der Streuwinkel Θ durch $\cos\Theta = \frac{\vec{q}' \cdot \vec{e}_z}{|\vec{q}' \cdot \vec{e}_z|}$ gegeben.

5.2 Streuamplitude und Wirkungsquerschnitte

Ganz analog zum Zweiteilchen-Streuproblem erhält man aus den Übergangsamplituden (5.4) die Streuamplituden der Neutron-Deuteron-Streuung

$$
\mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;Q,\Theta) = -\,(2\pi)^2\; M\, (\mathcal{AT})^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;Q,\Theta), \tag{5.7}
$$

M=$\frac{2}{3}$ ist hier die reduzierte Masse des Neutrons (2.9). Der Faktor $(2\pi)^2 M$, der die Übergangs- und Streuamplituden unterscheidet, berücksichtigt nur die einfallende Teilchenstromdichte. Mikroskopisch gesehen wird durch $\left|(\mathcal{AT})^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;Q,\Theta)\right|^2$ die Wahrscheinlichkeit dafür angegeben, daß im Raumwinkel Θ ein Neutron mit der Spin-Orientierung m_s' und im Raumwinkel $\pi-\Theta$ ein Deuteron mit der Spin-Orientierung M_J' gemessen werden kann, falls im Eingangskanal die entsprechenden Spin-Orientierungen m_s bzw. M_J waren. Bekanntlich gibt der differentielle Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma^{pol}}{d\Omega}(E;\Theta,M_J',m_s')$ die Anzahl der Neutronen mit fester Spinorientierung m_s' an, die in den Raumwinkel $d\Omega$ gestreut werden, vorausgesetzt der einfallende Neutronenstrahl und das Deuterium-Target sind vollständig polarisiert (alle einfallende Neutronen haben dieselbe Spin-Orientierung m_s und alle einfallenden Deuteronen dasselbe M_J). Zwischen der Streuamplitude $\mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;Q,\Theta)$ und diesem differentiellen Wirkungsquerschnitt besteht der Zusammenhang

$$
\frac{d\sigma^{pol}}{d\Omega}(E;\Theta,M_J',m_s') = \left|\mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;Q,\Theta)\right|^2; \tag{5.8}
$$

Man erhält den Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}(E;\Theta,M_J',m_s')$ bei gleicher einfallender Teilchenstromdichte, jetzt jedoch einen vollständig unpolarisierten einfallenden Teilchenstrahl vorausgesetzt (d.h. alle möglichen Spinorientierungen m_s und M_J treten gleich häufig auf), durch Mittelung über alle Orientierungen m_s und M_J

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(E;\Theta,M_J',m_s') = \frac{1}{(2s+1)(2J+1)}\,(2\pi)^4\,M^2 \sum_{m_s,M_J} \left|(\mathcal{A}\mathcal{T})^{m_s'm_s}_{M_J'M_J}(E+i0;Q,\Theta)\right|^2 = \frac{1}{6}\,(2\pi)^4\,\frac{4}{9} \sum_{m_s,M_J} \left|(\mathcal{A}\mathcal{T})^{m_s'm_s}_{M_J'M_J}(E+i0;Q,\Theta)\right|^2 . \tag{5.9}$$

Hier ist s=$\frac{1}{2}$ und J=1 und M=$\frac{2}{3}$ gesetzt worden. Der differentielle elastische Wirkungsquerschnitt für einen mit unbekannter Polarisation auslaufenden Strahl ergibt sich daraus durch Summation über alle auslaufenden Spinorientierungen

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(E;\Theta) = \frac{1}{6}\,(2\pi)^4\,\frac{4}{9} \sum_{m_s',M_J'} \sum_{m_s,M_J} \left|(\mathcal{A}\mathcal{T})^{m_s'm_s}_{M_J'M_J}(E+i0;Q,\Theta)\right|^2 . \tag{5.10}$$

Für den totalen elastischen Wirkungsquerschnitt σ, den man aus (5.10) durch Integration über den Raumwinkel

$$\sigma(E) = \int d\Omega\,\frac{d\sigma}{d\Omega} \tag{5.11}$$

erhält, ergibt sich dann

$$\begin{aligned}\sigma(E) = \frac{1}{6}\,(2\pi)^5\,\frac{4}{9} &\sum_{\Gamma,M_\Gamma} \sum_{\ell',m_{\ell'}} \sum_{\ell} \sum_{k',m_{k'}} \sum_{k,m_k} \sum_{M_J,m_s} \sum_{M_J',m_s'} \sum_{\hat\Gamma,M_{\hat\Gamma}} \sum_{\hat\ell,\hat k' m_{\hat k'}} \sum_{\hat k,m_{\hat k}} \\ &\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{2\hat\ell+1}{4\pi}}\langle\, m_{\ell',m_{k'}k'},\ell' \,|\, \Gamma M_\Gamma, k', \ell' \,\rangle\;\langle\, 0\ell, m_k k \,|\, \Gamma M_\Gamma, k, \ell \,\rangle \\ &\langle\, m_{\ell'}\ell', m_{\hat k'}\hat k', \,|\, \hat\Gamma M_{\hat\Gamma}, \hat k', \ell' \,\rangle\;\langle\, 0\hat\ell, m_{\hat k} k \,|\, \hat\Gamma M_{\hat\Gamma}, k, \hat\ell \,\rangle \\ &\langle\, m_s s, M_J J \,|\, k m_k, J, s \,\rangle\,\langle\, m_s' s, M_J' J \,|\, k' m_{k'}, J, s \,\rangle \\ &\langle\, m_s s, M_J J \,|\, \hat k m_{\hat k}, J, s \,\rangle\,\langle\, m_s' s, M_J' J \,|\, \hat k' m_{\hat k'}, J, s \,\rangle \\ &\sum_{L',L} \sum_{\hat L',\hat L} {}^{\Gamma,I}(\mathcal{A}\mathcal{T})^{c_2^D c_2^D;k'k;\ell'\ell}_{L'L}(z;\vec q\,',\vec e_z), {}^{\hat\Gamma,I}(\mathcal{A}\mathcal{T}^*)^{c_2^D c_2^D;\hat k'\hat k;\hat\ell'\hat\ell}_{\hat L'\hat L}(z;Q,Q),\end{aligned} \tag{5.12}$$

Ausnutzen der Relationen [33, 34]

$$\sum_{M_J,m_s} \langle\, m_s s, M_J J \,|\, k m_k, J s \,\rangle\langle\, sJ, m_{\hat k}\hat k \,|\, J M_J, s m_s \,\rangle = \delta_{k\hat k}\,\delta_{m_k m_{\hat k}} \tag{5.13}$$

$$\sum_{m'_k, m_{\ell'}} \langle\, M_{\hat\Gamma}\hat\Gamma, k'\ell' \,|\, k' m_{k'}, \ell' m_{\ell'} \,\rangle \langle\, m_{\ell'}\ell', m'_k k' \,|\, \Gamma M_\Gamma, k', \ell' \,\rangle = \delta_{\Gamma\hat\Gamma}\, \delta_{M_\Gamma M_{\hat\Gamma}} \tag{5.14}$$

liefert

$$\begin{aligned}\sigma(E) = \frac{1}{6}\,(2\pi)^5\,\frac{4}{9} & \sum_{\Gamma, M_\Gamma \ell', \ell, k', k, m_k} \sum_{\hat\ell,} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{2\hat\ell+1}{4\pi}} \\ & \langle\, 0\ell, m_k k \,|\, \Gamma M_\Gamma, k, \ell \,\rangle \langle\, 0\hat\ell, m_k k \,|\, \Gamma M_\Gamma, k, \hat\ell \,\rangle \\ & \sum_{L', L} \sum_{\hat L', \hat L} {}^{\Gamma, I}(\mathcal{AT})^{c_2^D c_2^D; k'k; \ell'\ell}_{L'L}(z; \vec q\,', \vec e_z),\, {}^{\Gamma, I}(\mathcal{AT}^*)^{c_2^D c_2^D; k'k; \hat\ell'\hat\ell}_{\hat L'\hat L}(z; Q, Q),\end{aligned} \tag{5.15}$$

und mittels der Beziehung [33, 34]

$$\sum_{m_{j_1}} \langle\, j_2, j_1, m_{j_1} + m_{j_2} J \,|\, j_1 m_{j_1}, j_2 m_{j_2} \,\rangle \langle\, m_{j_2} j'_2, m_{j_1} j_1 \,|\, J m_{j_1} + m_{j_2}, j_1, j_2 \,\rangle = \frac{2J+1}{2j_2+1}\,\delta_{j_2 j'_2} \tag{5.16}$$

erhält man umgehend

$$\boldsymbol{\sigma(E) = 4\pi^3\,\frac{1}{27} \sum_{\Gamma, \ell', \ell, k', k} (2\Gamma + 1) \sum_{L', L} \left| {}^{\Gamma, I}(\mathcal{AT})^{c_2^D c_2^D; k'k; \ell'\ell}_{L'L}(z; Q, Q) \right|^2} \tag{5.17}$$

Die $U_{\beta\alpha}(z)$ erfüllen eine verallgemeinerte Unitaritäts-Relation, die auf der Unitarität der S-Matrix

$$S^\dagger S \;=\; S S^\dagger \;=\; 1 \tag{5.18}$$

beruht und die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit dokumentiert. Allerdings beinhaltet diese Beziehung nicht nur die Amplituden der elastischen Neutron-Deuteron-Streuung, sondern auch die des Aufbruchs (d.h. im Eingangskanal der Reaktion sind ein Neutron und ein Deuteron, im Ausgangskanal dagegen gibt es keinen Zweinukleonen-Bindungzustand mehr). Das ist folgendermaßen zu verstehen: der Dreiteilchen-Hilbertraum $\mathcal{H}$, der Eigenzustandsraum von H (2.8)

$$H = \frac{\vec p_\alpha^{\,2}}{2\mu_\alpha} + \frac{\vec q_\alpha^{\,2}}{2M_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^{3} V_\alpha,$$

enthält neben Neutron-Deuteron-Streuzuständen auch noch Dreiteilchen-Streuzustände $|\, \vec p, \vec q\,\rangle^\pm_\alpha$. Demzufolge gibt es neben elastischen Übergangsamplituden der Form ${}_\beta\langle\, \vec q\,', n \,|\, U_{\beta\alpha} \,|\, m, \vec q\,\rangle_\alpha$ auch Aufbruchsamplituden ${}_\beta\langle\, \vec q\,', \vec p\,' \,|\, U_{0\alpha} \,|\, m, \vec q\,\rangle_\alpha$, wobei die $U_{0\alpha}$ gewisse Operatoren sind, die man schon durch die $U_{\beta\alpha}$ erhalten kann. Das unterstreicht, daß der Aufbruch die Neutron-Deuteron-Streuung bestimmt. Die durch (2.8) gegebene S-Matrix muß natürlich die Aufbruchs-Wahrscheinlichkeiten ebenfalls enthalten. Demzufolge ist es nur zu verständlich, daß die Unitaritäts-Relation die Form

$$U_{\beta\alpha}(E+i0) - U_{\beta\alpha}(E-i0) = -2\pi i \sum_{\gamma=0}^{3} \sum_{r} U_{\beta\gamma}(E+i0)\, D_{\gamma,r}(E)\, U_{\gamma\alpha}(E-i0) \tag{5.19}$$

hat, wobei

$$\langle\, \vec{q}\,' \,|\, D_{\gamma,r}(E) \,|\, \vec{q}\,\rangle = \delta(\vec{q}\,' - \vec{q}) \mid r\ \rangle\, \delta\left(E - \frac{q^2}{2M} - \hat{E}_r\right) \langle\ r \mid \tag{5.20}$$

(hier sind $|\ r\ \rangle$ die Zweiteilchen-Bindungszustände) mit den Bindungsenergien $\hat{E}_r$ und

$$\langle\, \vec{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, D_{0,r}(E) \,|\, \vec{q}, \vec{p}\,\rangle = \delta(\vec{q}\,' - \vec{q})\, \delta(\vec{p}\,' - \vec{p})\, \delta\left(E - \frac{q^2}{2M} - \frac{p^2}{2\mu}\right) \tag{5.21}$$

ist. Sie wird hier nicht abgeleitet, da das Auftreten von Aufbruchs-Übergangsoperatoren den Rahmen dieser Arbeit übersteigt. Mit Hilfe dieser Relation läßt sich ein Zusammenhang zwischen der elastischen Streuamplitude in Vorwärts-Richtung und dem totalen Wirkungsquerschnitt, d.h. der Summe von elastischem Wirkungsquerschnitt und dem des Aufbruch angeben. Bezeichnet jetzt $|\ d, \vec{q}, M_J, m_s\ \rangle$ einen Kanalzustand aus Deuteron und Neutron und $|\ \vec{p}, \vec{q}, m_{s_1}, m_{s_2}, m_{s_3}\ \rangle$ einen freien Dreinukleonen-Zustand, so erhält man

$$\begin{aligned}
&\sum_{\alpha=1}^{3} \big({}_\beta\langle\, m_s', M_J', \vec{q}\,', d \,|\, U_{\beta\alpha}(E+i0) \,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s\,\rangle_\alpha \\
&\quad - {}_\beta\langle\, m_s', M_J', \vec{q}\,', d \,|\, U_{\beta\alpha}(E-i0) \,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s\,\rangle_\alpha \big) = \\
&\quad -2\pi i \sum_{\alpha,\gamma=1}^{3} \sum_{M_J'', m_s''} \int d^3q''\, {}_\beta\langle\, m_s', M_J', \vec{q}\,', d \,|\, U_{\beta\gamma}(E+i0) \,|\, d, \vec{q}\,'', M_J'', m_s''\,\rangle_\gamma \\
&\quad \delta\left(E - \frac{q''^2}{2M} - \hat{E}_D\right) {}_\gamma\langle\, m_s'', M_J'', \vec{q}\,'', d \,|\, U_{\gamma\alpha}(E-i0) \,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s\,\rangle_\alpha \\
&\quad -2\pi i \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{m_{s_1}'', m_{s_2}'', m_{s_3}''} \int d^3q''\, d^3p'' \\
&\qquad\qquad {}_\beta\langle\, m_s', M_J', \vec{q}\,', d \,|\, U_{\beta 0}(E+i0) \,|\, \vec{p}\,'', \vec{q}\,'', m_{s_1}'', m_{s_2}'', m_{s_3}'\,\rangle_0 \\
&\quad \delta\left(E - \frac{q''^2}{2M} - \frac{p''^2}{2\mu}\right) {}_0\langle\, m_{s_3}'', m_{s_2}'', m_{s_1}''\, \vec{q}\,'', \vec{p}\,'' \,|\, U_{0\alpha}(E-i0) \,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s\,\rangle_\alpha .
\end{aligned} \tag{5.22}$$

Die beiden Integrationen über q'' können wegen

$$\delta\left(E-\frac{q''^2}{2M}-\hat{E}_D\right)=$$
$$\frac{M}{\sqrt{2M(E-\hat{E}_D)}}\left[\delta\left(\sqrt{2M\left(E-\hat{E}_D\right)}-q''\right)+\delta\left(\sqrt{2M\left(E-\hat{E}_D\right)}+q''\right)\right] \tag{5.23}$$

(es bleibt anzumerken, daß $\sqrt{2M(E-\hat{E}_D)}$ =Q genau der On-Shell-Impuls (5.1) ist) und

$$\delta\left(E-\frac{q''^2}{2M}-\frac{p''^2}{2\mu}\right)=$$
$$\frac{M}{\sqrt{2M\left(E-\frac{p''^2}{2\mu}\right)}}\left[\delta\left(\sqrt{2M\left(E-\frac{p''^2}{2\mu}\right)}-q''\right)+\delta\left(\sqrt{2M\left(E-\frac{p''^2}{2\mu}\right)}+q''\right)\right] \tag{5.24}$$

zum Teil ausgeführt werden, so daß sich mit $\hat{q}''=\frac{q''}{|q''|}$ folgender Ausdruck

$$\begin{aligned}
&\sum_{\alpha=1}^{3}\left[{}_\beta\langle\, m_s', M_J', \vec{q}\,', d\,|\, U_{\beta\alpha}(E+i0)\,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s\,\rangle_\alpha\right.\\
&\quad\left.-\;{}_\beta\langle\, m_s', M_J', \vec{q}\,', d\,|\, U_{\beta\alpha}(E-i0)\,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s\,\rangle_\alpha\right]=\\
&\quad-2\pi i M Q\sum_{\alpha,\gamma=1}^{3}\sum_{M_J'',m_s''}\int d\Omega_Q\left[{}_\beta\langle\, m_s', M_J', \vec{q}\,', d\,|\, U_{\beta\gamma}(E+i0)\,|\, d, \vec{Q}, M_J'', m_s''\,\rangle_\gamma\right.\\
&\quad\left.{}_\gamma\langle\, m_s'', M_J'', \vec{Q}, d\,|\, U_{\gamma\alpha}(E-i0)\,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s\,\rangle_\alpha\right]\\
&\quad-2\pi i M Q\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{m_{s_1}'',m_{s_2}'',m_{s_3}''}\frac{1}{Q}\int d\Omega_{q''}\, d^3p''\sqrt{2M\left(E-\frac{p''^2}{2\mu}\right)}\\
&\quad{}_\beta\langle\, m_s', M_J', \vec{q}\,', d\,|\, U_{\beta 0}(E+i0)\,|\, \vec{p}\,'', |\vec{q}\,''|=\sqrt{2M\left(E-\frac{p''^2}{2M}\right)}, \hat{q}'', m_{s_1}'', m_{s_2}'', m_{s_3}''\,\rangle_0\\
&\quad{}_0\langle\, m_{s_3}'', m_{s_2}'', m_{s_1}'', |\vec{q}\,''|=\sqrt{2M\left(E-\frac{p''^2}{2M}\right)}, \hat{q}'', \vec{p}\,''\,|\, U_{0\alpha}(E-i0)\,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s\,\rangle_\alpha.
\end{aligned} \tag{5.25}$$

ergibt. Da wegen Anhang A.3 $U_{\beta\alpha}(E-i0)=U^{\dagger}_{\alpha\beta}(E+i0)$ ist, gilt offenbar

$$\begin{aligned}
&{}_\beta\langle\, m_s', M_J', \vec{q}\,', d\,|\, U_{\beta\alpha}(E-i0)\,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s\,\rangle_\alpha=\\
&{}_\alpha\langle\, m_s', M_J', \vec{q}\,', d\,|\, U^{\dagger}_{\alpha\beta}(E+i0)\,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s\,\rangle_\beta=\\
&\quad{}_\beta\langle\, m_s, M_J, \vec{q}, d\,|\, U_{\beta\alpha}(E+i0)\,|\, d, \vec{q}\,', M_J', m_s'\,\rangle^*_\alpha,
\end{aligned} \tag{5.26}$$

so daß man mit $\vec{q}\,' = \vec{q},\ M_J' = M_J,\ m_s' = m_s$ und der Feststellung, daß mit dem in Abschnitt 5.1 festgelegten Koordinatensystem genau $\hat{Q} = (\Theta, \Phi = 0)$ und

$$\sum_{\alpha=1}^{3} {}_{\beta}\langle\, m_s', M_J', \vec{q}\,', d \,|\, U_{\beta\alpha}(E+i0) \,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s \,\rangle_{\alpha} = (\mathcal{AT})_{M_J{}' M_J}^{m_s{}' m_s}(z; Q, \Theta) \tag{5.27}$$

ist, schließlich

$$\begin{aligned} &\sum_{\alpha,\gamma=1}^{3} \sum_{M_J', m_s'} \int d\Omega_Q \; {}_{\beta}\langle\, m_s, M_J, \vec{q}, d \,|\, U_{\beta\gamma}(E+i0) \,|\, d, \vec{Q}, M_J', m_s' \,\rangle_{\gamma} \\ &\quad {}_{\gamma}\langle\, m_s', M_J', \vec{Q}, d \,|\, U_{\gamma\alpha}(E-i0) \,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s \,\rangle_{\alpha} \\ &\quad = 2\pi \sum_{M_J', m_s'} \int d\Theta \, \left| (\mathcal{AT})_{M_J' M_J}^{m_s' m_s}(E+i0; Q, \Theta) \right|^2 \\ &\quad = \frac{1}{(2\pi)^4 M^2}\, \sigma(E; M_J, m_s) \end{aligned} \tag{5.28}$$

erhält. Demnach ist das erste Integral der rechten Seite von (5.25) proportional zum totalen elastischen Wirkungsquerschnitt $\sigma(E; M_J, m_s)$ des Neutron-Deuteron-Streuprozesses unter der Voraussetzung, daß der einfallende Neutronen-Strahl und das Deuterium-Target vollständig polarisiert sind.

Definiert man antisymmetrisierte Aufbruchs-Amplituden durch

$$\begin{aligned} &(\mathcal{AT_B})_{M_J, m_s}^{m_{s1}, m_{s2}, m_{s3}}(E+i0; \hat{q}\,', \vec{p}\,', \Theta) = \left[2M\left(E - \frac{p'^2}{2\mu}\right)\right]^{\frac{1}{4}} \sum_{\alpha=1}^{3} \\ &{}_0\langle\, m_{s_3}, m_{s_2}, m_{s_1}, |\vec{q}\,'| = \sqrt{2M\left(E - \frac{p'^2}{2M}\right)}, \hat{q}\,', \vec{p}\,' \,|\, U_{0\alpha}(E-i0) \,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s \,\rangle_{\alpha}, \end{aligned} \tag{5.29}$$

so wird das Doppelintegral in (5.25) zu

$$\begin{aligned} &\sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{m_{s_1}'', m_{s_2}'', m_{s_3}''} \frac{1}{Q} \int d^3q''\, d^3p'' \\ &\qquad {}_{\beta}\langle\, m_s', M_J', \vec{q}\,', d \,|\, U_{\beta 0}(E+i0) \,|\, \vec{p}\,'', \vec{q}\,'', m_{s_1}'', m_{s_2}'', m_{s_3}' \,\rangle_0 \\ &\quad \delta\left(E - \frac{q''^2}{2M} - \frac{p''^2}{2\mu}\right) {}_0\langle\, m_{s_3}'', m_{s_2}'', m_{s_1}'' \vec{q}\,'', \vec{p}\,'' \,|\, U_{0\alpha}(E-i0) \,|\, d, \vec{q}, M_J, m_s \,\rangle_{\alpha} = \\ &\quad 2\pi \sum_{m_{s1}, m_{s2}, m_{s3}} \int d\Theta \int d^3p' \,\left| (\mathcal{AT_B})_{M_J, m_s}^{m_{s1}, m_{s2}, m_{s3}}(E+i0; \hat{q}\,', \vec{p}\,', \Theta) \right|^2 \\ &\quad = \frac{1}{(2\pi)^4 M^2}\, \sigma_{\mathcal{B}}(E; M_J, m_s). \end{aligned} \tag{5.30}$$

Dieser Ausdruck ist also proportional zum totalen Aufbruchs-Wirkungsquerschnitt $\sigma_{\mathcal{B}}(E; M_J, m_s)$ der Reaktion p + d $\rightarrow$ n + n + p, wobei Neutron und Deuteron im Eingangskanal wieder als vollständig polarisiert anzusehen sind. Beide oben angeführten Proportionalitätsfaktoren sind identisch. Mittelt man in üblicher Weise über alle Spin-Orientierungen im Eingangskanal so wird aus (5.25)

$$\sum_{M_J, m_s} 2\,Im\,\left[(\mathcal{AT})^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E + i0; Q, 0)\right] = -\frac{Q}{(2\pi)^3 m^2}\,(\sigma(E) + \sigma_{\mathcal{B}})\,. \tag{5.31}$$

Nun war $(\mathcal{AT})^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E + i0; Q, 0)$ durch (5.6) gegeben. Setzt man $M_J' = M_J$ und $m_s' = m_s$, summiert über M_J und m_s, und führt die übrigen Summationen aus, so erhält man wegen (5.13) und (5.16) sofort

$$\sum_{M_J, m_s} 2\,Im\,\left[(\mathcal{AT})^{m_s m_s}_{M_J M_J}(E + i0; Q, 0)\right] = \frac{1}{4\pi}\sum_{\Gamma,k,\ell}(2\Gamma + 1)\sum_{L',L}{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})^{c_2^D c_2^D; k,k;\ell,\ell}_{L' L}(z; Q, Q), \tag{5.32}$$

so daß sich letztlich

$$\boldsymbol{\sigma_{\mathcal{T}}(E) = -\frac{1}{6}\,\frac{4\pi^2}{Q}\,2M\sum_{\Gamma,k,\ell}(2\Gamma + 1)\sum_{L',L}{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})^{c_2^D c_2^D; kk;\ell,\ell}_{L' L}(z; Q, Q)} \tag{5.33}$$

ergibt. Diese Beziehung ist eine Verallgemeinerung des wohlbekannten optischen Theorems, welches besagt, daß totaler Wirkungsquerschnitt und Vorwärts-Streuamplitude proportional zueinander sind und ist eine direkte Folge der Unitarität der S-Matrix. Im Dreiteilchen-Fall lassen sich also durch Kenntnis der elastischen Übergangsamplituden und des elastischen Wirkungsquerschnitts Aussagen über die Aufbruchsreaktion machen; inbesondere ist

$$\boldsymbol{\sigma_{\mathcal{T}}(E) = \sigma(E) + \sigma_{\mathcal{B}}(E)} \tag{5.34}$$

5.3 Der Dichtematrix-Formalismus

Da die Übergangsamplituden explizit von den Spinorientierungen m_s und M_J abhängen, enthalten sie natürlich sehr viel mehr Information über die Dynamik des Streuprozesses, als durch die bisher bestimmten Wirkungsquerschnitte wiedergegeben wird. Wie schon oben angeführt wurde, machen diese nur Aussagen für die Spezialfälle eines vollständig polarisierten bzw. vollständig unpolarisierten Neutronenstrahls und Deuteriumtargets. In einem realen Streuexperiment werden beide natürlich teilweise polarisiert sein und dieser Sachverhalt geht wesentlich in die

Dynamik ein. Um diese Abhängigkeit genauer zu erfassen, ist eine genaue Analyse im Rahmen des Dichtematrix-Formalismus notwendig. Es wird sich zeigen, daß man erst dadurch in der Lage ist, Observable zu konstruieren, die den Streuprozeß sehr sensitiv beschreiben. Letztlich die Kenntnis einer bestimmten Anzahl dieser Observablen läßt eine endgültige Bestimmung der Dynamik des Streuprozesses zu.

Nach den Regeln der Quantenmechanik wird ein System, daß sich in verschiedenen, als orthonormal vorausgesetzten reinen Zuständen $\mid \phi_n \rangle$ befinden kann, beschrieben durch den Dichteoperator [33, 30]

$$\rho = \sum_n \mid \phi_n \rangle P_n \langle \phi_n \mid , \tag{5.35}$$

wobei die P_n genau die Wahrscheinlichkeiten dafür sind, daß das System sich im Zustand $\mid \phi_n \rangle$ befindet. Es muß darauf hingewiesen werden, daß ρ normiert in dem Sinne ist, daß $tr\,\rho = 1$, da $\sum_n P_n = 1$ gilt. Diese eigentlich selbstverständliche Definition liefert die Möglichkeit, den Mittelwert einer Observablen A in diesem Zustandsgemisch, der bekanntlich durch

$$\langle A \rangle = \sum_n P_n \langle \phi_n \mid A \mid \phi_n \rangle \tag{5.36}$$

gegeben ist, in der Form

$$\langle A \rangle = tr\,\rho\, A \tag{5.37}$$

zu schreiben. Findet in dem System eine Wechselwirkung U dergestalt statt, daß Übergänge zu neuen Zuständen $\left| \bar{\phi_n} \right\rangle = U \mid \phi_n \rangle$ stattfinden, so wird das dann resultierende Zustandsgemisch durch den Dichteoperator

$$\rho' = \frac{\sum_n \left| \bar{\phi_n} \right\rangle P_n \left\langle \bar{\phi_n} \right|}{\sum_n P_n \langle \bar{\phi_n} \mid \bar{\phi_n} \rangle} \tag{5.38}$$

beschrieben, der offenbar auch in der Form

$$\rho' = \frac{U\,\rho\, U^{\dagger}}{tr\, U\,\rho\, U^{\dagger}} \tag{5.39}$$

dargestellt werden kann. Offensichtlich ist der Dichteoperator hermitesch. Ein im Spinraum reiner Zustand eines Ensembles von Teilchen mit Spin s läßt sich in der Form

$$\mid \phi_n \rangle = \sum_{m_s=-s}^{s} c^n_{m_s} \mid s, m_s \rangle \tag{5.40}$$

schreiben. Ein Matrixelement der Dichtematrix hat dann die Form

$$\langle m_s', s \mid \rho \mid s, m_s \rangle = \sum^{n} P_n\, c^n_{m_s'}\, c^{n*}_{\;m_s}. \tag{5.41}$$

Demnach ist die Dichtematrix eines Ensembles von Teilchen mit Spin s eine hermitesche (2s+1)×(2s+1)-Matrix, besitzt also wegen der Normierung $tr\,\rho = 1$ genau

$(2s+1)^2-1$ unabhängige Elemente. Diese $(2s+1)^2-1$ reellen Zahlen legen den Spinzustand des Ensembles, d.h. die *Polarisation*, eindeutig fest. Es sei darauf hingewiesen, daß diese Definition des Begriffes Polarisation im allgemeinen weit über die anschauliche Vorstellung eines dreidimensionalen Polarisationsvektors hinausgeht; das wird im folgenden noch sehr deutlich werden.

Als hermitesche (2s+1)×(2s+1)-Matrix kann die Dichtematrix durch eine reelle Linearkombination jeder hermiteschen Basis des Vektorraums aller solcher Matrizen dargestellt werden. Da der Spin ein Drehimpuls ist, sollte diese Basis insbesondere die (2s+1)-dimensionalen Darstellungen der Generatoren der Drehgruppe SU(2) enthalten. Es ist üblich, bestimmte Standardbasen zu verwenden, die die Matrixdarstellung kartesischer oder sphärischer Tensoroperatoren sind. Die Entwicklungskoeffizienten der Darstellung der Dichtematrix innerhalb solcher Standardbasen charakterisieren dann die Polarisation, sie sind genau die Erwartungswerte dieser Operatoren.

5.3.1 Dichtematrix-Formalismus für Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$

Ein nichtrelativistisches Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ wird beschrieben durch einen Spinor [33, 30]

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{5.42}$$

kann also verstanden werden als ein Gemisch der beiden Zustände $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Bei richtiger Normierung gilt selbstverständlich $|a_1|^2+|a_2|^2=1$. Der Mittelwert einer Observablen im Spinraum ist dann offenbar gegeben durch

$$\langle\, \Omega \,\rangle = \begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Omega_{11} & \Omega_{12} \\ \Omega_{21} & \Omega_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = tr\, \rho \left(\frac{1}{2}\right) \Omega \tag{5.43}$$

Durch simples Ausrechnen ergibt sich sofort

$$\rho \left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} |a_1|^2 & a_1^* a_2 \\ a_1 a_2^* & |a_2|^2 \end{pmatrix}. \tag{5.44}$$

Betrachtet man ein Ensemble von N solchen Teilchen, so wird der Erwartungswert eines Operators Ω gemittelt über das Ensemble und mit $\langle\, \bar{\Omega} \,\rangle$ bezeichnet und es ist

$$\langle\, \bar{\Omega} \,\rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \chi^{(n)\dagger}\, \Omega\, \chi^{(n)}, \tag{5.45}$$

wobei der Spinor des n-ten Teilchens durch

$$\chi^{(n)} = \begin{pmatrix} a_1^{(n)} \\ a_2^{(n)} \end{pmatrix} \tag{5.46}$$

gegeben ist. Daraus läßt sich wegen $\langle\, \bar{\Omega}\, \rangle = tr\, \rho\, \Omega$ ganz elementar die Dichtematrix

$$\rho\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{N}\begin{pmatrix} \sum_{n=1}^{N} \left|a_1^{(n)}\right|^2 & \sum_{n=1}^{N} a_1^{(n)}\, a_2^{(n)*} \\ \sum_{n=1}^{N} a_2^{(n)}\, a_1^{(n)*} & \sum_{n=1}^{N} \left|a_2^{(n)}\right|^2 \end{pmatrix} \tag{5.47}$$

ableiten. Als hermitesche 2×2-Matrix läßt sich $\rho\left(\frac{1}{2}\right)$ in einer hermiteschen Basis des vierdimensionalen Vektorraums aller hermiteschen $2\times$ 2-Matrizen entwickeln. Eine solche Basis wird durch die übliche Darstellung der Generatoren der Drehgruppe in zwei Dimensionen, nämlich den Paulimatrizen, und der Einheitsmatrix [30]

$$\sigma_x = \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{5.48}$$

geliefert. Mit Hilfe der wohlbekannten Beziehungen

$$\sigma_i^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad i\epsilon\{0,3\}, \qquad \sigma_i\, \sigma_j \ = i\, \epsilon_{ijk}\, \sigma_k \qquad tr\, \sigma_i = 0 \quad i,j,k\epsilon\{1,3\} \tag{5.49}$$

erhält man

$$tr\, \sigma_i\, \sigma_j \ = \ 2\, \delta_{ij} \tag{5.50}$$

und mit dem Ansatz

$$\rho\left(\frac{1}{2}\right) = \sum_{j=0}^{3} p_j\, \sigma_j \tag{5.51}$$

ergibt sich sofort

$$\begin{aligned} p_0 &= \langle\, \sigma_0\, \rangle = tr\, \rho\left(\frac{1}{2}\right)\, \sigma_0 = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \left|a_1^{(n)}\right|^2 + \left|a_2^{(n)}\right|^2 = 1 \\ p_1 &= \langle\, \sigma_1\, \rangle = tr\, \rho\left(\frac{1}{2}\right)\, \sigma_1 = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} 2Re\, \left(a_1^{(n)}\, a_2^{(n)*}\right) \\ p_2 &= \langle\, \sigma_2\, \rangle = tr\, \rho\left(\frac{1}{2}\right)\, \sigma_2 = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} 2Im\, \left(a_1^{(n)}\, a_2^{(n)*}\right) \\ p_3 &= \langle\, \sigma_3\, \rangle = tr\, \rho\left(\frac{1}{2}\right)\, \sigma_3 = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \left|a_1^{(n)}\right|^2 - \ \left|a_2^{(n)}\right|^2, \end{aligned} \tag{5.52}$$

so daß sich ganz allgemein

$$\boldsymbol{\rho}\left(\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\right) = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\left(\mathbf{1}_2 + \sum_{i=1}^{3} \boldsymbol{p}_i\, \boldsymbol{\sigma}_i\right) \tag{5.53}$$

schreiben läßt. Die Polarisation, d.h. die Entwicklungskoeffizienten bezüglich der Basis σ_j, $\jmath\epsilon\{0,3\}$, ist also im Falle eines Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchens genau ein dreidimensionaler Vektor.

Die entsprechenden sphärischen Operatoren sind hier folgendermaßen definiert:

$$\sigma_{0,0} = \mathbf{1}_2 \qquad \sigma_{1,\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sigma_1 \pm \sigma_2\right) \qquad \sigma_{1,0} = \sigma_3, \tag{5.54}$$

es ist offenbar

$$tr\, \sigma_{k,q}\, \sigma^{\dagger}_{k'q'} = 2\delta_{kk'}\, \delta_{qq'} \qquad \sigma^{\dagger}_{k,q} = (-1)^q\, \sigma_{k,-q} \tag{5.55}$$

und es gilt

$$\rho\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{1}_2 + \sum_{q=-1}^{1} t^{(\frac{1}{2})}_{1,q}\, \sigma^{\dagger}_{1,q}\right) \qquad t^{(\frac{1}{2})}_{1,q} = tr\, \sigma_{k,q}\, \rho\left(\frac{1}{2}\right). \tag{5.56}$$

5.3.2 Dichtematrix-Formalismus für Teilchen mit Spin 1

Bekanntermaßen wird ein Spin-1-Teilchen durch einen dreikomponentigen Vektor

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{5.57}$$

beschrieben; ganz analog zum Falle von Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen sieht man, daß die Dichtematrix eines Ensembles von N Spin-1-Teilchen die Form

$$\frac{1}{N}\begin{pmatrix} \sum_{n=1}^{N} \left|a_1^{(n)}\right|^2 & \sum_{n=1}^{N} a_2^{(n)*}\, a_1^{(n)} & \sum_{n=1}^{N} a_3^{(n)*}\, a_1^{(n)} \\ \sum_{n=1}^{N} a_1^{(n)*}\, a_2^{(n)} & \sum_{n=1}^{N} \left|a_2^{(n)}\right|^2 & \sum_{n=1}^{N} a_3^{(n)*}\, a_2^{(n)} \\ \sum_{n=1}^{N} a_1^{(n)*}\, a_3^{(n)} & \sum_{n=1}^{N} a_2^{(n)*}\, a_3^{(n)} & \sum_{n=1}^{N} \left|a_3^{(n)}\right|^2 \end{pmatrix} \tag{5.58}$$

besitzt. Es läßt sich zeigen [30, 32], daß folgende hermiteschen und spurlosen Matrizen

$$\begin{aligned} \mathbf{1}_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \mathcal{P}_x = S_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathcal{P}_y = S_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\mathcal{P}_z = S_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
\mathcal{P}_{xy} = 3\,S_x S_y &= \frac{3i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
\mathcal{P}_{yz} = 3\,S_y S_z &= \frac{3i}{\sqrt{8}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\
\mathcal{P}_{xz} = 3 S_x S_z &= \frac{1}{\sqrt{8}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\
\mathcal{P}_{xx} = 3 S_x S_x - 2\,\mathbf{1}_3 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 3 \\ 0 & 2 & 0 \\ 3 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
\mathcal{P}_{yy} = 3 S_y S_y - 2\ \mathbf{1}_3 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & -3 \\ 0 & 2 & 0 \\ -3 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
\mathcal{P}_{zz} = 3 S_z S_z - 2\,\mathbf{1}_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{5.59}
$$

den Raum aller hermiteschen 3×3-Matrizen aufspannen. Hier sind die S_x, S_y und S_z die dreidimensionalen Darstellungen der Generatoren der SU(2)[13]. Da eine Basis dieses Raumes aus genau neun Matrizen besteht, sind offenbar die $\mathcal{P}$ aus (5.59) linear abhängig. In der Tat gilt

$$
\mathcal{P}_{xx} + \mathcal{P}_{yy} + \mathcal{P}_{zz} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{5.60}
$$

so daß bspw. die $\mathcal{P}_x$, $\mathcal{P}_y$, $\mathcal{P}_z$, $\mathcal{P}_{xy}$, $\mathcal{P}_{xz}$, $\mathcal{P}_{yz}$, $\mathcal{P}_{xx} - \mathcal{P}_{yy}$ und $\mathcal{P}_{zz}$ eine Basis bilden. Bei geeigneter Normierung, nämlich

$$
\begin{aligned}
\Omega_1 &= \mathbf{1}_3 \\
\Omega_2 &= \sqrt{\frac{3}{2}} \mathcal{P}_x \\
\Omega_3 &= \sqrt{\frac{3}{2}} \mathcal{P}_y
\end{aligned}
$$

[13]In Anhang A.9 findet sich eine kurze Zusammenfassung der Konstruktionweise der Matrizen $\mathcal{P}$.

$$
\begin{aligned}
\Omega_4 &= \sqrt{\frac{3}{2}}\mathcal{P}_z \\
\Omega_5 &= \sqrt{\frac{2}{3}}\mathcal{P}_{xy} \\
\Omega_6 &= \sqrt{\frac{2}{3}}\mathcal{P}_{yz} \\
\Omega_7 &= \sqrt{\frac{2}{3}}\mathcal{P}_{xz} \\
\Omega_8 &= \sqrt{\frac{1}{6}}(\mathcal{P}_{xx} - \mathcal{P}_{yy}) \\
\Omega_9 &= \sqrt{\frac{1}{2}}\mathcal{P}_{zz}
\end{aligned}
\tag{5.61}
$$

gilt in Analogie zu (5.50)

$$
tr\,\Omega_i\,\Omega_j = 3\delta_{ij} \tag{5.62}
$$

und die Dichtematrix $\rho(1)$ läßt sich dann in der Form

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\rho}(\mathbf{1}) = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{3}}\Big\{ & \mathbf{1}_3 + \frac{\mathbf{3}}{\mathbf{2}}(\boldsymbol{P}_x\boldsymbol{\mathcal{P}}_x + \boldsymbol{P}_y\boldsymbol{\mathcal{P}}_y + \boldsymbol{P}_z\boldsymbol{\mathcal{P}}_z) + \frac{\mathbf{2}}{\mathbf{3}}(\boldsymbol{P}_{xy}\boldsymbol{\mathcal{P}}_{xy} + \boldsymbol{P}_{yz}\boldsymbol{\mathcal{P}}_{yz} + \boldsymbol{P}_{xz}\boldsymbol{\mathcal{P}}_{xz}) \\
& + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{6}}(\boldsymbol{P}_{xx} - \boldsymbol{P}_{yy})(\boldsymbol{\mathcal{P}}_{xx} - \boldsymbol{\mathcal{P}}_{yy}) + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\boldsymbol{P}_{zz}\boldsymbol{\mathcal{P}}_{zz}\Big\}
\end{aligned}
\tag{5.63}
$$

schreiben. Wieder sind die kartesischen Polarisationskomponeneten P_{i0} und P_{ij} durch

$$
P_{i0} = \langle\,\mathcal{P}_i\,\rangle = tr\,\rho(1)\,\mathcal{P}_i \qquad \text{und} \qquad P_{i,j} = \langle\,\mathcal{P}_{ij}\,\rangle = tr\,\rho(1)\,\mathcal{P}_{ij} \tag{5.64}
$$

gegeben. Hier gilt folgende vereinheitlichende Notation:

$$
\begin{array}{lllllllll}
P_{10} & = & P_x & P_{20} & = & P_y & P_{30} & = & P_z \\
P_{12} & = & P_{xy} & P_{23} & = & P_{yz} & P_{13} & = & P_{xz} \\
P_{11} & = & P_{xx} & P_{22} & = & P_{yy} & P_{33} & = & P_{zz}.
\end{array}
\tag{5.65}
$$

Es ist offensichtlich, daß die neun Größen P_x, P_y, P_z, P_{xy}, P_{yz}, P_{xz}, P_{xx}, P_{yy} und P_{zz} die Polarisation festlegen; im Falle eines Spin-1-Teilchens existiert also zusätzlich zur -schon anschaulich- wohlbekannten Vektorpolarisation eine Tensorpolarisation, deren Existenz nicht mehr anschaulich, sondern nur im Rahmen eines quantenmechanischen Formalismus begründet werden kann.

Der Vollständigkeit halber sollen hier noch die entsprechenden sphärischen $\tau_{k,q}$ Operatoren, ausgedrückt durch die kartesischen angegeben werden. Es besteht folgender Zusammenhang:

$$
\begin{aligned}
\tau_{0,0} &= \mathbf{1}_3 \\
\tau_{1,\pm 1} &= \mp\frac{\sqrt{3}}{2}\left(\mathcal{P}_x \pm \mathcal{P}_y\right) \\
\tau_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{2}}\mathcal{P}_z \\
\tau_{2,\pm 2} &= \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(\mathcal{P}_{xx} - \mathcal{P}_{yy} \pm 2i\mathcal{P}_{zz}\right) \\
\tau_{2,\pm 1} &= \mp\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\mathcal{P}_{xz} \pm i\mathcal{P}_{yz}\right) \\
\tau_{2,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\mathcal{P}_{zz}
\end{aligned}
\tag{5.66}
$$

Dann ist

$$tr\,\tau_{k,q}\,\tau^{\dagger}_{k',q'} = 3\,\delta_{kk'}\,\delta_{qq'} \tag{5.67}$$

ebenso wie

$$\tau_{k,q} = (-1)^q\,\tau^{\dagger}_{k,-q}. \tag{5.68}$$

Wiederum gilt

$$\rho(1) = \frac{1}{3}\left(\tau^{\dagger}_{0,0} + \sum_{k=1}^{2}\sum_{q=-k}^{k} t^{(1)}_{k,q}\,\tau^{\dagger}_{k,q}\right) \tag{5.69}$$

mit

$$t^{(1)}_{k,q} = tr\,\rho(1)\,\tau_{k,q}. \tag{5.70}$$

5.3.3 Die Dichtematrix für ein Ensemble von Neutron-Deuteron-Systemen

Gemäß den Regeln der Quantenmechanik erhält man die Dichtematrix eines Ensembles von Neutron-Deuteron-Systemen durch Bildung des Tensorproduktes der Dichtematrizen der Konstituenten.

$$\rho^{nd} =: \rho = \rho(\frac{1}{2}) \otimes \rho(1) \tag{5.71}$$

Mit den abkürzenden Bezeichnungen

$$\mathcal{Z}_{i;jk} = \sigma_i \otimes \mathcal{P}_{jk} \qquad \text{und} \qquad z_{i;jk} = p_i\,P_{j,k} \tag{5.72}$$

ergibt sich dann sofort

$$\rho = \frac{1}{6} \sum_{i,j,k} z_{i;jk}\, \mathcal{Z}_{i;jk}, \tag{5.73}$$

wobei wieder

$$z_{i;jk} = tr\, \rho\, \mathcal{Z}_{i;jk} \tag{5.74}$$

ist. Im Eingangskanal, wo $tr\, \rho(\frac{1}{2}) = tr\, \rho(1) = 1$ ist, gilt also offenbar $tr\, \rho^{nd} = 1$.

5.3.4 Die Reaktionsgleichung

Im Ausgangskanal läßt sich die Dichtematrix ρ' wieder in die Form (5.73) bringen, allerdings muß die richtige Normierung gewährleistet werden; es ist

$$\rho' = \frac{1}{6} \frac{\sum\limits_{i',j',k'} z'_{i';j'k'}\, \mathcal{Z}_{i';j'k'}}{tr\, \rho'} \tag{5.75}$$

und es gilt wieder

$$z'_{i';j'k'} = \frac{tr\, \rho'\, \mathcal{Z}_{i';j'k'}}{tr\, \rho'}. \tag{5.76}$$

Sei jetzt $\mathcal{M}$ derjenige Operator, der in der Kanalzustandsbasis (5.3) als Matrixelemente genau die Streuamplituden (5.7) besitzt

$$\langle\, m'_s, M'_J, Q\vec{e}\,', c_2^D \,|\, \mathcal{M} \,|\, c_2^D, Q\vec{e_z}, M_J, m_s \,\rangle = \mathcal{M}^{m_s{}'m_s}_{M_J{}'M_J}\,(E + i0; Q, \Theta)\,, \tag{5.77}$$

wobei Q der Betrag des On-Shell-Impulses im CM-System ist und $\vec{e}_z \cdot \vec{e}\,' = \cos\Theta$. Dann lautet der Dichteoperator im Ausgangskanal offensichtlich gemäß (5.39)

$$\rho' = \frac{\mathcal{M}\, \rho\, \mathcal{M}^\dagger}{tr\, \mathcal{M}\, \rho\, \mathcal{M}^\dagger} \tag{5.78}$$

und für die Observablen im Ausgangskanal ergibt sich

$$\begin{aligned} z'_{l';m'n'} &= tr\, \rho' \mathcal{Z}_{l';m'n'} = \frac{tr\, \mathcal{M}\, \rho\, \mathcal{M}^\dagger\, \mathcal{Z}_{l';m'n'}}{tr\, \mathcal{M}\, \rho\, \mathcal{M}'} \\ &= \frac{1}{6} \frac{\sum\limits_{i,j,k} z_{i;jk}\, tr\, \mathcal{M}\, \mathcal{Z}_{i;jk}\, \mathcal{M}^\dagger\, \mathcal{Z}_{l';m'n'}}{\sum_{i,j,k} z_{i;jk}\, tr\, \mathcal{M}\, \mathcal{Z}_{i;jk} \mathcal{M}^\dagger} \\ &= \frac{1}{6} \frac{\sum\limits_{i,j,k} z_{i;jk}\, K^{l';m'n'}_{i;jk}}{\sum_{i,j,k} z_{i;jk}\, K_{i;jk}}, \end{aligned} \tag{5.79}$$

wobei

$$K_{i;jk} = \frac{tr\, \mathcal{M}\, \mathcal{Z}_{i;jk}\, \mathcal{M}^\dagger}{tr\, \mathcal{M} \mathcal{M}^\dagger} \tag{5.80}$$

und

$$\boldsymbol{K}_{i;jk}^{l';m'n'} = \frac{\boldsymbol{tr}\,\boldsymbol{\mathcal{M}}\,\boldsymbol{\mathcal{Z}}_{i;jk}\,\boldsymbol{\mathcal{M}}^{\dagger}\,\boldsymbol{\mathcal{Z}}_{l';m'n'}}{\boldsymbol{tr}\,\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{M}}^{\dagger}} \tag{5.81}$$

ist. Die $K_{i;jk}^{l';m'n'}$ sind diejenigen Größen, die die Struktur des Streuprozesses bestimmen und werden als Polarisationsobservable bezeichnet; die $K_{i;jk}$ legen nur die Normierung von ρ' fest. Man sieht das, wenn man (5.79) in der Form (hier muß berücksichtigt werden, daß $\rho = \rho^{nd} = \frac{1}{6}\ \mathbf{1}_6$ ist)

$$\begin{aligned} z'_{l';m'n'}\,tr\,\mathcal{M}\,\rho\,\mathcal{M}^{\dagger} &= \frac{1}{6}\left(tr\,\mathcal{M}\,\mathcal{M}^{\dagger}\right)\sum_{i,j,k} z_{i;jk}\,K_{i;jk}^{l';m'n'} \\ &= \frac{d\sigma}{d\Omega}\sum_{i,j,k} z_{i;jk}\,K_{i;jk}^{l';m'n'} \end{aligned} \tag{5.82}$$

schreibt. Die $K_{i;jk}^{l';m'n'}$ müssen demnach experimentell bestimmt werden, indem geeignete Observable (manchmal auch als Momente bezeichnet) $z'_{l';m'n'}$ gemessen werden. Da die $\mathcal{Z}_{l';m'n'}$ in die $K_{i;jk}^{l';m'n'}$ quadratisch eingehen und die $\mathcal{Z}_{l';m'n'}$ Tensorprodukte, gebildet aus den $(2s+1)^2\ \sigma_l$ und den $(2J+1)^2\ \mathcal{P}_{ij}$, sind, erhält man offenbar $\left[(2s+1)^2(2J+1)^2\right]^2 = 36^2 = 1296$ verschiedene $K_{i;jk}^{l';m'n'}$. Allerdings sind die meisten dieser Größen nicht unabhängig voneinander, sondern es lassen sich mit Hilfe von Invarianz-Überlegungen Beziehungen zwischen ihnen herstellen. Bevor jedoch diese Invarianzen untersucht werden, müssen die Koordinaten-Systeme, in denen die Rechnungen bzw. die Experimente durchgeführt werden, eindeutig festgelegt werden.

5.3.5 Koordinatensysteme

Die mikroskopischen Neutron-Deuteron-Streurechnungen werden im Schwerpunktssystem der drei Teilchen durchgeführt. Da die theoretisch bestimmten $K_{i;jk}^{l';m'n'}$ überwiegend Polarisationstransfer-Koeffizienten sind, wird das CM-System gemäß der Madison-Konvention orientiert. Dort ist vereinbart worden, daß bei allen Reaktionen der Art $A(\vec{a},\vec{b})B$, bspw. ${}^2H(\vec{n},\vec{n})^2H$ oder ${}^2H(\vec{n},\vec{d})n$ die z-Achse in Richtung des einlaufenden Teilchens, dessen Polarisation bekannt ist, gelegt wird, also $\vec{e}_z = \frac{\vec{Q}}{|\vec{Q}|}$, wobei $\vec{Q}$ der CM-Impuls des einlaufenden Neutrons ist. Die y-Achse wird dann durch $\vec{e}_y = \frac{\vec{Q}\times\vec{Q}'_p}{|\vec{Q}\times\vec{Q}'_p|}$ festgelegt, wobei $\vec{Q}'_p$ der CM-Impuls desjenigen auslaufenden Teilchen ist, dessen Polarisation ebenfalls bestimmt wurde. Die x-Achse schließlich wird so gewählt, daß man ein rechtshändiges Koordinatensystem erhält. Die vier Einzelsysteme, die nach der Madison-Konvention jedem Reaktionspartner im Eingangswie im Ausgangskanal zugeordnet werden, haben alle dieselbe Orientierung wie das CM-System.

Nun ist das CM-System denkbar schlecht für experimentelle Beobachtungen geeignet, diese werden im Labor und also im Laborsystem ausgeführt, in dem das Deuteron vor dem Stoß ruht. Dementsprechend werden experimentelle Ergebnisse auch in Laborkoordinaten veröffentlicht, so daß die Streuamplituden in dieses Koordinatensystem umzurechnen sind. Gemäß der Madison-Konvention wird dieser Konfiguration ein Standard-Laborsystem, bestehend aus vier Einzelsystemen für jeden der beteiligten Reaktionspartner im Eingangs- wie im Ausgangskanal, zugeordnet. Diese Einzelsysteme werden wie folgt konstruiert: Die z-Achse eines jeden Systems zeigt stets in die Impulsrichtung des jeweiligen Teilchens. Die y-Achse ist für alle vier Systeme gleich und wird durch $\vec{e}_y = \frac{\vec{k}_n \times \vec{k}_p'}{|\vec{k}_n \times \vec{k}_p'|}$ geliefert, wobei $\vec{k}_n$ der Impuls des einlaufenden Neutrons und $\vec{k}_p'$ der Impuls des auslaufenden Teilchens ist, dessen Polarisation bestimmt wurde. Die x-Achse wird jeweils so festgelegt, daß man ein rechtshändiges Koordinatensystem erhält. Eine graphische Darstellung des CM- und des Laborsystems für den Fall, daß das auslaufende Neutron analysiert wird, findet sich in in Abbildung 5 und für den Fall, daß das Rückstoßdeuteron analysiert wird,

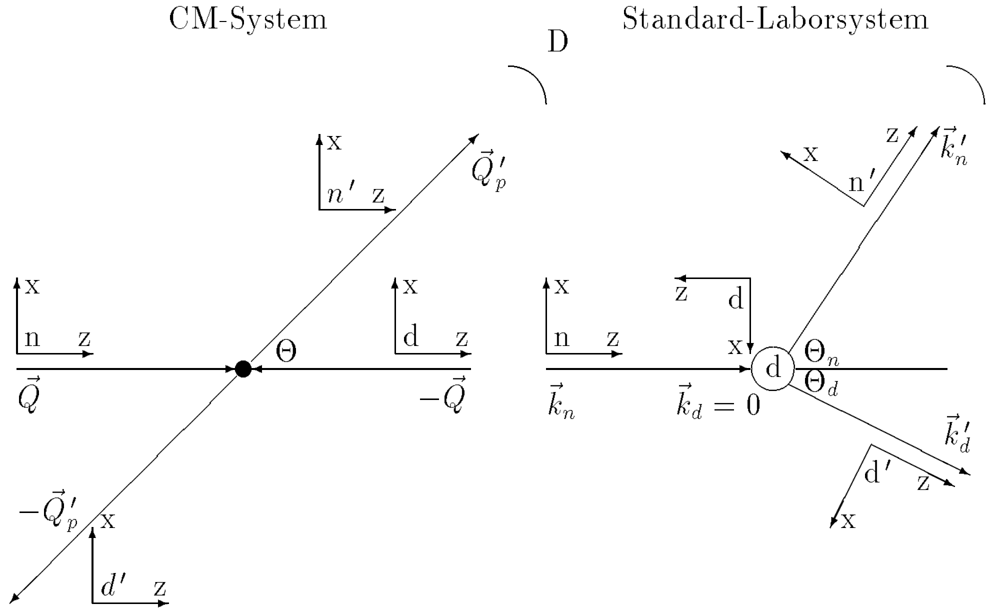

Abbildung 5: CM-System und Standard-Laborsystem für analysiertes auslaufendes Neutron.

in Abbildung 6. In beiden Fällen markiert D den analysierenden Detektor, die y-Achse ist orthogonal zur Papierebene und zeigt aus ihr heraus. Beide graphische Darstellungen zeigen denselben Streuvorgang; nur die Detektorplätze sind verschieden. Wie man sofort sieht, entspricht der Übergang von der Analyse des auslaufenden Neutrons zur Analyse des auslaufenden Deuterons genau einer Drehung um die z-Achse mit dem Drehwinkel π. Das bedeutet, daß die Streuamplituden des Deuterons gegeben sind durch

$$ {}^{D}\mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;Q,\Theta) = -\,(2\pi)^2\; M\,(\mathcal{AT})^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;Q,\Theta,\Phi=\pi). \qquad (5.83) $$

Im Laborsystem trifft das Neutron mit dem Impuls k_n auf das ruhende Deuteron, nach dem Stoßprozess laufen sie mit den Impulsen k_n' und k_d' und den Streuwinkeln Θ^n und Θ^d aus. Nun stehen der CM-Streuwinkel Θ und die Laborsystem-Streuwinkel Θ_n, Θ_D in folgendem Zusammenhang [35]

$$ \tan\Theta_n = \frac{\sin\Theta}{\cos\Theta + \frac{m_n}{m_d}} \qquad \Theta_d = \frac{\pi-\Theta}{2}, \qquad (5.84) $$

wobei m_n die Neutronenmasse und m_d die Masse des Deuterons ist. Bekanntlich

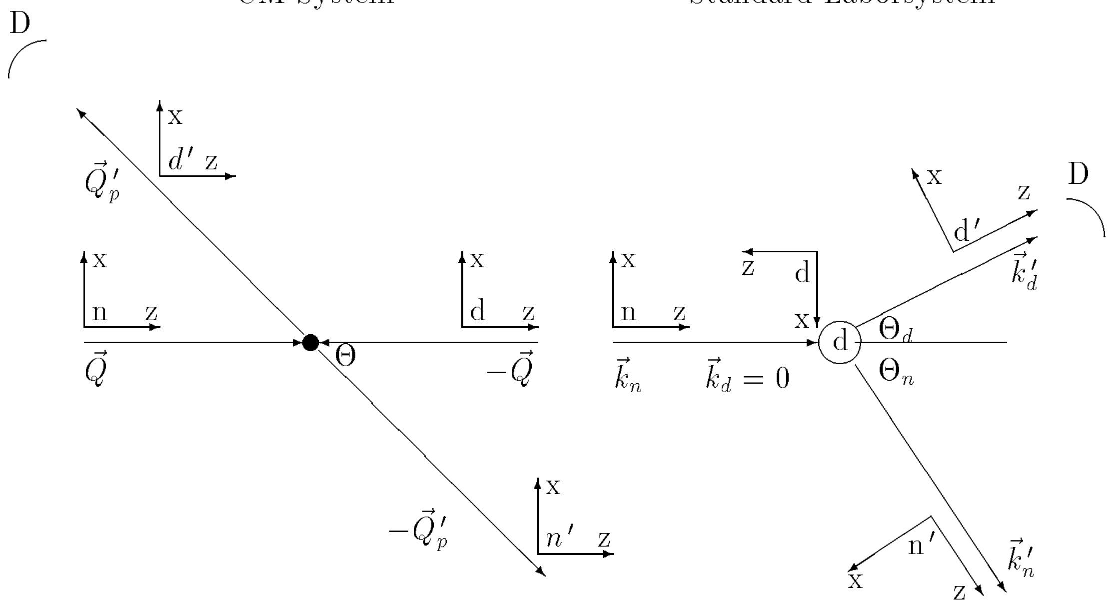

Abbildung 6: CM-System und Standard-Laborsystem für analysiertes auslaufendes Deuteron.

ist (nicht-relativistisch) $\frac{m_n}{m_d} = \frac{1}{2}$. Bezeichnet $\mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;k_n,k_n',\Theta_n)$ die Neutron-Streuamplitude im globalen Laborsystem (das aus dem CM-System ausschließlich durch eine Galilei-Transformation hervorgeht), so gilt wegen der Galilei-Invarianz offenbar

$$ \mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;k_n',k_n,\Theta_n) = \mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;Q,\Theta). \qquad (5.85) $$

Ein ganz analoges Ergebnis erhält man für die Deuteron-Streuamplituden.

Aus Abbildung 7 geht hervor, daß man das Standard-Laborsystem, d.h. die vier Koordinatensysteme, die jedem der beiden Reaktionspartner im Eingangs- wie im

Ausgangskanal zugeordnet werden, durch geeignete Rotationen aus dem globalen Laborsystem erhalten kann. Diese Transformation betrifft offenbar nur die Spinzustände $\mid M_J, m_s \rangle$ und $|M_J', m_s'\rangle$. Bekanntlich [33, 34] ist der Drehoperator für eine Rotation um die Euler-Winkel (α, β, γ) durch

$$\mathcal{R}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i\,\alpha\, J_z)\,\exp(-i\,\beta\, J_y)\,\exp(-i\,\gamma\, J_z) \tag{5.86}$$

gegeben und das Ergebnis seiner Anwendung auf Drehimpuls-Basiszustände erhält man sofort die Rotationsmatrizen, d.h. seine irreduzible Darstellung in dieser Basis:

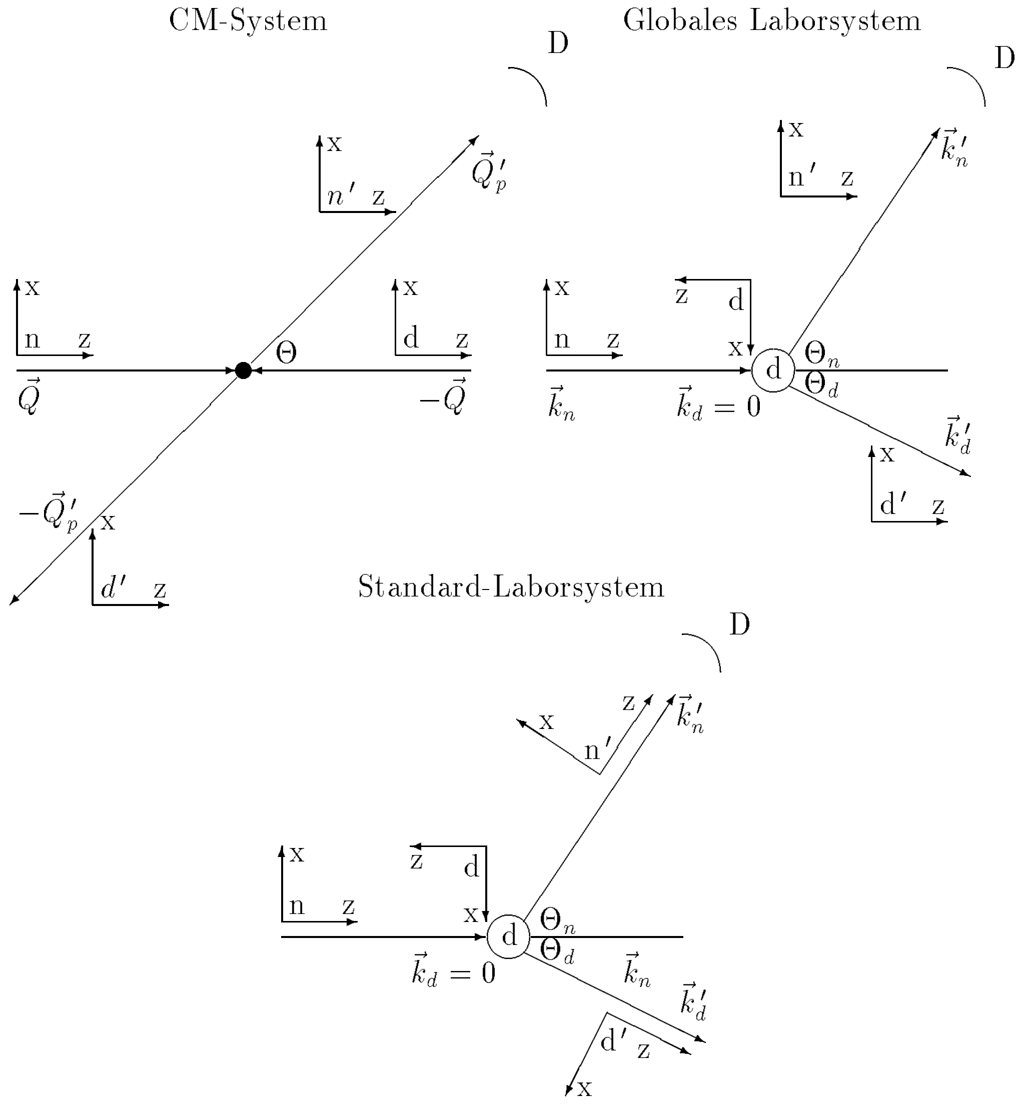

Abbildung 7: CM-System, globales Laborsystem und Standard-Laborsystem für analysiertes auslaufendes Neutron.

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(\alpha,\beta,\gamma)\mid j,m_j\,\rangle &= \sum_{m_j'=-j}^{j}\Big|\, j,m_j'\rangle\,\langle\, m_j',j\,|\,\mathcal{R}(\alpha,\beta,\gamma)\,|\,j,m_j\,\rangle \\ &= \sum_{m_j'=-j}^{j}\Big|\, j,m_j'\,\rangle\mathcal{D}^{j}_{m_j'm_j}(\alpha,\beta,\gamma), \end{aligned} \tag{5.87}$$

bzw.

$$\begin{aligned}\langle\, m_j,j\mid\mathcal{R}^{\dagger}(\alpha,\beta,\gamma) &= \sum_{m_j'=-j}^{j}\langle\, m_j,j\,|\,\mathcal{R}^{\dagger}(\alpha,\beta,\gamma)\,|\,j,m'\,\rangle\,\langle\, m_j',j\,\Big| \\ &= \sum_{m_j'=-j}^{j}{\mathcal{D}^{j}}^{\dagger}_{m_jm_j'}(\alpha,\beta,\gamma)\,\langle\, m_j',j\,\Big|, \end{aligned} \tag{5.88}$$

Hierbei sind die $\mathcal{D}^{j}_{m_j'm_j}(\alpha,\beta,\gamma)$ durch

$$\mathcal{D}^{j}_{m_j'm_j}(\alpha,\beta,\gamma)=e^{-i\,\alpha\,m_j'}\,r^{j}_{m'm_j}\,e^{-i\,\gamma\,m}\qquad r^{j}_{m_j'm_j}=\langle\, j,m_j'\,|\exp(-i\,\beta\,J_y)\,|\,j,m_j\,\rangle \tag{5.89}$$

gegeben. In den Fällen j=$\frac{1}{2}$ und j=1 erhält man für die Rotationsmatrizen explizit [33, 34]

$$r^{\frac{1}{2}}_{m_{\frac{1}{2}}'m_{\frac{1}{2}}}(\beta)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix} \tag{5.90}$$

und

$$r^{1}_{M_1'M_1}(\beta)=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}(1+\cos\beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \frac{1}{2}(1-\cos\beta)\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \cos\beta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta\\ \frac{1}{2}(1-\cos\beta) & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \frac{1}{2}(1+\cos\beta)\end{pmatrix}. \tag{5.91}$$

Insbesondere nehmen sie bei einer Drehung um die y-Achse mit dem Drehwinkel π die besonders einfache Form

$$r^{j}_{m_j'm_j}(\pi)=(-1)^{j+m}\,\delta_{m,-m'} \tag{5.92}$$

an. Außerdem gilt [34]

$$r^{j}_{m_j'm_j}(0) = \delta_{m_j'm_j}$$

$$
\begin{aligned}
(r^{-1})^{j}_{m'_j m_j}(\beta) &= r^{j}_{m'_j m_j}(-\beta) = r^{j}_{m_j m'_j}(\beta)\\
r^{j}_{m'_j m_j}(\pi-\beta) &= (-1)^{j-m'_j}\, r^{j}_{-m'_j m_j}(-\beta)\\
r^{j}_{m'_j m_j}(\beta) &= (-1)^{m'_j-m_j}\, r^{j}_{-m'_j,-m_j}(\beta) = (-1)^{m'_j-m_j}\, r^{j}_{m_j m'_j}(\beta)
\end{aligned}
\tag{5.93}
$$

Bezeichnet $\mid M_J, m_s\,\rangle_{SLS}$ bzw. $\mid M'_J, m'_s\,\rangle_{SLS}$ die jeweiligen Spinoren im Standard-Laborsystem, so ergibt sich für den Fall, daß im Ausgangskanal ein Neutron analysiert wird, offenbar

$$
\begin{aligned}
\mid m_s\,\rangle_{SLS} &= \mid m_s\,\rangle\\
\mid M_J\,\rangle_{SLS} &= \sum_{\bar M_J} \Big|\, \bar M_J\,\rangle\, r^{1}_{\bar M_J M_J}(\pi) = (-1)^{1-M_J} \mid -M_J\,\rangle\\
{}_{SLS}\langle\, m'_s \mid &= \sum_{\bar m_s} r^{\frac12}_{\bar m_s m'_s}(\Theta_n)\,\langle\, \bar m_s \mid\\
{}_{SLS}\langle\, M'_J \mid &= \sum_{\bar M_J} r^{1}_{\bar M_J M'_J}(-\Theta_d)\,\langle\, M'_J \mid = \sum_{\bar M_J} r^{1}_{M'_J \bar M_J}(-\Theta_d)\,\langle\, M'_J \mid
\end{aligned}
\tag{5.94}
$$

Im Standard-Laborsystem erhält man für die Neutronen-Streuamplitude dann

$$
\begin{aligned}
&{}_{SLS}\mathcal{M}^{m'_s m_s}_{M'_J M_J}(E+i0;k'_n,k_n,\Theta_n,\Theta_d) =\\
&\quad (-1)^{1-M_J} \sum_{\bar M'_J, m'_s} r^{\frac12}_{\bar m'_s m'_s}(\Theta_n)\, r^{1}_{M'_J \bar M'_J}(\Theta_d)\,\mathcal{M}^{m_s{}' m_s}_{M_J{}',-M_J}(E+i0;Q,\Theta)\,.
\end{aligned}
\tag{5.95}
$$

Ganz analog ergeben sich für den Fall, daß das Deuteron im Ausgangskanal analysiert wird, die Beziehungen

$$
\begin{aligned}
{}_{SLS}\langle\, M'_J \mid &= \sum_{\bar M_J} r^{1}_{\bar M_J M'_J}(\Theta_d)\,\langle\, M'_J \mid\\
{}_{SLS}\langle\, m'_s \mid &= \sum_{\bar m_s} r^{\frac12}_{\bar m_s m'_s}(-\Theta_n)\,\langle\, \bar m_s \mid = \sum_{\bar m_s} r^{\frac12}_{m'_s \bar m_s}(\Theta_d)\,\langle\, m'_s \mid,
\end{aligned}
\tag{5.96}
$$

so daß sich die Deuteron-Streuamplitude zu

$$
\begin{aligned}
&{}^{D}_{SLS}\mathcal{M}^{m'_s m_s}_{M'_J M_J}(E+i0;k'_n,k_n,\Theta_n,\Theta_d) =\\
&(-1)^{1-M_J} \sum_{\bar M'_J, m'_s} r^{\frac12}_{m'_s \bar m'_s}(\Theta_n)\, r^{1}_{\bar M'_J M'_J}(\Theta_d)\,{}^{D}\mathcal{M}^{m_s{}' m_s}_{M_J{}',-M_J}(E+i0;Q,\Theta)
\end{aligned}
\tag{5.97}
$$

ergibt. In diesem Standard-Laborsystemen schreiben sich die Polarisationsobservablen $K^{l';m'n'}_{i;jk}$ in der Form

$$
{}_{SLS}K^{l';m'n'}_{i;jk} = \frac{tr\;{}_{SLS}\mathcal{M}\;\mathcal{Z}_{i;jk}\;{}_{SLS}\mathcal{M}^{\dagger}\,\mathcal{Z}_{l';m'n'}}{tr\;{}_{SLS}\mathcal{M}\,{}_{SLS}\mathcal{M}^{\dagger}}.
\tag{5.98}
$$

Der Vollständigkeit halber soll noch ein weiteres Koordinatensystem angegeben werden, welches im nächsten Abschnitt verwendet wird. Dieses sogenante Standard-CM-System gestattet es, invarianzbedingte Abhängigkeiten der Streuamplitude und der Polarisationsobservablen besonders einfach zu formulieren. Es geht aus dem CM-System dadurch hervor, daß die Einzelsysteme dergestalt gedreht werden, daß die z-Achse jedes Systems gerade in die Impulsrichtung des jeweiligen Teilchens zeigt (Abbildung 8). Für die Spinzustände $\mid M_J, m_s \rangle_{SCM}$ und $\mid M_J', m_s' \rangle_{SCM}$ im Standard-CM-System ergibt sich dann durch Ausführen der entsprechenden Rotationen

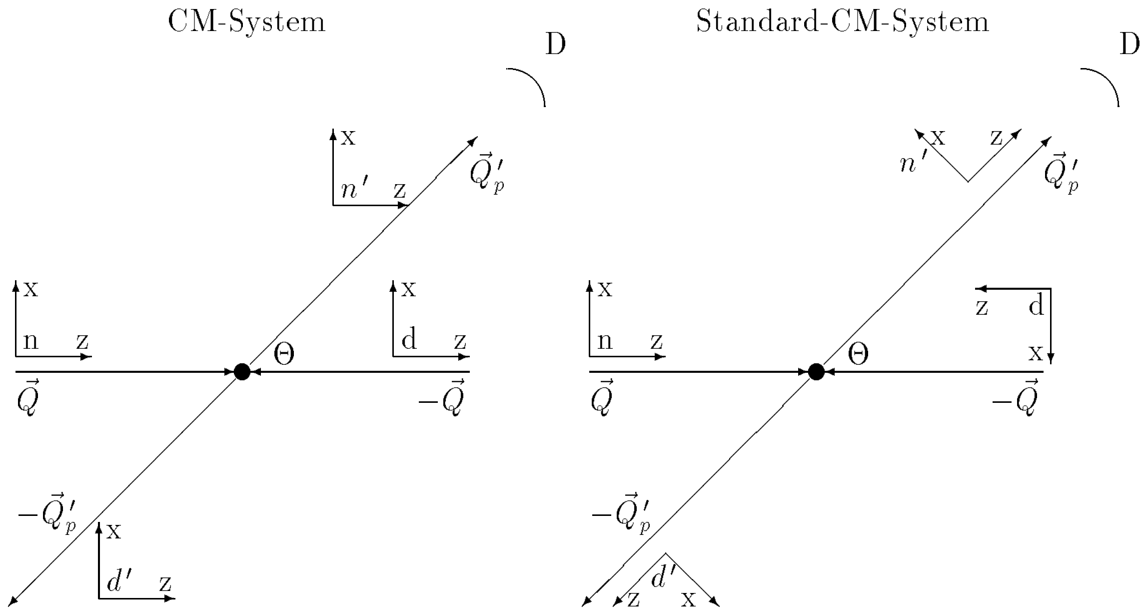

Abbildung 8: CM-System und Standard-CM-System für analysiertes auslaufendes Neutron.

für jeden der vier Reaktanten

$$
\begin{aligned}
\mid m_s \rangle_{SCM} &= \mid m_s \rangle \\
\mid M_J \rangle_{SCM} &= (-1)^{1-M_J} \mid -M_J \rangle \\
{}_{SCM}\langle\ m' \mid &= \sum_{n_s'} \langle\, m_s' \,|\, \mathcal{R}^\dagger(0,\Theta,0) \,|\, n_s' \rangle \langle\ n_s' \mid = \sum_{n_s'} \langle\ n_s' \mid r^{\frac{1}{2}}_{n_s' m_s'}(\Theta) \\
{}_{SCM}\langle\ M_J' \mid &= \sum_{N_J'} \langle\, M_J' \,|\, \mathcal{R}^\dagger(0,\Theta-\pi,0) \,|\, N_J' \rangle \langle\ N_J' \mid \\
&= \sum_{N_J'} (r^1)^\dagger_{M_J' N_J'}(\pi-\Theta) \langle\ N_J' \mid \\
&= \sum_{N_J'} (-1)^{1-M_J'} \langle\ N_J' \mid r^1_{N_J', -M_J'}(\Theta),
\end{aligned}
\tag{5.99}
$$

so daß man für die Neutronen-Amplitude ${}_{SCM}\mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;Q,\Theta)$ in diesem System

$$
{}_{SCM}\mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;Q,\Theta) = (-1)^{2-M_J'-M_J} \sum_{n_s', N_J{}'} r^{\frac{1}{2}}_{n_s' m_s'}(\Theta)\, r^{1}_{-N_J' M_J'}(\Theta)\, \mathcal{M}^{m_s' m_s}_{-M_J', -M_J}(E+i0;Q,\Theta) \tag{5.100}
$$

schreiben kann.

5.4 Symmetrieeigenschaften

Für feste Energie und Impulse ist die Streuamplitude im Spinraum eine 6×6-Matrix, wird also durch 36 komplexe Zahlen festgelegt. Diese Matrixelemente sind zum großen Teil voneinander abhängig. Analoges gilt für die 1296 verschiedenen $K^{l';m'n'}_{i;jk}$. Um die Beziehungen, die zwischen diesen Größen bestehen, zu bestimmen, müssen die Invarianzen, die die zugrundeliegende Wechselwirkung erfüllt, ausgenutzt werden. Um die Notation zu vereinfachen, wird in diesem Abschnitt die Streuamplitude im CM-System $\mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;Q,\Theta)$ abkürzend folgendermaßen als Matrixelement $\langle\, m_s', M_J', \vec{Q}\,' \,|\, \mathcal{M} \,|\, \vec{Q}, M_J, m_s \,\rangle$ geschrieben. Analoges gilt im Standard-CM-System für ${}_{SCM}\mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0;Q,\Theta)$. Dementsprechend sind $\mathcal{M}$ und ${}_{SCM}\mathcal{M}$ diejenigen Operatoren, deren Darstellungen im Spinraum $\langle\, m_s', M_J', \vec{Q}\,' \,|\, \mathcal{M} \,|\, \vec{Q}, M_J, m_s \,\rangle$ und $\langle\, m_s', M_J', \vec{Q}\,' \,|\, {}_{SCM}\mathcal{M} \,|\, \vec{Q}, M_J, m_s \,\rangle$ sind.

5.4.1 Invarianzen der Streuamplitude

Neben den schon ausgenutzten Invarianzen des elastischen Neutron-Deuteron-Stoßprozesses, nämlich der Translationsinvarianz, die dazu verwendet wurde, das ursprünglich neundimensionale Problem auf sechs Dimensionen zu reduzieren, und der Rotationsinvarianz, die es zweidimensional macht, existieren noch die Invarianz gegen Paritätstransformationen und gegen Zeitumkehr.

1. Paritätsinvarianz

Sei Π der Paritätsoperator; Paritätsinvarianz des Hamilton-Operators bedeutet dann für den Übergangsoperator

$$
\Pi^{-1}\,\mathcal{M}\,\Pi = \mathcal{M} \tag{5.101}
$$

also

$$
\langle\, m_s', M_J', \vec{Q}\,' \,|\, \Pi^{-1}\,\mathcal{M}\,\Pi \,|\, \vec{Q}, M_J, m_s \,\rangle = \langle\, m_s', M_J', \vec{Q}\,' \,|\, \mathcal{M} \,|\, \vec{Q}, M_J, m_s \,\rangle, \tag{5.102}
$$

andererseits ist bekanntermaßen

$$\Pi \left| \, \vec{Q}, M_J, m_s \, \right\rangle = \eta_d \, \eta_n \left| \, -\vec{Q}, M_J, m_s \, \right\rangle \tag{5.103}$$

wobei $\eta_d = \eta_n = 1$. Die Paritätstransformation überführt demnach einen Zustand mit Impuls $\vec{Q}$ in einen solchen mit Impuls $-\vec{Q}$, läßt aber die Spinkomponenten unverändert. Das bedeutet im Rahmen der Madison-Konvention, daß der Zustand im Impulsraum um π um die y-Achse gedreht wurde. Führt man erneut eine solche Drehung aus

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(0,\pi,0) \left| \, -\vec{Q}, M_J, m_s \, \right\rangle &= \sum_{N_J, n_s} \left| \, \vec{Q}, N_J, n_s \, \right\rangle r^{\frac{1}{2}}_{n_s m_s}(\pi) \, r^{1}_{N_J M_J}(\pi) \\ &= (-1)^{1-M_J+\frac{1}{2}-m_s} \left| \, \vec{Q}, -M_J, -m_s \, \right\rangle \end{aligned} \tag{5.104}$$

und berücksichtigt, daß $\mathcal{R}^\dagger \, \mathcal{M} \, \mathcal{R} = \mathcal{M}$ ist, so folgt offenbar sofort

$$\begin{aligned} &\langle \, m_s', M_J', \vec{Q}\,' \, | \, \mathcal{M} \, | \, \vec{Q}, M_J, m_s \, \rangle \\ &= \langle \, m_s', M_J', \vec{Q}\,' \, | \, \Pi^{-1} \, \mathcal{M} \, \Pi \, | \, \vec{Q}, M_J, m_s \, \rangle \\ &= \langle \, m_s', M_J', -\vec{Q}\,' \, | \, \mathcal{M} \, | \, -\vec{Q}, M_J, m_s \, \rangle \\ &= (-1)^{1-M_J'+1-M_J+\frac{1}{2}-m_s'+\frac{1}{2}-m_s} \langle \, -m_s', -M_J', \vec{Q}\,' \, | \, \mathcal{M} \, | \, \vec{Q}, -M_J, -m_s \, \rangle, \end{aligned} \tag{5.105}$$

was gleichbedeutend ist mit

$$\mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0; Q, \Theta) = (-1)^{2-(M_J'+M_J)} \, (-1)^{1-(m_s'+m_s)} \, \mathcal{M}^{-m_s', -m_s}_{-M_J', -M_J}(E+i0; Q, \Theta) \, . \tag{5.106}$$

Führt man die Transformationen (5.99) aus, so ergibt sich im Standard-CM-System die gleiche Relation

$$\begin{aligned} &{}_{SCM}\mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0; Q, \Theta) \\ &= (-1)^{2-(M_J'+M_J)} \, (-1)^{1-(m_s'+m_s)} \, {}_{SCM}\mathcal{M}^{-m_s', -m_s}_{-M_J', -M_J}(E+i0; Q, \Theta) \, . \end{aligned} \tag{5.107}$$

2. Zeitumkehrinvarianz

Der antiunitäre Zeitumkehroperator $\mathcal{K}$ transfomiert die fundamentalen Observablen $\vec{p}$ und $\vec{s}$ in folgender Weise

$$\mathcal{K}^\dagger \, \vec{p} \, \mathcal{K} = -\vec{p} \qquad \mathcal{K}^\dagger \, \vec{s} \, \mathcal{K} = -\vec{s}, \tag{5.108}$$

so daß sich mit der üblichen Phasenkonvention [33]

$$\mathcal{K} \left| \, \vec{Q}, M_J, m_s \, \right\rangle_{SCM} = (-1)^{1-M_J+\frac{1}{2}-m_s} \left| \, -\vec{Q}, -M_J, -m_s \, \right\rangle_{SCM} \tag{5.109}$$

ergibt. Die Antilinearität von $\mathcal{K}$ bedingt, daß

$$\mathcal{K}^{\dagger}\,{}_{SCM}\mathcal{M}\,\mathcal{K} = \mathcal{M}^{\dagger} \tag{5.110}$$

ist, und man erhält

$$\begin{aligned}
&{}_{SCM}\langle\, m_s', M_J', \vec{Q}\,' \,|\, {}_{SCM}\mathcal{M} \,|\, \vec{Q}, M_J, m_s \,\rangle_{SCM} \\
&\quad = {}_{SCM}\langle\, m_s', M_J', \vec{Q}\,' \,|\, \mathcal{K}^{\dagger}\,{}_{SCM}\mathcal{M}^{\dagger}\,\mathcal{K} \,|\, \vec{Q}, M_J, m_s \,\rangle_{SCM} \\
&\quad = (-1)^{1-M_J'+\frac{1}{2}-m_s'} \left({}_{SCM}\langle\, -m_s', -M_J', -\vec{Q}\,' \,\middle|\, {}_{SCM}\mathcal{M}^{\dagger}\mathcal{K}\right) \,\Big|\, \vec{Q}, M_J, m_s \,\rangle_{SCM} \\
&\quad = (-1)^{2-M_J'-M_J+1-m_s'-m_s} \\
&\qquad\qquad {}_{SCM}\langle\, -m_s', -M_J', -\vec{Q}\,' \,\Big|\, \left({}_{SCM}\mathcal{M}^{\dagger} \,\Big|\, -\vec{Q}, -M_J, -m_s \,\rangle^{*}_{SCM}\right) \\
&\quad = (-1)^{2-M_J'-M_J+1-m_s'-m_s}\; {}_{SCM}\langle\, -m_s, -M_J, -\vec{Q} \,|\, {}_{SCM}\mathcal{M} \,|\, -\vec{Q}\,', -M_J', -m_s' \,\rangle_{SCM} \\
&\quad = {}_{SCM}\langle\, m_s, M_J, \vec{Q} \,|\, \mathcal{R}^{\dagger}(0,\pi,0)\,{}_{SCM}\mathcal{M}\,\mathcal{R}(0,\pi,0) \,|\, \vec{Q}\,', M_J', m_s' \,\rangle_{SCM} \\
&\quad = {}_{SCM}\langle\, m_s, M_J, \vec{Q} \,|\, {}_{SCM}\mathcal{M} \,|\, \vec{Q}\,', M_J', m_s' \,\rangle_{SCM}
\end{aligned} \tag{5.111}$$

wegen der Rotationsinvarianz der Streuamplitude. Gemäß der Madison-Konvention hat nun aber für die allen vier Koordinatensystemen gemeinsame y-Achse $e_y = \frac{\vec{Q}\times\vec{Q}\,'}{|\vec{Q}\times\vec{Q}\,'|}$ zu gelten. Bei der zeitumgekehrten Reaktion jedoch sind Eingangs- und Ausgangsimpuls vertauscht, so daß die allen Systemen gemeinsame y-Achse falsch orientiert ist. Um das zu korrigieren, müssen alle Systeme um den Winkel π um die z-Achse gedreht werden. Wegen

$$\mathcal{R}(\pi,0,0) \mid j, m_j \,\rangle = e^{i m_j \pi} \mid j, m_j \,\rangle \tag{5.112}$$

erhält man sofort

$$\begin{aligned}
&{}_{SCM}\langle\, m_s', M_J', \vec{Q}\,' \,|\, {}_{SCM}\mathcal{M} \,|\, \vec{Q}, M_J, m_s \,\rangle_{SCM} \\
&\quad = \quad (-1)^{M_J'+m_s'-(M_J+m_s)}\; {}_{SCM}\langle\, m_s, M_J, \vec{Q} \,|\, {}_{SCM}\mathcal{M} \,|\, \vec{Q}\,', M_J', m_s' \,\rangle_{SCM},
\end{aligned} \tag{5.113}$$

was gleichbedeutend ist mit

$$\begin{aligned}
&{}_{SCM}\mathcal{M}^{m_s' m_s}_{M_J' M_J}(E+i0; Q, \Theta) \\
&\quad = \quad (-1)^{M_J'-M_J+m_s'-m_s}\; {}_{SCM}\mathcal{M}^{m_s m_s'}_{M_J M_J'}(E+i0; Q, \Theta)\,.
\end{aligned} \tag{5.114}$$

5.4.2 Konsequenzen der Invarianzen für die Polarisationsobservablen

Um die Bedeutung der Invarianzen für die Polarisationsobservablen deutlich werden zu lassen, ist es äußerst nützlich, den sphärischen Formalismus zu verwenden.

Die Dichtematrizen für Spin $\frac{1}{2}$ (5.56) und Spin 1 (5.69) aus den Abschnitten 5.3.1 und 5.3.2 im sphärischen Formalismus waren gegeben durch

$$\rho\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\left(\sigma_{0,0}^{\dagger} + \sum_{q=-1}^{1} t_{1,q}^{(\frac{1}{2})}\,\sigma_{1,q}^{\dagger}\right)$$

bzw.

$$\rho(1) = \frac{1}{3}\left(\tau_{0,0}^{\dagger} + \sum_{k=1}^{2}\sum_{q=-k}^{k} t_{k,q}^{(1)}\,\tau_{k,q}^{\dagger}\right).$$

Durch Bildung des Tensorprodukts erhält man

$$\rho = \frac{1}{6}\sum_{k_n=0}^{1}\sum_{q_n=-k_n}^{k_n}\sum_{k_d=0}^{2}\sum_{q_d=-k_d}^{k_d} t_{k_n,q_n}^{(\frac{1}{2})}\,t_{k_d,q_d}^{(1)}\,\sigma_{k_n,q_n}^{\dagger}\otimes\tau_{k_d,q_d}^{\dagger}, \tag{5.115}$$

wobei $t_{0,0}^{(\frac{1}{2})} = t_{0,0}^{(1)} = 1$ sowie $\sigma_{0,0} = \mathbf{1}_2$ und $\tau_{0,0} = \mathbf{1}_3$. Mit den abkürzenden Bezeichnungen

$$\begin{aligned} t_{k_n,q_n;k_d,q_d} &= t_{k_n,q_n}^{(\frac{1}{2})}\,t_{k_d,q_d}^{(1)} \\ \mathcal{Z}_{k_n,q_n;k_d,q_d}^{\dagger} &= \sigma_{k_n,q_n}^{\dagger}\otimes\tau_{k_d,q_d}^{\dagger} \end{aligned} \tag{5.116}$$

ergibt sich also

$$\rho = \frac{1}{6}\sum_{k_n,k_d,q_n,q_d} t_{k_n,q_n;k_d,q_d}\,\mathcal{Z}_{k_n,q_n;k_d,q_d}^{\dagger} \tag{5.117}$$

Wegen $tr\,\mathcal{Z}_{k_n,q_n;k_d,q_d}\,\mathcal{Z}_{k_n',q_n';k_d',q_d'}^{\dagger} = 6\,\delta_{k_nk_n'}\,\delta_{q_nq_n'}\,\delta_{k_dk_d'}\,\delta_{q_dq_d'}$ gilt genau wie in (5.79)

$$\begin{aligned} t_{k_n',q_n';k_d',q_d'}' &= tr\,\rho'\,\mathcal{Z}_{k_n',q_n';k_d',q_d'} = \frac{\mathcal{M}\,\rho\,\mathcal{M}^{\dagger}\,\mathcal{Z}_{k_n',q_n';k_d',q_d'}}{tr\,\mathcal{M}\,\rho\,\mathcal{M}^{\dagger}} \\ &= \frac{1}{6}\,\frac{\sum\limits_{k_n,q_n,k_d,q_d} t_{k_n,q_n;k_d,q_d}\,tr\,\mathcal{M}\,\mathcal{Z}_{k_n,q_n;k_d,q_d}^{\dagger}\,\mathcal{M}^{\dagger}\,\mathcal{Z}_{k_n',q_n';k_d',q_d'}}{\sum\limits_{k_n,q_n,k_d,q_d} t_{k_n,q_n;k_d,q_d}\,tr\,\mathcal{M}\,\mathcal{Z}_{k_n,q_n;k_d,q_d}\mathcal{M}^{\dagger}} \\ &= \frac{1}{6}\,\frac{\sum\limits_{k_n,q_n,k_d,q_d} t_{k_n,q_n;k_d,q_d}\,T_{k_n,q_n;k_d,q_d}^{k_n',q_n';k_d',q_d'}}{\sum\limits_{k_n,q_n,k_d,q_d} t_{k_n,q_n;k_d,q_d}\,T_{k_n,q_n;k_d,q_d}}. \end{aligned} \tag{5.118}$$

Die

$$T_{k_n,q_n;k_d,q_d}^{k_n',q_n';k_d',q_d'} = \frac{tr\,\mathcal{M}\,\mathcal{Z}_{k_n,q_n;k_d,q_d}^{\dagger}\,\mathcal{M}^{\dagger}\,\mathcal{Z}_{k_n',q_n';k_d',q_d'}}{tr\,\mathcal{M}\mathcal{M}^{\dagger}} \tag{5.119}$$

sind die Polarisationsobservablen im sphärischen Formalismus. Im Standard-CM-System ist dann offensichtlich

$${}_{SCM}T_{k_n,q_n;k_d,q_d}^{k_n',q_n';k_d',q_d'} = \frac{tr\,{}_{SCM}\mathcal{M}\,\mathcal{Z}_{k_n,q_n;k_d,q_d}^{\dagger}\,{}_{SCM}\mathcal{M}^{\dagger}\,\mathcal{Z}_{k_n',q_n';k_d',q_d'}}{tr\,{}_{SCM}\mathcal{M}_{SCM}\mathcal{M}^{\dagger}}. \tag{5.120}$$

In direkter Analogie zu (5.82) läßt sich jetzt schreiben

$$\begin{aligned} t'_{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d}\, tr\,\rho' &= \frac{1}{6}\left(tr\,\mathcal{M}\,\mathcal{M}^\dagger\right) \sum_{k_n,q_n,k_d,q_d} t_{k_n,q_n;k_d,q_d}\, T^{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d}_{k_n,q_n;k_d,q_d} \\ &= \frac{d\sigma}{d\Omega} \sum_{k_n,q_n,k_d,q_d} t_{k_n,q_n;k_d,q_d}\, T^{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d}_{k_n,q_n;k_d,q_d}. \end{aligned} \tag{5.121}$$

Die Hermitizitäts-Bedingungen (5.55) und (5.68) haben zur Folge, daß folgende Relation

$$\mathcal{Z}^\dagger_{k_n,q_n;k_d,q_d} = (-1)^{q_n+q_d}\,\mathcal{Z}_{k_n,-q_n;k_d,-q_d}. \tag{5.122}$$

besteht. Hiermit und mittels der Beziehungen unter den Streuamplituden, die im vorigen Abschnitt durch deren Invarianz gegenüber Paritäts- und Zeitumkehr-Transformationen abgeleitet worden sind, lassen sich sofort folgende Bedingungen an die Polarisationsobservablen formulieren:

Hermitizität

$$\left({}_{SCM}T^{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d}_{k_n,q_n;k_d,q_d}\right)^* = (-1)^{k'_n+k'_d+k_n+k_d}\,{}_{SCM}T^{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d}_{k_n,q_n;k_d,q_d}, \tag{5.123}$$

demnach sind alle Polarisationsobservable im sphärischen Formalismus reel, wenn $k'_n + k'_d + k_n + k_d$ gerade ist; ansonsten rein imaginär.

Paritätsinvarianz

$${}_{SCM}T^{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d}_{k_n,q_n;k_d,q_d} = (-1)^{k'_n+q'_n+k'_d+q'_d+k_n+q_n+k_d+q_d}\,{}_{SCM}T^{k'_n,-q'_n;k'_d,-q'_d}_{k_n,-q_n;k_d,-q_d} \tag{5.124}$$

Zeitumkehrinvarianz

$${}_{SCM}T^{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d}_{k_n,q_n;k_d,q_d} = (-1)^{q'_n+q'_d+q_n+q_d}\,{}_{SCM}T^{k_n,q_n;k_d,q_d}_{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d} \tag{5.125}$$

Diese Relationen schränken die Anzahl der unabhängigen Polarisationsobservablen deutlich ein, jedoch sind sie in dieser Form sehr unübersichtlich und kompliziert auszuwerten. Stattdessen soll im nächsten Abschnitt der Versuch unternommen werden, die verschiedenen ${}_{SCM}T^{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d}_{k_n,q_n;k_d,q_d}$ schrittweise zu konstruieren. Es wird sich zeigen, daß sie in verschiedene Klassen zerfallen, innerhalb derer die Bedingungen (5.123) bis (5.125) die unabhängigen Observablen festlegen. Die Bedingungen (5.123) und (5.124) gelten in allen Koordinatensystemen, Gleichung (5.125) ist in dieser Form nur im Standard-CM-System gültig.

5.5 Die unabhängigen Polarisationsobservablen

Um in einem Streuexperiment mit zwei Teilchen im Eingangs- wie im Ausgangskanal eine vollständige Messung durchzuführen, d.h. alle unabhängigen Streuamplituden zu bestimmen, ist es nach Simonius [29] ausreichend, die Polarisation von höchstens zwei Teilchen zu bestimmen. Berücksichtigt man das, so lassen sich schrittweise alle Polarisationsobservablen bestimmen.

5.5.1 Konstruktion sämtlicher Polarisationsobservabler

I. Polarisation der auslaufenden Teilchen wird nicht gemessen.

Dann wird aus (5.121) wegen $k_n' = q_n' = k_d' = q_d' = 0$, also

$$t_{k_n',q_n';k_d',q_d'} = \delta_{k_n'0}\,\delta_{q_n'0}\,\delta_{k_d'0}\,\delta_{q_d'0} \tag{5.126}$$

$$\begin{aligned} tr\,\rho' &= \frac{1}{6}\left(tr\,\mathcal{M}\,\mathcal{M}^{\dagger}\right) \sum_{k_n,q_n,k_d,q_d} t_{k_n,q_n;k_d,q_d}\,T^{k_n',q_n';k_d',q_d'}_{k_n,q_n;k_d,q_d} \\ &= \frac{d\sigma}{d\Omega} \sum_{k_n,q_n,k_d,q_d} t_{k_n,q_n;k_d,q_d}\,T^{0,0;0,0}_{k_n,q_n;k_d,q_d}. \end{aligned} \tag{5.127}$$

1. Beide einlaufenden Teilchen sind unpolarisiert.

$$t_{k_n,q_n;k_d,q_d} = \delta_{k_n0}\,\delta_{q_n0}\,\delta_{k_d0}\,\delta_{q_d0} \qquad \text{und} \qquad \rho = \frac{1}{6}\,\mathcal{Z}^{\dagger}_{0,0;0,0} = \frac{1}{6}\,\mathbf{1}_6 \tag{5.128}$$

und

$$tr\rho' = \frac{d\sigma}{d\Omega} \tag{5.129}$$

2. Das einlaufende Neutron (Deuteron) ist polarisiert.

$$t_{k_n,q_n;k_d,q_d} = t^{(\frac{1}{2})}_{k_n,q_n}\,\delta_{k_d0}\,\delta_{q_d0} \qquad \rho = \frac{1}{2}\sum_{k_n,q_n} t^{(\frac{1}{2})}_{k_n,q_n}\,\sigma_{k_n,q_n} \otimes \frac{1}{3}\,\mathbf{1}_3 \tag{5.130}$$

und

$$\rho' = \frac{d\sigma}{d\Omega}\sum_{k_n,q_n} t^{(\frac{1}{2})}_{k_n,q_n}\,T^{0,0;0,0}_{k_n,q_n;0,0} =: \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(1 + \sum_{q_n}(-1)^{q_n}\,T_{1,-q_n}\,t^{(\frac{1}{2})}_{1,q_n}\right) \tag{5.131}$$

Die $T_{1,q_n}(n) = (-1)^{q_n}\, T^{0,0;0,0}_{1,-q_n;0,0}$ sind die Neutron-Vektor-Analysierstärken. In direkter Analogie zum Fall des einlaufenden polarisierten Neutron erhält man für ein einlaufendes polarisierten Deuteron jetzt wegen

$$t_{k_n,q_n;k_d,q_d} = t^{(1)}_{k_d,q_d}\, \delta_{k_n 0}\, \delta_{q_n 0} \qquad \rho = \frac{1}{3} \sum_{k_d,q_d} t^{(1)}_{k_d,q_d}\, \sigma_{k_d,q_d} \otimes \frac{1}{2}\, \mathbf{1}_2 \tag{5.132}$$

Deuteron-Vektor- und Deuteron-Tensor-Analysierstärken

$$T_{1,q_d}(d) = (-1)^{q_d}\, T^{0,0;0,0}_{0,0;1,q_d;} \qquad \text{und} \qquad T_{2,q_d}(d) = (-1)^{q_d}\, T^{0,0;0,0}_{0,0;2,q_d}. \tag{5.133}$$

3. Beide einlaufende Teilchen sind polarisiert.

$$t_{k_n,q_n;k_d,q_d} = t^{(\frac{1}{2})}_{k_n,q_n}\, \delta_{k_d 0}\, \delta_{q_d 0} + t^{(1)}_{k_d,q_d}\, \delta_{k_n 0}\, \delta_{q_n 0} + t_{k_n,q_n;k_d,q_d} \tag{5.134}$$

$$\begin{aligned} \rho' = \frac{d\sigma}{d\Omega} \sum_{k_n,q_n} t_{k_n,q_n;k_d,q_d}\, T^{0,0;0,0}_{k_n,q_n;k_d,q_d} &= \frac{d\sigma}{d\Omega} \left(1 + \sum_{q_n} (-1)^{q_n}\, T_{1,q_n}\, t^{(\frac{1}{2})}_{1,q_n} \right) \\ &\left(+ \sum_{k_d=1}^{2} \sum_{q_d} (-1)^{q_d}\, T_{k_d,q_d}\, t^{(1)}_{k_d,q_d} + \sum_{k_d=1}^{2} \sum_{q_n,q_d} T^{0,0;0,0}_{1,q_n;k_d,q_d}\, t_{1,q_n;k_d,q_d} \right) \end{aligned} \tag{5.135}$$

Die $C_{1,q_n;k_d,q_d} := T^{0,0;0,0}_{1,q_n;k_d,q_d}$ sind die Spinkorrelations-Koeffizienten im Eingangskanal.

$T_{1,q}(n)$	$(-1)^q\, T^{0,0;0,0}_{1,-q;0,0}$	Vektor-Analysierstärke des Neutrons
$T_{1,q}(d)$	$(-1)^q\, T^{0,0;0,0}_{0,0;1,-q}$	Vektor-Analysierstärke des Deuteron
$T_{2,q}(d)$	$(-1)^q\, T^{0,0;0,0}_{0,0;2,-q}$	Tensor-Analysierstärke des Deuteron
$C_{1,q_n,1,q_d}$	$T^{0,0;0,0}_{1,q_n;1,q_d}$	Eingangs-Spinkorrelation(Vektor-Vektor)
$C_{1,q_n,2,q_d}$	$T^{0,0;0,0}_{1,q_n;2,q_d}$	Eingangs-Spinkorrelation(Vektor-Tensor)

Tabelle 3: Vollständige Liste aller Polarisationsobservablen, Teil 1.

II. Polarisation eines auslaufenden Teilchen wird gemessen.

1. Beide einlaufende Teilchen sind unpolarisiert.

$$t^{(\frac{1}{2})}_{n'_n,q'_n}\, tr\rho' = \frac{d\sigma}{d\Omega}\, T^{k'_n,q'_n;0,0}_{0,0;0,0} \tag{5.136}$$

Die $T^{k'_n,q'_n} := T^{k'_n,q'_n;0,0}_{0,0;0,0}$ sind die Polarisation des auslaufenden Neutrons bei unpolarisiertem Neutron und Deuteron im Eingangskanal. Ganz analog erhält man die Vektor- und Tensor-Polarisation des auslaufenden Deuterons bei unpolarisiertem Eingangskanal.

2. Das einlaufende Neutron ist polarisiert.

$$t^{(\frac{1}{2})}_{k'_n,q'_n}\, tr\rho' = \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(T^{1,q'_n} + \sum_{q_n} T^{1,q'_n;0,0}_{1,q_n;0,0}\, t_{1,q_n}\right) \tag{5.137}$$

Die $T^{1,q'_n}_{1,q_n}(n,n) := T^{1,q'_n;0,0}_{1,q_n;0,0}$ sind die Vektor-Polarisation-Transfer-Koeffizienten des Neutrons.

3. Das einlaufendes Deuteron ist polarisiert.

$$t^{(1)}_{k'_d,q'_d}\, tr\rho' = \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(T^{1,q'_n} + \sum_{k_d=1}^{2}\sum_{q_d} T^{k_d,q_d;q'_n}_{1,q_n;0,0}\, t_{1,q_n}\right) \tag{5.138}$$

Ganz analog konstruiert man mit $T^{1,q'_d}_{1,q_d}(d,d) := T^{1,q^{n'};k,q'_d}_{0,0;1,q_d}$ den Vektor-Polarisations-Transfer-Koeffizienten des Deuterons, mit $T^{1,q'_n}_{2,q_d}(d,n) := T^{1,q'_n;0,0}_{0,0;2,q_d}$ den Tensor-Vektor-Polarisations-Transfer-Koeffizienten von einlaufendem Deuteron und auslaufendem Neutron etc.

III. Die Polarisation beider auslaufender Teilchen wird gemessen.

$$t_{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d}\, tr\rho' = \frac{d\sigma}{d\Omega} T^{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d}_{0,0;0,0} \tag{5.139}$$

Hier sind $C^{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d} := T^{k'_n,q'_n;k'_d,q'_d}_{0,0;0,0}$ die Spinkorrelations-Koeffizienten im Ausgangskanal bei unpolarisiertem Eingangskanal.

In den Tabellen 3, 4 und 5 finden sich sämtliche Polarisationsobservable.

$T^{1,q'}(n)$	$T^{1,q';0,0}_{0,0;0,0}$	Vektor-Polarisation des auslaufenden Neutron
$T^{1,q'}(d)$	$T^{0,0;1,q'}_{0,0;0,0}$	Vektor-Polarisation des auslaufenden Deuteron
$T^{2,q'}(d)$	$T^{0,0;2,q'}_{0,0;0,0}$	Tensor-Polarisation des auslaufenden Deuteron
$T^{1,q'_n}_{1,q_n}(n,n)$	$T^{1,q'_n;0,0}_{1,q_n;0,0}$	Polarisation-Transfer-Koeffizient (Neutron→ Neutron, Vektor-Vektor)
$T^{1,q'_d}_{1,q_d}(d,d)$	$T^{0,0;1,q'_d}_{0,0;1,q_d}$	Polarisation-Transfer-Koeffizient (Deuteron→ Deuteron, Vektor-Vektor)
$T^{2,q'_d}_{2,q_d}(d,d)$	$T^{0,0;2,q'_d}_{0,0;2,q_d}$	Polarisation-Transfer-Koeffizient (Deuteron→Deuteron, Tensor-Tensor)
$T^{1,q'_d}_{1,q_n}(n,d)$	$T^{0,0;1,q'_d}_{1,q_n;0,0}$	Polarisation-Transfer-Koeffizient (Neutron→Deuteron, Vektor-Vektor)
$T^{2,q'_d}_{1,q_n}(n,d)$	$T^{0,0;2,q'_d}_{1,q_n;0,0}$	Polarisation-Transfer-Koeffizient (Neutron→Deuteron, Vektor-Tensor)
$T^{1,q'_n}_{1,q_d}(d,n)$	$T^{1,q'_n;0,0}_{0,0;1,q_d}$	Polarisation-Transfer-Koeffizient (Deuteron→Neutron, Vektor-Vektor)
$T^{1,q'_n}_{2,q_d}(d,n)$	$T^{1,q'_n;0,0}_{0,0;2,q_d}$	Polarisation-Transfer-Koeffizient (Deuteron→Neutron, Tensor-Vektor)

Tabelle 4: Vollständige Liste aller Polarisationsobservablen, Teil 2.

$C^{1,q'_n;1,q'_d}$	$T^{1,q'_n;1,q'_d}_{0,0;0,0}$	Ausgangs-Spinkorrelation (Vektor-Vektor)
$C^{1,q'_n,2,q'_d}$	$T^{1,q'_n;2,q'_d}_{0,0;0,0}$	Ausgangs-Spinkorrelation (Vektor-Tensor)

Tabelle 5: Vollständige Liste aller Polarisationsobservablen, Teil 3.

5.5.2 Ausnutzen der Invarianzbedingungen

Im folgenden werden die Bedingungen (5.123) bis (5.125), nämlich die Hermitizität und die Invarianz gegen Zeitumkehr und Paritäts-Transformationen herangezogen, um festzustellen, welche Observable schon durch andere bestimmt sind.

Als erstes fällt auf, daß, bedingt durch Zeitumkehrinvarianz, die Analysierstärken die Polarisationen des auslaufenden Teilchens festlegen, die Eingangs-Spinkorrelation die im Ausgangskanal bestimmt und daß einige Polarisations-Transfer-Koeffizienten voneinander abhängen. Es steht hier x für sowohl n als auch d. Es sei ausdrücklich darauf hingewiesen, daß diese Beziehungen in dieser Form nur im Standard-CM-System gelten, nicht etwa im Standard-Laborsystem. Dort nehmen sie eine weitaus kompliziertere Form an, weswegen sie hier nicht eingehender betrachtet werden. Weiterhin folgt aus der Hermitizitätsbedingung, daß sämtliche Polarisationsobservable entweder reell oder rein imaginär sind (Tabelle 7), so daß sich mit Hilfe der Paritätsinvarianz (5.124) für die drei Vektor-Analysierstärken sofort

$$T_{1,0}(n) = 0 \qquad \text{und} \qquad T_{1,1} = T_{1,-1}(n) \tag{5.140}$$

ergibt. Für die fünf Tensor-Analysierstärken erhält man analog

$$T_{2,2}(d) = T_{2,-2}(d) \qquad \text{und} \qquad T_{2,1}(d) = -T_{2,-1}(d). \tag{5.141}$$

${}_{SCM}T_{1,q}(x) = (\pm)\, {}_{SCM}T^{1,q}(x)$	${}_{SCM}T_{2,q}(d) = (\pm)\, {}_{SCM}T^{2,q}(d)$
${}_{SCM}C_{1,q_n,1,q_d} = (\pm)\, {}_{SCM}C^{1,q_n,1,q_d}$	${}_{SCM}C_{1,q_n,2,q_d} = (\pm)\, {}_{SCM}C^{1,q_n,2,q_d}$
${}_{SCM}T^{1,q_n}_{1,q_d}(d,n) = (\pm)\, {}_{SCM}T^{1,q_d}_{1,q_n}(n,d)$ 5	${}_{SCM}T^{2,q_d}_{1,q_n}(n,d) = (\pm)\, {}_{SCM}T^{1,q_n}_{2,q_d}(d,n)$

Tabelle 6: Zeitumkehr-Invarianz und Poarisationsobservable.

Vektor-Analysierstärken	$T_{1,q}(n),\ T_{1,q}(d)$	imaginär
Tensor-Analysierstärken	$T_{2,q}(d)$	reell
Spin-Korrelationen (Vektor-Vektor)	$C_{1,q_n;1,q_d}$	reell
Spin-Korrelationen (Vektor-Tensor)	$C_{1,q_n;2,q_d}$	imaginär
Polarisations-Transfer-Koeffizienten (Vektor-Vektor)	$T_{1,q_n}^{1,q_n'}(n,n),\ T_{1,q_d}^{1,q_d'}(d,d)$ $T_{1,q_n}^{1,q_d'}(n,d)$	reell
Polarisations-Transfer-Koeffizienten (Tensor-Tensor)	$T_{2,q_d}^{2,q_d'}(d,d)$	reell
Polarisations-Transfer-Koeffizienten (Vektor-Tensor)	$T_{1,q_n}^{2,q_d'}(n,d)$	reell

Tabelle 7: Die Polarisationsobservablen als komplexe Größen.

und zeigt genauso, daß von den neun Polarisation-Transfer-Koeffizienten des Neutrons wegen

$$\begin{aligned} T_{1,0}^{1,1}(n,n) &= -T_{1,0}^{1,-1}(n,n) & T_{1,1}^{1,0}(n,n) &= -T_{1,-1}^{1,0}(n,n) \\ T_{1,1}^{1,1}(n,n) &= T_{1,-1}^{1,1}(n,n) & T_{1,1}^{1,-1}(n,n) &= T_{1,-1}^{1,1}(n,n) \end{aligned} \tag{5.142}$$

nur $T_{1,0}^{1,0}(n,n)$, $T_{1,0}^{1,1}(n,n)$, $T_{1,1}^{1,-1}(n,n)$, $T_{1,1}^{1,0}(n,n)$ und $T_{1,1}^{1,1}(n,n)$ unabhängig sein können. Die Zeitumkehrinvarianz liefert zusätzlich

$$_{SCM}T_{1,0}^{1,1}(n,n) = {}_{SCM}T_{1,1}^{1,0}(n,n), \tag{5.143}$$

eine Bedingung, die hier nicht ausgewertet werden soll. Es gibt also nur vier unabhängige Neutron-Neutron-Transfer-Koeffizienten. Dasselbe gilt selbstverständlich für den Vektor-Vektor-Polarisations-Transfer-Koeffizienten $T_{1,q_n}^{1,q_d'}(n,d)$ zwischen Neutron und Deuteron. Schließlich sind von den 15 Komponenten des Vektor-Tensor-Polarisations-Koeffizienten $T_{1,q_n}^{2,q_d'}(n,d)$ zwischen Neutron und Deuteron wegen

$$
\begin{array}{rclrcl}
T^{2,0}_{1,0}(n,d) &=& 0 & T^{2,1}_{1,0}(n,d) &=& T^{2,-1}_{1,0}(n,d) \\
T^{2,2}_{1,0}(n,d) &=& -T^{2,-2}_{1,0}(n,d) & T^{2,0}_{1,1}(n,d) &=& T^{2,0}_{1,-1}(n,d) \\
T^{2,1}_{1,1}(n,d) &=& -T^{2,-1}_{1,-1}(n,d) & T^{2,2}_{1,1}(n,d) &=& T^{2,-2}_{1,-1}(n,d) \\
T^{2,-1}_{1,1}(n,d) &=& -T^{2,1}_{1,-1}(n,d) & T^{2,-2}_{1,1}(n,d) &=& T^{2,2}_{1,-1}(n,d)
\end{array}
\tag{5.144}
$$

nur sieben unabhängig, nämlich

$$
T^{2,1}_{1,0}(n,d) \quad T^{2,2}_{1,0}(n,d) \quad T^{2,-2}_{1,1}(n,d) \quad T^{2,-1}_{1,1}(n,d) \quad T^{2,0}_{1,1}(n,d) \quad T^{2,1}_{1,1}(n,d)
$$

$$
T^{2,2}_{1,0}(n,d).
$$

Es sei hier ohne Nachweis angegeben, daß die in den Tabellen 8, 9 und 10 aufgeführten zweiundzwanzig teils kartesischen, teils sphärischen Observablen zusammen mit dem differentiellen unpolarisierten Wirkungsquerschnitt ausreichen, die Dynamik eines Neutron-Deuteron-Streuexperiments vollständig zu bestimmen; sämtliche Streuamplituden lassen sich mit ihrer Hilfe ermitteln. Es ist sowohl bei Experimenten als auch bei theoretischen Vorhersagen internationaler Standard geworden, diesen Observablen-Satz zu verwenden.

Neutron-Vektor-Anlysierstärke	$A_y = \sqrt{2}\, i\, T_{1,1}$
Deuteron-Vektor-Anlysierstärke	$i\, T_{1,1} = -\frac{\sqrt{3}}{2}\, P^{y\,'}$
Deuteron-Tensor-Anlysierstärke	$T_{2,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\, P^{z\,'z\,'}$
Deuteron-Tensor-Anlysierstärke	$T_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{3}}\, P^{x\,'z\,'}$
Deuteron-Tensor-Anlysierstärke	$T_{2,2} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(P^{x\,'x\,'} - P^{y\,'y\,'} \right)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Neutron, Vektor-Vektor	$K^{x\,'}_{x}(n,n) = T^{1,1}_{1,1}(n,n) - T^{1,-1}_{1,1}(n,n)$

Tabelle 8: Polarisationsobservable; Zusammenhang zwischen kartesischem und sphärischem Formalismus, Teil 1.

Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Neutron, Vektor-Vektor	$K_z^{z\,\prime}(n,n)= T_{1,0}^{1,0}(n,n)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Neutron, Vektor-Vektor	$K_z^{x\,\prime}(n,n)= -\sqrt{2}\,T_{1,0}^{1,1}(n,n)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Neutron, Vektor-Vektor	$K_x^{z\,\prime}(n,n)= -\sqrt{2}\,T_{1,1}^{1,0}(n,n)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Deuteron, Vektor-Vektor	$K_x^{x\,\prime}(n,d)= \sqrt{\frac{2}{3}}\left(T_{1,1}^{1,1}(n,d) - T_{1,1}^{1,-1}(n,d)\right)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Deuteron, Vektor-Vektor	$K_y^{y\,\prime}(n,d)= \sqrt{\frac{2}{3}}\left(T_{1,1}^{1,1}(n,d) + T_{1,1}^{1,-1}(n,d)\right)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Deuteron, Vektor-Vektor	$K_z^{z\,\prime}(n,d)= \sqrt{\frac{2}{3}}\,T_{1,0}^{1,0}(n,d)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Deuteron, Vektor-Vektor	$K_z^{x\,\prime}(n,d)= -\frac{2}{\sqrt{3}}\,T_{1,0}^{1,1}(n,d)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Deuteron, Vektor-Vektor	$K_x^{z\,\prime}(n,d)= -\frac{2}{\sqrt{3}}\,T_{1,1}^{1,}(n,d)$

Tabelle 9: Polarisationsobservable; Zusammenhang zwischen kartesischem und sphärischem Formalismus, Teil 2.

In der Madison-Konvention [29] wurde festgelegt, Polarisationsobservable von Reaktionen, an denen Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen beteiligt sind und deren Polarisation gemessen wird, in kartesischen Koordinaten anzugeben. Dagegen werden die entsprechenden Observablen von Teilchen mit größerem Spin in sphärischen Koordinaten dargestellt. Der Zusammenhang ist ebenfalls in den Tabellen 8, 9 und 10 angegeben. Der Zusammenhang mit den ${}_{SLS}K_{i,j,k}^{l\,',m\,',n\,'}$ und den kartesischen Observablen findet sich in (5.145)[14].

[14] Es sei darauf hingewiesen, daß der sphärische Formalismus in dieser Arbeit nur benutzt wird, um die Bedeutung der Invarianzen für die Observablen einfach darstellen zu können, die numerischen Rechnungen wurden stets in kartesischen Koordinaten ausgeführt.

Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Deuteron, Vektor-Tensor	$K_x^{x'y'}(n,d)=$ $-i\,\frac{\sqrt{6}}{2}\left(T_{1,1}^{2,2}(n,d)-T_{1,1}^{2,-2}(n,d)\right)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Deuteron, Vektor-Tensor	$K_x^{y'z'}(n,d)=$ $i\,\frac{\sqrt{6}}{2}\left(T_{1,1}^{2,-1}(n,d)+T_{1,1}^{2,1}(n,d)\right)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Deuteron, Vektor-Tensor	$K_y^{x'z'}(n,d)=$ $i\,\frac{\sqrt{6}}{2}\left(T_{1,1}^{2,-1}(n,d)-T_{1,1}^{2,1}(n,d)\right)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Deuteron, Vektor-Tensor	$K_y^{x'x'}(n,d)-K_y^{y'y'}(n,d)=$ $i\,\frac{\sqrt{6}}{2}\left(T_{1,1}^{2,-2}(n,d)-T_{1,1}^{2,2}(n,d)\right)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Deuteron, Vektor-Tensor	$K_y^{z'z'}(n,d)=\ 2\,i\,T_{1,1}^{2,0}(n,d)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Deuteron, Vektor-Tensor	$K_z^{x'y'}(n,d)=\ \sqrt{3}\,i\,T_{1,0}^{2,2}(n,d)$
Polarisations-Transfer-Koeffizient Neutron→Deuteron, Vektor-Tensor	$K_z^{y'z'}(n,d)=\ -\sqrt{3}\,i\,T_{1,0}^{2,1}(n,d)$

Tabelle 10: Polarisationsobservable; Zusammenhang zwischen kartesischem und sphärischem Formalismus, Teil 3.

$$
\begin{array}{lll}
A_y = K_{200}^{000} & P^{y'} = K_{002}^{000} & P^{z'z'} = K_{330}^{000} \\
P^{x'z'} = K_{013}^{000} & K_x^{x'}(n,n) = K_{100}^{100} & K_y^{y'}(n,n) = K_{200}^{200} \\
K_z^{z'}(n,n) = K_{300}^{300} & K_z^{x'}(n,n) = K_{300}^{100} & K_x^{z'}(n,n) = K_{100}^{300} \\
K_x^{x'}(n,d) = K_{100}^{001} & K_y^{y'}(n,d) = K_{200}^{002} & K_z^{z'}(n,d) = K_{300}^{003} \\
K_z^{x'}(n,d) = K_{003}^{300} & K_x^{z'}(n,d) = K_{100}^{003} & K_x^{x'y'}(n,d) = K_{100}^{012} \\
K_x^{y'z'}(n,d) = K_{100}^{023} & K_y^{x'z'}(n,d) = K_{200}^{013} & K_y^{x'x'}(n,d) - K_y^{y'y'} = K_{200}^{011} - K_{200}^{022} \\
K_y^{z'z'}(n,d) = K_{200}^{033} & K_z^{x'y'}(n,d) = K_{300}^{012} & K_z^{y'z'}(n,d) = K_{300}^{023}.
\end{array}
\tag{5.145}
$$

6 Einige Anmerkungen zur Numerik des Zwei- und Dreiteilchen-Problems

Da die numerischen Probleme der Dreiteilchen-Rechnungen sehr ausführlich in [27] diskutiert werden, sollen hier nur einige charakteristische Unterschiede zu dieser Darstellung angegeben werden. Anstelle des dort zur Generierung des Zweiteilchen-Inputs verwendeten Paris-Potentials wird in dieser Arbeit die energieunabhängige Version Bonn-B und die energieabhängige Version OBEPT des Bonn-Potentials benutzt.

6.1 Der Zweiteilchen-Input

Obwohl die Erzeugung des für die Dreiteilchen-Rechnungen notwendigen Zweiteilchen-Inputs, sogenannte W-Matrix-Formfaktoren $\widetilde{W}^{c_2}_{L',L}(E;p,k)$ und normierte Zweiteilchen-Propagatoren $\widetilde{\Delta}^{c_2}_{k;L',L}(E+i0)$, prinzipiell problemlos ist, gestaltete sich dessen Berechnung für das Bonn-Potential doch wesentlicher aufwendiger als im Falle des Paris-Potentials. Beide Größen werden im Falle der energieunabhängigen Version für die Energien $(-\infty, E]$, im Falle des OBEPT im Energieintervall $[0, E^{rel}]$ benötigt. Hier sind E bzw. E^{rel} wieder die nicht-relativistischen bzw. relativistischen Dreiteilchen-Energien des Streuprozesses und m die Nukleonen-Masse. Dieser Energiebereich wird in jeweils drei Intervalle, zwei negative und ein positives unterteilt. Formfaktoren wie Propagatoren werden berechnet und in Form von Spline-Koeffizienten auf Dateien geschrieben, die von den Programmen der Dreiteilchen-Rechnung gelesen werden. Es zeigte sich, daß für eine korrekte Spline-Interpolation pro Energie-Intervall ein Zweiteilchen-Kanalabhängiges Energie-Mesh von 50 bis 150 Stützstellen nötig ist (beim Paris-Potential reichen teilweise 15). Insbesondere bei der energieabhängigen Version ist ein sehr dichtes Mesh notwendig, da die Absolutbeträge der Propagatoren im Bereich möglicher Bindungsenergien für, dem Betrag nach, zunehmende Energien stetig wachsen. Es kommt hinzu, daß sich die Propagatoren im negativen Energiebereich zum Teil in sehr schmalen Energiebändern stark ändern, was eine vernünftige Spline-Interpolation problematisch macht. Auch die Formfaktoren $\widetilde{W}^{c_2}_{L',L}(E;p,k)$ machen Probleme, da sie für beide Versionen des Bonn-Potentials bei kleinen Impulsen p instabil werden. Dieser Umstand muß durch zusätzliche Extrapolations-Routinen korrigiert werden, was wegen des Sachverhalts

$$\lim_{p\to 0} \widetilde{W}^{c_2}_{L',L}(E;p,k) \to \text{const.} \tag{6.1}$$

möglich ist.

Bei der energieabhängigen Version OBEPT trat ein weiteres Phänomen auf, welches die gesamten Rechnungen gefährdete. Interessanterweise wurden in vielen Zweiteilchen-Kanälen die Formfaktoren bei bestimmten negativen Energien singulär. Eine detaillierte Analyse dieses erstaunlichen Vorgangs ergab, daß offenbar das energieabhängige Bonn-Potential für p', p $\to \infty$ zu langsam gegen Null geht. Dieses Verhalten weisen jedenfalls die damit berechneten exakten T-Matrizen auf; es wird deutlich, wenn man die Darstellung der inversen Jost-Matrix $F^{-1c_2}_{k;L',L}(E+i0)$ durch $\hat{T}$-Matrizen

$$F^{-1c_2}_{k;L',L}(E+i0) = \delta_{L',L} - \int_0^\infty dq\, q^2\, q^{2L'}\, \frac{\hat{T}^{c_2}_{L',\hat{L}}(\hat{E}+i0;q,k)}{\hat{E}^{rel} - 2\sqrt{m^2+q^2}+i0} \tag{6.2}$$

verwendet. Es zeigt sich, daß bei diesen Energien das Integral über weite Bereiche des Parameter k divergiert. Da sich dieses Verhalten nicht in den $\hat{T}$-Matrizen wiederspiegelt, müssen offenbar wegen

$$\hat{T}^{c_2}_{L',L}(\hat{E}+i0;p,k) = p^{L'} \sum_{\hat{L}} \widetilde{W}^{c_2}_{L',\hat{L}}(\hat{E};p,k)\, \widetilde{F}^{c_2\,-1}_{k;\hat{L},L}(\hat{E}+i0) \tag{6.3}$$

die W-Matrizen ebenfalls divergieren. Hier meint $\widetilde{F}$ die mit $\widetilde{W}$ berechnete verallgemeinerte Jost-Matrix. Dieses, vernünftige Dreiteilchen-Rechnungen a priori in Frage stellende Verhalten konnte nur durch einen extremen k-Verlauf beseitigt werden. Natürlich ist in solchen Situationen eine Optimierung des Zweiteilchen-Inputs über ein geeignetes k=k($\hat{E}$) praktisch unmöglich.

Abschließend muß darauf hingewiesen werden, daß selbstverständlich sämtliche Zweiteilchen-Observablen (Streuphasen und die Deuteron-Bindungswellenfunktion), die mittels der W-Matrix-Methode bestimmt wurden, mit Daten von Referenzrechnungen exakt übereinstimmen.

6.2 Die Dreiteilchen-Rechnungen

Zwar ist die Erstellung eines Programmpakets zur Lösung des Neutron-Deuteron-Streuproblems bei weitem aufwendiger und infolge der hochgradigen Kopplung deutlich komplexer als etwa die Erstellung der Software für den Zweiteilchen-Input, jedoch liegt die eigentliche Schwierigkeit in der Behandlung der nicht-stationären Singularitäten des effektiven Potentials, die in der Inhomogenität und auch im Kern der Integralgleichung auftauchen. Prinzipiell muß wieder zwischen den Versionen Bonn-B und OBEPT des Bonn-Potentials unterschieden werden; da aber aus den in Abschnitt 4.5.2 genannten Gründen bei Rechnungen mit dem OBEPT die nichtrelativistische effektive Potential-Matrix verwendet wurde, reicht es hier, sich auf den energieunabhängigen Fall zu beschränken. Hier gilt nach (4.94)

$$
\begin{aligned}
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3',c_3}_{L',L}(z;q',q) = 2 \sum_{\hat{L},\hat{L}'} {q'}^{\hat{L}'+\hat{L}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} \left\{ \sum_{h=0}^{\hat{L}'+\hat{L}} \left(\frac{q}{q'}\right)^h U^{c_3',c_3}_{\Gamma,I}(\ell,h) \right\} \frac{1}{2qq'} \\
\left[\int_{-1}^{1} dx \, \frac{1}{y-x} \left\{ {}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L',\hat{L}'}(\hat{E}';k,p'(x))\, P_\ell(x) \widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L},L}(\hat{E},p(x),k) - \right.\right. \\
\left.\left. {}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L',\hat{L}'}(\hat{E}';k,p'(y))\, P_\ell(y) \widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L},L}(\hat{E},p(y),k) \right\} \right] \\
+ {}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L',\hat{L}'}(\hat{E}';k,p'(y))\, P_\ell(y) \widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L},L}(\hat{E},p(y),k) \log\left[\frac{1+y}{1-y}\right] \\
- \pi\, i\, {}^{\dagger}\widetilde{W}^{c_2'}_{L',\hat{L}'}(\hat{E}';k,p'(y))\, P_\ell(y) \widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L},L}(\hat{E},p(y),k),
\end{aligned}
$$

wobei $y = \frac{1+\frac{E-q^2-q'^2}{qq'}}{1-\frac{E-q^2-q'^2}{qq'}}$ ist und

$$
p'(x) = \sqrt{q^2 + \frac{1}{4}q'^2 + qq'x} \qquad \text{und} \qquad p(x) = \sqrt{q'^2 + \frac{1}{4}q^2 + qq'x}.
$$

Der Ausdruck $\frac{1+y}{1-y}$ läßt sich in die Form

$$
\frac{1+y}{1-y} = \frac{(q+q_1)(q-q_2)}{(q-q_1)(q+q_2)} \tag{6.4}
$$

umschreiben mit

$$
q_1 = -\frac{q'}{2} + \sqrt{E - \frac{3}{4}q'^2} \geq -\frac{q'}{2} \qquad q_2 = \frac{q'}{2} + \sqrt{E - \frac{3}{4}q'^2} \geq 0 \tag{6.5}
$$

Im Kern der Integralgleichung ist q Integrationsvariable. Wie man sehr leicht feststellt, können Singularitäten nur in den Bereichen $0 \leq q, q' \leq \sqrt{\frac{4}{3}E}$ auftauchen. Spaltet man den Integrationsbereich $0 \leq q < \infty$ der Gleichung auf in die Bereiche $\left[0, \sqrt{\frac{4}{3}E}\right]$ und $\left[\sqrt{\frac{4}{3}E}, \infty\right)$, so erhält man im kritischen Intervall (in sehr vereinfachender Notation, $t(q', \bar{q})$ ist hier die Bestimmungsgröße der Integralgleichung) offenbar Integrale der Form

$$
\int_0^{\sqrt{\frac{4}{3}E}} dq\, K(q',q)\, \log(q-q_j)\, t(q,\bar{q}) \tag{6.6}
$$

die sich wegen

$$
\begin{aligned}
\int_0^{\sqrt{\frac{4}{3}E}} dq\, K(q',q)\, \log(q-q_j)\, t(q,\bar{q}) = \\
\int_0^{\sqrt{\frac{4}{3}E}} dq\, \left(K(q',q) - K(q',q_j)\right) \log(q-q_j)\, t(q,\bar{q}) + \\
K(q',q_j) \int_0^{\sqrt{\frac{4}{3}E}} dq\, \log(q-q_j)\, t(q_j,\bar{q})
\end{aligned}
\tag{6.7}
$$

und der Existenz des zweiten Integrals auf der rechten Seite sehr einfach regularisieren lassen.

Der Spezialfall q' = 0 soll noch behandelt werden, hier ist $p'(x) = q$ und $p(x) = \frac{1}{2}q$ und aus Gleichung (4.87)

$$
\begin{aligned}
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3',c_3}_{L',L}(z;q',q) = 2 \sum_{\hat{L},\hat{L}'} q'^{\hat{L}'+\hat{L}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} \left\{ \sum_{h=0}^{\hat{L}'+\hat{L}} \left(\frac{q}{q'}\right)^h U^{c_3',c_3}_{\Gamma,I}(\ell,h) \right\} \\
\frac{1}{2} \int dp\, p^2\, dp'\, p'^2 \int_{-1}^{1} dx\, \frac{P_\ell(x)}{p'^{\hat{L}'}(x)\, p^{\hat{L}}(x)} \\
\frac{{}^\dagger\widetilde{W}^{c_2'}_{L',\hat{L}'}(\hat{E}';k,p')\, p'^{\hat{L}'}\, p^{\hat{L}}\, \widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L},L}(\hat{E},p,k)}{z - p^2 - \frac{3}{4}q^2} \frac{\delta(p'-p'(x))\,\delta(p-p(x))}{p'^2\, p^2}
\end{aligned}
$$

wird wegen des jetzt auftretenden $\delta_{\hat{L}',\hat{L}}$

$$
\begin{aligned}
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3',c_3}_{L',L}(z;0,q) = \sum_{\hat{L},\hat{L}'} q^{\hat{L}'+\hat{L}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} U^{c_3',c_3}_{\Gamma,I}(\ell,\hat{L}'+\hat{L}) \\
\frac{{}^\dagger\widetilde{W}^{c_2'}_{L',\hat{L}'}(\hat{E}';k,q)\, \widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L},L}(\hat{E},\frac{1}{2}q,k)}{z-q^2} \int_{-1}^{1} dx\, P_\ell(x)
\end{aligned}
\tag{6.8}
$$

oder

$$
\begin{aligned}
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3',c_3}_{L',L}(z;0,q) = \frac{1}{z-q^2} \sum_{\hat{L},\hat{L}'} q^{\hat{L}'+\hat{L}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} U^{c_3',c_3}_{\Gamma,I}(\ell,\hat{L}'+\hat{L}) \\
{}^\dagger\widetilde{W}^{c_2'}_{L',\hat{L}'}(\hat{E}';k,q)\, \widetilde{W}^{c_2}_{\hat{L},L}(\hat{E},\frac{1}{2}q,k).
\end{aligned}
\tag{6.9}
$$

In vereinfachender Notation ist also

$$
{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3',c_3}_{L',L}(z;0,q) = \frac{\tilde{V}(q)}{E+i0-q^2} \tag{6.10}
$$

mit einem Pol q=$\sqrt{E}$. Das Integral der Integralgleichung, wieder sehr vereinfacht geschrieben, wird dann als Cauchy-Hauptwertintegral

$$
\begin{aligned}
\int dq\, q^2\, \frac{\tilde{V}(q)\, \widetilde{\Delta}(E-\frac{3}{4}q^2+i0)\, t(q,\bar{q})}{E+i0-q^2} = \\
P \int dq\, q^2\, \frac{\tilde{V}(q)\, \widetilde{\Delta}(E-\frac{3}{4}q^2+i0)\, t(q,\bar{q})}{E-q^2} - \pi\, i\, \tilde{V}\left(\sqrt{E}\right)\, \widetilde{\Delta}\left(\frac{1}{4}E\right)\, t\left(\sqrt{E},\bar{q}\right)
\end{aligned}
\tag{6.11}
$$

regularisiert. Auf die gleiche Weise wird der Pol bei der Deuteron-Bindungsenergie behandelt.

7 Die Ergebnisse

In diesem Kapitel sollen die numerischen Resultate dieser Arbeit vorgestellt werden. Es handelt sich dabei im wesentlichen um die Bestimmung der Triton-Bindungsenergie, um Wirkungsquerschnitte und um die Polarisations-Observablen. Alle hier präsentierten Ergebnisse sind im Rahmen der W-Matrix-Methode, wie sie in den vorigen Kapiteln erläutert wurde, und unter Verwendung der energieunabhängigen Version Bonn-B und der energieabhängigen Version OBEPT des Bonn-Potentials entstanden. Folgende Anmerkung zu Ergebnissen, die die energieabhängige Version benutzen: Im Abschnitt 4.5.2 wurde beschrieben, daß es bisher nicht gelungen ist, bei Verwendung der energieabhängigen Version des Bonn-Potentials ein modifiziertes adäquates effektives Potential zu finden. Deswegen und zu Testzwecken wurden Dreiteilchen-Rechnungen mit dem energieabhängigen Bonn-Potential unter Verwendung des nicht-modifizierten effektiven Potentials (4.94) vorgenommen. Die jeweiligen Ergebnisse werden im folgenden deutlich und eindeutig gekennzeichnet.

Um die durchgeführten Rechnungen und die daraus resultierenden Ergebnisse eindeutig zu kennzeichnen, muß noch auf die Zwei- und Dreiteilchen-Kanäle eingegangen werden, die in den Rechnungen berücksichtigt wurden.

^SL_J	J^π
$^1S_0$	0^+
$^3S_1 - {}^3D_1$	1^+
$^3P_0$	0^-
$^1P_1$	1^-
$^3P_1$	1^-
$^1D_2$	2^+
$^3D_2$	2^+
$^3P_2 - {}^3F_2$	2^-
$^1F_3$	3^-
$^3F_3$	3^-
$^3D_3 - {}^3G_3$	3^+

Tabelle 11: Anzahl der berücksichtigte Zweiteilchen-Kanäle bei einer J $\leq$ 3 Rechnung zur Bestimmung der Triton-Bindungsenergie.

J=0	$k=\frac{1}{2}$	$\Gamma =$	$\lvert \ell - \frac{1}{2} \rvert$,			$\ell + \frac{1}{2}$
J=1	$k=\frac{1}{2}$	$\Gamma =$	$\lvert \ell - \frac{1}{2} \rvert$,			$\ell + \frac{1}{2}$
	$k=\frac{3}{2}$	$\Gamma =$	$\lvert \ell - \frac{3}{2} \rvert$,	$\lvert \ell - \frac{1}{2} \rvert$,	...,	$\ell + \frac{3}{2}$
J=2	$k=\frac{3}{2}$	$\Gamma =$	$\lvert \ell - \frac{3}{2} \rvert$,	$\lvert \ell - \frac{1}{2} \rvert$,	...,	$\ell + \frac{3}{2}$
	$k=\frac{5}{2}$	$\Gamma =$	$\lvert \ell - \frac{5}{2} \rvert$,	$\lvert \ell - \frac{3}{2} \rvert$,	...,	$\ell + \frac{5}{2}$
J=3	$k=\frac{5}{2}$	$\Gamma =$	$\lvert \ell - \frac{5}{2} \rvert$,	$\lvert \ell - \frac{3}{2} \rvert$,	...,	$\ell + \frac{5}{2}$
	$k=\frac{7}{2}$	$\Gamma =$	$\lvert \ell - \frac{7}{2} \rvert$,	$\lvert \ell - \frac{5}{2} \rvert$,	...,	$\ell + \frac{7}{2}$

Tabelle 12: Mögliche Kanalspins und Dreiteilchen-Drehimpulse.

7.1 Zweiteilchen- und Dreiteilchen-Kanäle

Die AGS-Gleichungen im W-Matrix-Formalismus lauten gemäß (4.81)

$$
\begin{aligned}
&{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})^{c_3',c_3}_{L',L}(E+i0;q',q) = {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3',c_3}_{L',L}(E+i0;q',q) + \\
&\sum_{c_3'',L'',L'''} \int dq''\,q''^2\;{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AV})^{c_3',c_3''}_{L',L''}(E+i0;q',q'')\;\widetilde{\Delta}^{c_3''}_{k;L'',L'''}(E-\frac{3q''^2}{4}+i0) \\
&{}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})^{c_3'',c_3}_{L''',L}(E+i0;q'',q),
\end{aligned}
$$

wobei die Summation über c_3=(SJT,k,ℓ) alle J berücksichtigt. Um Rechnungen praktisch durchführen zu können, muß ein endliches J festgelegt werden, das somit die Anzahl der berücksichtigten Zweiteilchen-Kanäle bestimmt. Die meisten der hier veröffentlichten, die Streurechnungen betreffenden Ergebnisse sind sog. $J \leq 2$-Rechnungen, berücksichtigen also die Zweiteilchen-Kanäle ${}^1S_0$, ${}^3P_0$, ${}^1P_1$, ${}^3P_1$, sowie ${}^3S_1 -{}^3 D_1$, ${}^1D_2$ und ${}^3P_2 -{}^3 F_2$, allerdings existieren auch Ergebnisse aus J$\leq$ 3-Rechnungen, die zusätzlich die Partialwellen ${}^1F_3$, ${}^3F_3$ und ${}^3D_3 - {}^3G_3$ beinhalten (Tabelle 11). Bei der Bestimmung der Triton-Bindungsenergie werden Ergebnisse aus J $\leq 1^+$-Rechnungen (${}^1S_0$, ${}^3S_1 -{}^3 D_1$), J $\leq$ 1-Rechnungen (${}^1S_0$, ${}^3P_0$, ${}^1P_1$, ${}^3P_1$ und ${}^3S_1 -{}^3 D_1$), J $\leq$ 2- und J $\leq$ 3-Rechnungen präsentiert.

Aus den Zweiteilchen-Kanälen konstruiert man sich durch Drehimpulskopplung von J mit dem Spin s des dritten asymptotisch freien Neutron den Kanalspin $|J-s| \leq k \leq J+s$ und daraus durch Kopplung mit dessen Bahndrehimpuls ℓ den Gesamtdrehimpuls $|k-\ell| \leq \Gamma \leq k+\ell$. Zu vorgegebenem Γ^{Π} ergeben sich dann aus jedem Zweiteilchen-Kanal eine bestimmte Anzahl von Dreiteilchen-Kanälen. So läßt sich der ${}^1S_0$-Kanal mit k = $\frac{1}{2}$ und ℓ = 0,1 zu $\Gamma = \frac{1}{2}$ koppeln, wobei die beiden so konstruierten Dreiteilchen-Kanäle verschiedene Dreiteilchen-Parität besitzen. Dieselbe Vorgehensweise liefert generell wegen $k = J \pm \frac{1}{2}$ und

$$\left|\ell - (J \pm \frac{1}{2})\right| \leq \Gamma \leq \ell + J \pm \frac{1}{2}, \tag{7.1}$$

so daß sich im einzelnen Tabelle 12 ergibt. Die berücksichtigten Dreiteilchen-Kanäle bei einer J $\leq$ 3-Rechnung zur Bestimmung der Triton-Bindungsenergie sind in Tabelle 13 angegeben; hier wird sofort deutlich, welche Kanäle zu einer J $\leq 1^+$- bzw. J $\leq$ 1-Rechnung berücksichtigt werden müssen. Bei Neutron-Deuteron-Streurechnungen kommen noch andere Kanäle hinzu, weil die Bedingung $\Gamma^\Pi = \frac{1}{2}^+$ nicht mehr erfüllt sein muß. Γ kann hier alle nach den Regeln der Drehimpuls-Kopplung erlaubten Werte annehmen und wird wesentlich durch den Subsystem-Drehimpuls J und den Bahndrehimpuls des asymptotisch freien Neutrons ℓ bestimmt; $\Pi = \pm 1$. Die Anzahl der Kanäle ist für jedes Γ unabhängig von der Dreiteilchen-Parität, ändert sich jedoch mit dem betrachteten Γ. Da die involvierten Kanäle für jedes Γ^Π im wesentlichen verschieden sind, wird in Tabelle 14 ihre Anzahl in Abhängigkeit vom Dreiteilchen-Gesamtdrehimpuls für eine J $\leq$ 2 Rechnung aufgelistet. Für Werte von Γ, die größer als $\frac{5}{2}$ sind, bleibt die zugehörige Anzahl der Kanäle dieselbe. Tabelle 15 zeigt, daß gerade beim Streuproblem die Anzahl der Dreiteilchen-Kanäle mit wachsendem J drastisch ansteigt, was infolge deren hochgradiger Kopplung die Dimension des zu lösenden Gleichungssystems dramatisch vergrößert. Andererseits ist zu einer stabilen Bestimmung der Polarisationsobservablen die Berücksichtigung des Subsystem-Inputs bis J $\leq$ 2 unumgänglich. Beide Fakten haben zur Folge, daß solche Rechnungen sowohl hinsichtlich der Hauptspeicherplatz-Anforderung als auch hinsichtlich des Bedarfs an Rechenzeit enorm aufwendig sind.

Ganz analog zur Beschränkung auf ein endliches J in (4.81) ist es offenbar nötig, sich auf ein endliches maximales Γ und damit auf einen maximalen Bahndrehimpuls des asymptotisch freien Neutrons zu beschränken. In (5.4) war nämlich die Übergangsamplitude durch

$$\begin{aligned}(\mathcal{AT})^{m_s{}',m_s}_{M_J{}',M_J}(z;\vec{q}\,',\vec{q}) = \sum_{\Gamma,M_\Gamma,\ell',m_{\ell}{}',\ell,m_\ell,k',m_k{}',k,m_k} Y_{\ell',m_{\ell}{}'}(\hat{q}')\, Y_{\ell,m_\ell}(\hat{q}) \\ \langle\, m_{\ell'}\ell', m_{k'}k' \,|\, \Gamma M_\Gamma, k', \ell' \,\rangle \, \langle\, m_\ell \ell, m_k k \,|\, \Gamma M_\Gamma, k, \ell \,\rangle \langle\, m_s' s, M_J' J \,|\, k' m_{k'}, J, s \,\rangle \\ \langle\, m_s s, M_J J \,|\, k m_k, J, s \,\rangle \sum_{L',L} {}^{\Gamma,I}(\mathcal{AT})^{c_2^D,c_2^D;k',k;\ell',\ell}_{L',L}(z;q',q),\end{aligned}$$

gegeben. Die Wahl von Γ, die ersichtlich nur in Streurechnungen eine Rolle spielt, wird im wesentlichen von der Stabilität der Polarisationsobservablen bestimmt. Denn es hat sich gezeigt, daß Wirkungsquerschnitte sehr viel schneller konvergent sind ($\Gamma = \frac{11}{2}$) als Polarisationsobservable ($\Gamma = \frac{19}{2}$). Nichtsdestoweniger werden die Streuamplituden bis zu diesem maximalen Γ benötigt.

An dieser Stelle sollen auch die in jedem Zweiteilchen-Kanal verwendeten k-Verläufe angegeben werden. Der Zweiteilchen-Input wird im Falle des energieunab-

Subsystem	L	S	J^π	k	ℓ	Γ^Π
$^1S_0$	0	0	0^+	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}^+$
$^3S_1$	0	1	1^+	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}^+$
$^3S_1$	0	1	1^+	$\frac{3}{2}$	2	$\frac{1}{2}^+$
$^3D_1$	2	1	1^+	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}^+$
$^3D_1$	2	1	1^+	$\frac{3}{2}$	2	$\frac{1}{2}^+$
$^3P_0$	1	1	0^-	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}^+$
$^1P_1$	1	0	1^-	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}^+$
$^1P_1$	1	1	1^-	$\frac{3}{2}$	1	$\frac{1}{2}^+$
$^3P_1$	1	1	1^-	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}^+$
$^3P_1$	1	1	1^-	$\frac{3}{2}$	1	$\frac{1}{2}^+$
$^1D_2$	2	0	2^+	$\frac{3}{2}$	2	$\frac{1}{2}^+$
$^1D_2$	2	0	2^+	$\frac{5}{2}$	2	$\frac{1}{2}^+$
$^3D_2$	2	1	2^+	$\frac{3}{2}$	2	$\frac{1}{2}^+$
$^3D_2$	2	1	2^+	$\frac{5}{2}$	2	$\frac{1}{2}^+$
$^3P_2$	1	1	2^-	$\frac{3}{2}$	1	$\frac{1}{2}^+$
$^3P_2$	1	1	2^-	$\frac{5}{2}$	3	$\frac{1}{2}^+$
$^3F_2$	3	1	2^-	$\frac{3}{2}$	1	$\frac{1}{2}^+$
$^3F_2$	3	1	2^-	$\frac{5}{2}$	3	$\frac{1}{2}^+$
$^1F_3$	3	0	3^-	$\frac{5}{2}$	3	$\frac{1}{2}^+$
$^1F_3$	3	0	3^-	$\frac{7}{2}$	3	$\frac{1}{2}^+$
$^3F_3$	3	1	3^-	$\frac{5}{2}$	3	$\frac{1}{2}^+$
$^3F_3$	3	1	3^-	$\frac{7}{2}$	3	$\frac{1}{2}^+$
$^3D_3$	3	1	3^+	$\frac{5}{2}$	2	$\frac{1}{2}^+$
$^3D_3$	3	1	3^+	$\frac{7}{2}$	4	$\frac{1}{2}^+$
$^3G_3$	3	1	3^+	$\frac{5}{2}$	2	$\frac{1}{2}^+$
$^3G_3$	3	1	3^+	$\frac{7}{2}$	4	$\frac{1}{2}^+$

Tabelle 13: Sämtliche Dreiteilchen-Kanäle einer $J \leq 3$-Rechnung zur Bestimmung der Triton-Bindungsenergie.

Subsystem	Anzahl der Dreiteilchen-Kanäle		
	$\Gamma = \frac{1}{2}$	$\Gamma = \frac{3}{2}$	$\Gamma \geq \frac{5}{2}$
$^1S_0$	1	1	1
$^3S_1 - {}^3D_1$	4	6	6
$^3P_0$	1	1	1
$^1P_1$	2	3	3
$^3P_1$	2	3	3
$^1D_2$	2	4	5
$^3D_2$	2	4	5
$^3P_2 - {}^3F_2$	4	8	10

Tabelle 14: Anzahl der Dreiteilchen-Kanäle in Abhängigkeit vom Gesamtdrehimpuls Γ für eine J$\leq$ 2-Rechnung.

Subsystem-Input	Anzahl der Dreiteilchen-Kanäle
J $\leq 1^+$	7
J $\leq$ 1	18
J $\leq$ 2	34
J $\leq$ 3	58

Tabelle 15: Anzahl der Dreiteilchen-Kanäle in Abhängigkeit vom berücksichtigtem Subsystem-Input.

hängigen Bonn-Potentials im Energieintervall $(-\infty, E]$, im Falle der energieabhängigen Version im Intervall $[-2m, E]$ benötigt; hier ist E wieder die (nicht-relativistische) CM-Energie des Dreiteilchen-Systems. Es ist zu bedenken, daß im energieabhängigen Fall für $E^{rel} < 2m$ $E^{rel} = 2m + \hat{E}$ gilt, wobei $\hat{E}$ die nicht-relativistische Zweiteilchen-Energie ist. Für $E^{rel} \geq 2m$ ist $E^{rel} = 2\sqrt{m^2 + k^2}$ und $\hat{E} = \frac{k^2}{m}$ ist die nicht-relativistische Energie im CM-System der beiden Nukleonen. Wie schon weiter oben erwähnt, sind Anti-Nukleonen-Zustände im feldtheoretischen Ansatz zur Konstruktion der energieabhängigen Version a-priori ausgeschlossen [17], daher die Beschränkung auf $-2m \geq \hat{E}$.

Der Bereich möglicher Bindungsenergien wird in zwei Teilintervalle $\Delta\hat{E}_1 = (-\infty, \hat{E}_-^{c_2}]$ bzw. $\Delta\hat{E}_1 = [-2m, \hat{E}_-^{c_2}]$ und $\Delta\hat{E}_2 = [\hat{E}_-^{c_2}, 0]$ bzw. $\Delta\hat{E}_2 = [\hat{E}_-^{c_2}, 0]$ aufgespalten. Die Energie $\hat{E}_-^{c_2}$ ist hier abhängig vom Zweiteilchen-Kanal. In jedem dieser

Zweiteilchen-Kanal	$\Delta\hat{E}_1$				$\Delta\hat{E}_2$		
	E_{off} [MeV]	α	k_{max} [f^{-1}]	$\hat{E}_-$ [MeV]	E_{off} [MeV]	α	k_{max} [f^{-1}]
$^1S_0$	36	1.0	1.0	-1000.0	36	1.0	1.0
$^3S_1 - {}^3D_1$	23	1.1	1.1	-1000.0	23	1.1	1.1
$^3P_0$	400	2.0	4.0	-120.0	50	1.0	7.0
$^1P_1$	90	2.7	10.0	-1000.0	90	2.7	10.0
$^3P_1$	30	3.1	6.0	-1000.0	30	3.1	6.0
$^1D_2$	155	2.3	2.5	-1000.0	155	2.3	2.5
$^3D_2$	10	0.5	2.5	-10000.0	10	0.5	2.5
$^3P_2 - {}^3F_2$	150	1.7	1.8	-70.0	50	0.5	0.8
$^1F_3$	150	3.0	6.5	-1000.0	150	3.0	6.5
$^3F_3$	65	3.0	6.0	-10000.0	65	3.0	6.0
$^3D_3 - {}^3G_3$	40	3.5	3.0	-1000.0	40	3.5	3.0

Tabelle 16: Parameter, die $k^{c_2}=k^{c_2}(\hat{E})$ für den Zweiteilchen-Datensatz Bonn-B-1 festlegen.

Intervalle wurde ein k-Verlauf $k^{c_2}=k^{c_2}(\hat{E})$ gemäß (4.121), die Energie $\hat{E}$ und und der Parameter $E_{\rm off}$ müssen hier in Einheiten von [f^{-2}] gegeben sein,

$$k(\hat{E}) = \sqrt{\frac{E_{off} - \alpha\hat{E}}{3}}$$

festgelegt. Für die energieunabhängige Version Bonn-B des Bonn-Potentials ergeben sich die in Tabelle 16 angegeben Werte.

Der mit diesen k^{c2} berechnete Zweiteilchen-Input für eine J $\leq$ 3-Rechnung wird im folgenden als Datensatz Bonn-B-1 bezeichnet. Neben den Ergebnissen von Dreiteilchen-Rechnungen, die auf diesem Zweiteilchen-Input basieren, werden im folgenden auch noch solche gezeigt, deren Zweiteilchen-Daten durch marginal verschiedene k^{c_2} generiert wurden. Einzig im $^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal ist der Zweiteilchen-Input gemäß den in den Tabellen 17 bzw. 18 angegebenen Parametern gegenüber Tabelle 16 verändert worden, der Input aller anderen Zweiteilchen-Kanäle ist identisch.

Schließlich werden in Tabelle 19 noch die $k^{c_2}=k^{c_2}(\hat{E})$ angegeben, mit denen der Zweiteilchen-Input im Falle der energieabhängigen Version OBEPT des Bonn-Potentials generiert wurde. Wegen der vergleichsweise schlechten Ergebnisse sind hier nur maximal J $\leq$ 2-Rechnungen ausgeführt worden. Die im Vergleich zu den Tabellen 16 - 18 auffälligsten Unterschiede, nämlich die in bestimmten Energieintervallen konstanten $k^{c_2}(\hat{E})$ und die Bedingung $k_{min} = 2.0 \leq k(\hat{E}) \leq k_{max}$ im $^3P_0$-Kanal, sind in dieser Form zwingend notwendig, damit keine künstlichen Singularitäten in den Zweiteilchen-Propagatoren $\widetilde{\Delta}^{c_2}_{k;L',L}(\hat{E})$ auftreten. Hier muß noch fol-

Zweiteilchen-Kanal	$\Delta\hat{E}_1$				$\Delta\hat{E}_2$		
	E_{off} [MeV]	α	k_{max} [f^{-1}]	$\hat{E}_-$ [MeV]	E_{off} [MeV]	α	k_{max} [f^{-1}]
$^1S_0$	36	1.0	1.0	-1000.0	36	1.0	1.0
$^3S_1 - {}^3D_1$	23	1.1	1.1	-1000.0	23	1.1	1.1
$^3P_0$	400	2.0	4.0	-120.0	50	1.0	7.0
$^1P_1$	90	2.7	10.0	-1000.0	90	2.7	10.0
$^3P_1$	30	3.1	6.0	-1000.0	30	3.1	6.0
$^1D_2$	155	2.3	2.5	-1000.0	155	2.3	2.5
$^3D_2$	10	0.5	2.5	-10000.0	10	0.5	2.5
$^3P_2 - {}^3F_2$	35	1.0	1.0	-5000.0	35	1.0	1.0
$^1F_3$	150	3.0	6.5	-1000.0	150	3.0	6.5
$^3F_3$	65	3.0	6.0	-10000.0	65	3.0	6.0
$^3D_3 - {}^3G_3$	40	3.5	3.0	-1000.0	40	3.5	3.0

Tabelle 17: Parameter, die $k^{c_2}=k^{c_2}(\hat{E})$ für den Zweiteilchen-Datensatz Bonn-B-2 festlegen.

Zweiteilchen-Kanal	$\Delta\hat{E}_1$				$\Delta\hat{E}_2$		
	E_{off} [MeV]	α	k_{max} [f^{-1}]	$\hat{E}_-$ [MeV]	E_{off} [MeV]	α	k_{max} [f^{-1}]
$^1S_0$	36	1.0	1.0	-1000.0	35	1.0	1.6
$^3S_1 - {}^3D_1$	23	1.1	1.1	-1000.0	23	1.1	1.1
$^3P_0$	400	2.0	4.0	-120.0	50	1.0	7.0
$^1P_1$	90	2.7	10.0	-1000.0	90	2.7	10.0
$^3P_1$	30	3.1	6.0	-1000.0	30	3.1	6.0
$^1D_2$	155	2.3	2.5	-1000.0	155	2.3	2.5
$^3D_2$	10	0.5	2.5	-10000.0	10	0.5	2.5
$^3P_2 - {}^3F_2$	120	2.1	1.8	-60.0	85	1.1	0.8
$^1F_3$	150	3.0	6.5	-1000.0	150	3.0	6.5
$^3F_3$	65	3.0	6.0	-10000.0	65	3.0	6.0
$^3D_3 - {}^3G_3$	40	3.5	3.0	-1000.0	40	3.5	3.0

Tabelle 18: Parameter, die $k^{c_2}=k^{c_2}(\hat{E})$ für den Zweiteilchen-Datensatz Bonn-B-3 festlegen.

gendes angemerkt werden: wie schon mehrfach erwähnt, ist die energieabhängige Version OBEPT des Bonn-Potentials im negativen Energiebereich nur für -2m $\leq \hat{E}$ wohldefiniert. Andereseits wird im Kern der Dreiteilchen-Integralgleichung die volle

Zweiteilchen-Kanal	$\Delta\hat{E}_1$				$\Delta\hat{E}_2$		
	E_{off} [MeV]	α	k_{max} [f^{-1}]	$\hat{E}_-$ [MeV]	E_{off} [MeV]	α	k_{max} [f^{-1}]
$^1S_0$	25	1.0	1.0	-700.0	k(E)=0.2=constant		
$^3S_1 - {}^3D_1$	15	1.0	1.0	-1000.0	15	1.0	1.0
$^3P_0$	225	2.0	5.0	-1000.0	225	2.0	5.0*
$^1P_1$	15	4.7	1.9	-200.0	k(E)=8.0=constant		
$^3P_1$	20	2.8	5.0	-1000.0	20	2.8	5.0
$^1D_2$	2750	1.5	10.8	-400.0	90	2.5	5.8
$^3D_2$				-500.0	90	2.3	2.2
$^3P_2 - {}^3F_2$	1300	1.3	7.0	-200.0	23	0.7	0.9

Tabelle 19: Parameter, die k^{c_2}=$k^{c_2}(\hat{E})$ für den Zweiteilchen-Datensatz OBEPT-D festlegen. * Hier muß zusätzlich gelten $k_{min} = 2.0 \leq k(\hat{E}) \leq k_{max}$.

bzw. separable T-Matrix $T(z - \frac{3}{4}q^2)$, $q\epsilon[0,\infty)$[15] benötigt, also auch bei Energien $\hat{E} < -2m$. Es hat sich bei den praktischen Rechnungen gezeigt, daß die Ergebnisse vollkommen unabhängig davon sind, ob die Integration unter der zusätzlichen Bedingung -2m $\leq z - \frac{3}{4}q^2$ durchgeführt wird oder ob auch $z - \frac{3}{4}q^2 \leq -2m$ erlaubt ist. In dieser Hinsicht kann die energieabhängige Version wie die energieunabhängige behandelt werden.

Anzumerken bleibt noch, daß der Parameter k_{max} eine obere Schranke für $k(\hat{E})$ in jedem Energieintervall $\Delta\hat{E}_1$ und $\Delta\hat{E}_2$ und jedem Zweiteilchen-Kanal ist.

$$k^{c_2}(\hat{E}) \leq k^{c_2}_{max}. \tag{7.2}$$

Der Parameter α dient dem Anfitten von $k(\hat{E})$ an den maximalen Verlauf der Hilbert-Schmidt-Norm (Abschnitt 4.6.2).

7.2 Präsentation der Ergebnisse

Bevor die numerischen Ergebnisse dieser Arbeit vorgestellt werden, fühlt sich der Autor zu einigen allgemeinen Anmerkungen über experimentelle Vergleichsdaten und theoretische Referenzrechnungen sowie zu seinen generellen Erfahrungen im praktischen Umgang mit der W-Matrix-Methode verpflichtet.

Trotz der Fortschritte in der Meßtechnik, im Bau von Neutronenquellen und Deuterium-Targets existieren bedauerlicherweise kaum experimentelle Daten zu Po-

[15]Sofern keine relativistischen Korrekturen eingeführt werden.

larisationsobservablen, die aus *Neutron*-Deuteron-Streuexperimenten stammen. Das liegt sicherlich an der Kompliziertheit solcher Experimente; immerhin scheint sich die Situation gegenwärtig etwas zu bessern. Aus diesem bedauernswerten Grund finden sich in dieser Arbeit hauptsächlich experimentelle Daten, die aus *Proton*-Deuteron-Experimenten stammen. Ausnahmen werden deutlich und detalliert gekennzeichnet.

Ähnlich verhält es sich mit Referenzrechnungen, die ebenfals auf den in dieser Arbeit verwendeten Versionen OBEPT (energieabhängig) und Bonn-B (energieunabhängig) des Bonn-Potentials basieren. Rechnungen mit dem OBEPT existieren überhaupt nicht (mit Ausnahme eines, dem Autor dieser Arbeit kläglich erscheinenden Versuchs zur Bestimmung der Triton-Bindunssenergie) [19]. Etwas besser stellt sich die Situation bei der energieunabhängigen Version Bonn-B dar; hier findet sich in der Literatur hin und wieder eine Polarisationsobservable, die einer sogenannt exakten (also zweidimensionalen) Faddeev-artigen Rechnung entstammt. Selbst zur Triton-Bindungsenergie sind nur die Ergebnisse einer exakten $J \leq 1^+$- und $J \leq 4$-Rechnung [16] veröffentlicht. Resultate zu Dreiteilchen-Streurechnungen, die auf separablen Approximationen der Zweiteilchen-T-Matrix verschieden von der W-Matrix-Methode beruhen und Bonn-B verwenden, gibt es nach allem Wissen des Autors dieser Arbeit nicht.

7.2.1 Die Triton-Bindungsenergie

Experimentell ist die Triton-Bindungsenergie zu

$$\mathbf{E}_T^{EXP} = -8.48 \ \mathbf{MeV}$$

bestimmt worden [37]. Einen ersten Hinweis auf die Qualität der W-Matrix-Methode, d.h. auf die Qualität der separablen Approximation und, was eng damit zusammenhängt, des gewählten k-Verlaufs erhält man durch Berechnung der Triton-Bindungsenergie E_T. Sie ist ohne allzu großen numerischen Aufwand zu erhalten, und man sollte erwarten, daß Zweiteilchen-Input-Datensätze, die aus Vergleichsrechnungen stammende Referenzwerte von E_T gut reproduzieren, auch vernünftige Ergebnisse in Streurechnungen liefern. Leider hat sich das nur sehr eingeschränkt bestätigt. Hinzu kommt das schon mehrfach erwähnte Problem, in jedem Zweiteilchen-Kanal den k-Verlauf so festzulegen, daß die Referenzwerte reproduziert werden. Spätestens bei $J \leq 2$-Rechnungen scheint das Unterfangen nach aller Erfahrung nahezu aussichtslos, was interessanterweise am ${}^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal liegt. In aller Regel liegen dessen Beiträge zur Bindungsenergie des Triton unter 5% [36].

Sogenannt exakte zweidimensionale Faddeev-Referenzrechnungen [38], die mit der energieunabhängigen Version Bonn-B des Bonn-Potentials ausgeführt wurden, geben die in Tabelle 20 angegebenen Werte an. Leider existiert keine J $\leq$ 3-Rechnung. Diesen Daten können die mit der W-Matrix-Methode bestimmten Werte aus

Berücksichtigter Zweiteilchen-Input	$J \leq 1^+$	$J \leq 1$	$J \leq 2$	$J \leq 3$	$J \leq 4$
Anzahl der Dreiteilchen-Kanäle	5	10	18	26	34
E_T $[MeV]$	-8.16 [16]	-7.896 [38]	-8.099 [38]	-	-8.14 [16]

Tabelle 20: Referenzrechnungen zur Triton-Bindungsenergie in Abhängigkeit vom berücksichtigten Subsystem-Input für die energieunabängige Version Bonn-B des Bonn-Potentials.

Berücksichtigter Zweiteilchen-Input	$J \leq 1^+$	$J \leq 1$	$J \leq 2$	$J \leq 3$	Verwendeter Zweiteilchen-Datensatz
Anzahl der Dreiteilchen-Kanäle	5	10	18	26	
E_T $[MeV]$	-8.156	-7.894	$\begin{cases} -8.326 \\ -7.8309 \\ -8.165 \end{cases}$	-8.419 -7.925 -8.226	Bonn-B-1 Bonn-B-2 Bonn-B-3

Tabelle 21: Triton-Bindungsenergien berechnet mit der W-Matrix-Methode in Abhängigkeit vom berücksichtigten Subsystem-Input und von den Datensätzen aus den Tabellen 10, 11 und 12 für die energieunabängige Version Bonn-B des Bonn-Potentials.

Tabelle 21 entgegengestellt werden. Als erstes fällt die schon oben angesprochene Abhängigkeit der Bindungsenergien vom k-Verlauf für J $\leq$ 2- und J $\leq$ 3-Rechnungen auf. Diese fast schon als extrem zu bezeichnende Variation der Energien ist ausschließlich auf den gekoppelten $^3P_2$–$^3F_2$-Kanal zurückzuführen. Variationen beim k-Verlauf in den nicht-gekoppelten D- und F-Wellen wirken sich, bei festem ${}^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal, dagegen kaum aus. Sie ist angesichts der geringen Änderungen in der Parametrisierung von $k(\hat{E})$ mehr oder minder unverständlich und kann nur hypothetisch dadurch erklärt werden, daß dies Auswirkungen künstlicher Singularitäten des Propagators bei bestimmten k-Verläufen sind. Gerade in diesem Zweiteilchen-Kanal häufen sich die Nullstellen des inversen Zweiteilchen-Propagators $\left(\tilde{\Delta}_{k;L',L^{c_2}}\right)^{-1}(E+i0) = 0$ bei bestimmten k=k($\hat{E}$). Dementsprechend ist es sehr schwierig ist, einen nicht-singulären k-Verlauf zu finden, der hinreichend weit an solchen Singularitäten vorbeiläuft, so daß deren nicht abzuschätzender Einfluß auf den Zweiteilchen-Input und somit auch auf die Dreiteilchen-Ergebnisse minimiert wird. Möglicherweise spielt hier auch der Nulldurchgang der Determinante der On-Shell-W-Matrix bei ungefähr 45 MeV in genau diesem Kanal eine Rolle (siehe hierzu Abschnitt 7.3). Diese dominante Abhängigkeit der Bindungsenergien vom k-Verlauf im ${}^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal macht es wiederum praktisch unmöglich, durch Variation des k-Verlaufs in diesem Kanal das mit der W-Matrix-Methode bestimmte E_T in Übereinstimmung mit dem Referenzwert zu bekommen. Es kommt hinzu, daß sich die starke k-Abhängigkeit des Zweiteilchen-Inputs in diesem Kanal ebenso auf einige Polarisationsobservable auswirkt (siehe hierzu Abschnitt 7.2.2), wobei die Veränderungen von Bindungsenergie einerseits und Polarisationsobservablen andererseits durchaus konträr sein können. So ist es häufig der Fall, das eine durch Variation des k-Verlaufs im ${}^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal hervorgerufene Annäherung der mit der W-Matrix-Methode bestimmten Bindungsenergie an den Referenzwert eine deutliche Verschlechterung einiger Polarisationsobservabler gegenüber experimentellen Daten oder Referenzrechnungen zur Folge hat. Zusätzlich versagen gerade wegen dieser sensiblen k-Abhängigkeit alle in Abschnitt (4.6) vorgestellten Verfahren, k($\hat{E}$) geeignet zu parametrisieren, so daß man auf simples Ausprobieren, also das Prinzip *Trial and Error* angewiesen ist. Der Autor dieser Arbeit hat das in unzähligen Rechnungen zu spüren bekommen. Außerdem hat diese sensible k-Abhängigkeit sowohl des Zweiteilchen-Inputs als auch der Dreiteilchen-Observablen zur Folge, daß keinerlei relevanten Aussagen mehr über die Qualität der separablen Approximation der T-Matrix durch Half-On-Shell-W-Matrizen möglich sind. Intention der W-Matrix-Methode ist es bekanntlich, k($\hat{E}$) so festzulegen, daß experimentelle Dreiteilchen-Daten oder Ergebnisse von Referenzrechnungen „möglichst gut“ reproduziert werden. Das sehr häufig konträre Verhalten von Bindungenergie und Observablen des Streuprozesses gegenüber Variationen des k-Verlaufs macht das nahezu unmöglich. Zwar läßt sich letztlich nicht ausschließen, daß der „richtige“ k-Verlauf noch nicht gefunden ist, jedoch erscheint dem Autoren dieser Arbeit der Fall ziemlich hoffnungslos.

Es bleibt noch anzumerken, daß die in Tabelle 20 angeführten Bindungsenergien des Triton aus J $\leq$ 1- und J $\leq$ 2-Referenzrechnungen nicht veröffentlicht sind und dem Autoren erst beim Schreiben dieser Arbeit zugänglich wurden, so daß er keinerlei Versuche mehr gemacht hat, seine Ergebnisse an jene Energien anzugleichen. Die oben angesprochene Problematik macht wohl den Grund dafür deutlich.

Im Falle der $J \leq 1^+$- und der $J \leq 1$-Rechnung sind die Resultate ohnehin identisch, die $J \leq 2$-Rechnung hätte nach aller Erfahrung wegen des involvierten ${}^3P_2-{}^3F_2$-Kanals sehr viel Probleme gemacht. Immerhin unterscheiden sich der Referenzwert und die mittels der W-Matrix-Methode bei Benutzung von Datensatz Bonn-B-3 auch nur um 0.82%. Leider liefert Datensatz Bonn-B-3 sehr viel schlechtere Analysierstärken als etwa Datensatz Bonn-B-1 (siehe Abschnitt 7.2.2), ein Phänomen, daß vermutlich ebenfalls mit dem Nulldurchgang der On-Shell-W-Matrix bei etwa 45 MeV in diesem Kanal und also dem Versagen der W-Matrix-Methode an dieser Stellem zusammenhängt. Die angegebenen Datensätze Bonn-B-1, Bonn-B-2 und Bonn-B-3 liefern die vergleichsweise „besten"Ergebnisse, wenn die energieunabhängige Version Bonn-B in Dreiteilchen-Rechnungen verwendet wird.

Trotz einer fehlenden Referenzrechnung läßt die ungewöhnlich starke Zunahme der mittels der W-Matrix-Methode in einer $J \leq 3$-Rechnung bestimmten Triton-Bindungsenergie um ungefähr 0.1 Mev, verglichen mit dem Ergebnis der jeweiligen $J \leq 2$-Rechnung, für alle drei Datensätze darauf schließen, daß entweder der k-Verlauf im ${}^3D_3-{}^3G_3$-Kanal höchst problematisch ist, oder daß das eben angesprochene Versagen der W-Matrix-Methode im ${}^3P_2-{}^3F_2$-Kanal infolge der starken Kopplung verschiedener Kanäle sich auch hier auswirkt. Da im Rahmen der W-Matrix-Methode nie $J \leq 4$-Rechnungen ausgeführt wurden[16], ist eine Korrektur von E_T in einer solchen Rechnung auf den Referenzwert -8.14 MeV zwar denkbar, erscheint nach aller Erfahrung allerdings äußerst unwahrscheinlich.

Berücksichtigter Zweiteilchen-Input	$J\leq 1^+$	$J\leq 1$	$J\leq 2$
Anzahl der Dreiteilchen-Kanäle	5	10	18
E_T $[MeV]$	-6.338	-6.273	-6.326

Tabelle 22: Triton-Bindungsenergien berechnet mit der W-Matrix-Methode in Abhängigkeit vom berücksichtigten Subsystem-Input für die energieabhängige Version OBEPT des Bonn-Potentials (Datensatz OBEPT-D).

Für die energieabhängige Version OBEPT des Bonn-Potentials existieren bis auf eine Zweikanal-Rechnung mit reiner S-Wellen-Projektion des Zweiteilchen-Inputs

[16] Der Grund dafür ist die Vermutung, daß es schon auf dem Zweiteilchen-Level größere numerische Probleme geben wird. In der W-Matrix-Gleichung (4.33) treten Terme p^{2L} auf, mit denen andere Größen multipliziert oder durch die dividiert wird. Für J=4 ist wegen L=J±1 maximal $p^{2L} = p^{10}$, was vermutlich einige Schwierigkeiten machen wird.

(nur die T-Matrizen im $^1S_0$- und im $^3S_1$-Kanal werden berücksichtigt) [19] keine Vergleichsrechnungen zur Bestimmung der Triton-Bindungsenergie. Die mittels der W-Matrix-Methode und dem Datensatz OBEPT-D bestimmten Werte sind in Tabelle 22 angegeben. In dieser Rechnung wurde das effektive Potential in der nicht-modifizierten Form (4.91) verwendet. Alle Versuche, mit modifizierten Versionen ein halbwegs vernünftiges Ergebnis zu erzielen, sind fehlgeschlagen.

Die so bestimmten Triton-Bindungsenergien liegen alle etwa zwei MeV unter den Ergebnissen aus Rechnungen mit der energieunabhängigen Version Bonn-B des Bonn-Potentials, ein zumindest etwas überraschendes Resultat, denn die energieabhängige Version OBEPT ist auf dem Zweiteilchen-Level den energieunabhängigen Versionen deutlich überlegen. Die Gründe für diese schlechten Resultate sind schwer anzugeben. Es ist sicherlich richtig, daß die energieabhängige Version des Bonn-Potentials formal eine relativistische Beschreibung der Zweinukleonen-Wechselwirkungen liefert; relativistisch ist hier wieder in rein kinematischen Sinne zu verstehen. Dagegen gehen die AGS-Gleichungen immer von einer vollständig nicht-relativistischen Beschreibung des Dreiteilchen-Problems aus. So gesehen liegt natürlich eine Inkonsistenz vor, relativistische Wechselwirkungen in den AGS-Gleichungen zu verwenden.

Daß andererseits die Benutzung der nicht-modifizierten Dreiteilchen-Greenfunktion bei Verwendung des enegieabhängigen Bonn-Potentials nicht adäquat ist, ist aus der Form der freien Zweiteilchen-Greenfunktion (4.101) ersichtlich. Demzufolge ist zu erwarten, daß Ergebnisse von Rechnungen, die das nicht-modifizierte effektive Potential benutzen, deutlich abweichen von denjenigen, die in adäquater und konsistenter Weise erzielt werden, wobei völlig offen ist, wie das zu machen ist. Letztlich, so scheint es, wird hier allein schon aus Gründen der Konsistenz eine korrekte relativistische[17] Neutron-Deuteron-Streutheorie erforderlich.

Natürlich sind auch bestimmte Mängel in der Konstruktion des energieabhängigen Bonn-Potentials nicht auszuschließen. So wird hier auf das in Abschnitt 6.1 angesprochene Phänomen verwiesen, daß bei bestimmten Energien im Bereich potentieller Bindungszustände die Formfaktoren divergieren. Zu umgehen war diese Schwierigkeit nur durch einen teilweise extremen k-Verlauf. Da solche Divergenzen nur in der energieabhängigen Version des Bonn-Potentials zu finden sind, und da die W-Matrix-Gleichung offensichtlich nicht-singulär ist, müssen sie ursächlich von der Energieabhängigkeit hervorgerufen sein. Inwieweit sich solche Phänomene auf Dreiteilchen-Rechnungen auswirken, ist unabsehbar.

Abschließend sei noch einmal hervorgehoben, daß es sehr unwahrscheinlich ist, die schlechten Ergebnisse im Triton-Bindungsproblem bei energieabhängiger

[17] Relativistisch ist hier wieder in kinematischem Sinne gemeint; bspw. sind Erzeugungsprozesse in dem Energiebereich, in den das OBEPT eine realistische Beschreibung der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung darstellt, auszuschließen.

Wechselwirkung auf die W-Matrix-Methode zurückzuführen. Immerhin ist das Resultat der oben angesprochenen Zweikanal-Rechnung zur Bindungsenergie des Triton bei reiner S-Wellen-Projektion des Zweiteilchen-Inputs und $\ell = 0$ mit dem Ergebnis E_T=-6.48Mev kompatibel mit Rechnungen im W-Matrix-Formalismus, mögliche Differenzen können durch einen anderen k-Verlauf kompensiert werden.

7.2.2 Wirkungsquerschnitte und Polarisationsobservable

Im folgenden werden die Observablen des Streuprozesses, d.h. differentielle und totale Wirkungsquerschnitte und eine Auswahl von Polarisationsobservablen vorgestellt. Es sei betont, daß es mit den im Verlauf dieser Arbeit konzipierten Programmen möglich ist, jede der 1296 $K_{i;j,k}^{l';m',n'}$ zu bestimmen. Wie schon oben erwähnt, mangelt es allerdings in der Literatur an experimentellen Vergleichsdaten bzw. an Referenzrechnungen für Neutron-Einschußenergien bis etwa 35 MeV (wegen des Versagens der W-Matrix-Methode bei etwa 45 MeV sind Ergebnisse, die im Rahmen dieses Formalismus berechnet werden, bei höheren Energien höchst fragwürdig, siehe hierzu Abschnitt 7.3). Fast alle präsentierten Observablen entstammen $J \leq 2$-Rechnungen, da sich hier einerseits der numerische Aufwand in erträglichen Grenzen hält (für eine vollständige Dreiteilchen-Rechnung bei Berücksichtigung aller Dreiteilchen-Gesamtdrehimpulse Γ^{Π} zwischen $\frac{1}{2}^{\pm}$ und $\frac{19}{2}^{\pm}$ benötigt man auf der IBM ES9000-320 des „Regionalen Hochschul-Rechenzentrums“ (RHRZ) der Universität Bonn etwa 30 CPU-Stunden). Andererseits ist es bekannt und im Rahmen dieser Arbeit bestätigt worden, daß Rechnungen, die entweder auf weniger Zweiteilchen-Input zurückgreifen (bspw. $J \leq 1^{+}$- oder $J \leq 1$-Rechnungen) oder weniger Gesamtdrehimpulse Γ^{Π} berücksichtigen, keine stabilen Ergebnisse liefern. Deswegen werden solche Resultate erst gar nicht vorgestellt, obwohl sie vorliegen.

Als experimentelle Vergleichsdaten dient einmal ein umfangreicher Datensatz, der von W. Grüebler zur Verfügung gestellt wurde und aus einem Proton-Deuteron-Streuexperiment bei 10 MeV resultiert [40, 39]. Zum anderen kam es im Rahmen dieser Arbeit zu einer Kollaboration mit der Gruppe von W. von Witsch vom „Institut für Strahlen- und Kernphysik“ (ISKP) der Universität Bonn. Dort wurde innerhalb eines Neutron-Deuteron-Streuexperiments Messungen des Polarisation-Transfer-Koeffizienten $K_y^{y'}$ des Neutrons bei 25 MeV vorgenommen. Als Referenzkurve für die Messungen benutzten die Experimentatoren unter anderem eine mit der W-Matrix-Methode produzierte Vorhersage dieser Observablen. Um sicherzustellen, daß diese Rechnung mit optimalem k=k($\hat{E}$) ausgeführt wird, wurden die verschiedenen k mit den im Abschnitt 4.6 beschriebenen Methoden so festgelegt, daß sowohl die bekannten Referenzdaten zur Triton-Bindungsenergie als auch -allerdings ladungsabhängige- $J \leq 3$-Rechnungen von H. Witala mit der energieunabhängigen Version Bonn-B bei 19 MeV zu einigen Polarisationsobservablen reproduziert wurden. Auf diese Weise entstanden die Zweiteilchen-Datensätze Bonn-B-1, Bonn-B-2 und Bonn-B-3. Für die Überlassung der Daten aus den Rechnungen von H. Witala sei Herrn von Witsch gedankt. Es war insbesondere wegen mangelnder Hauptspeicher-Kapazität unmöglich, diese $J \leq 3$-Rechnungen auf der ES9000-320 des RHRZ in Bonn auszuführen. Sie, sowie einige $J \leq 2$-Rechnungen wurden beim Höchstleistungs-Rechenzentrum (HLRZ) der KFA Jülich auf einer CRAY Y-MP8/832 durchgeführt und benötigten im Falle $J \leq 3$ pro Dreiteilchen-Energie etwa 30 CRAY-CPU-Stunden.

Sämtliche Rechnungen sind sowohl für die energieabhängige Version OBEPT als auch für die energieunabhängige Version Bonn-B durchgeführt worden. Im energieabhängigen Fall wird aus den in Abschnitt 7.2.1 genannten Gründen das nichtmodifizierte effektive Potential verwendet.

In Tabelle 23 sind die mittels der verschiedenen Zweiteilchen-Datensätze Bonn-B-1, Bonn-B-2, Bonn-B-3 und OBEPT-D in einer $J \leq 2$-Rechnung bestimmten totalen, elastischen und Aufbruchs-Wirkungsquerschnitte bei 10.0 MeV aufgeführt und werden mit experimentellen Daten verglichen.

	Bonn-B-1	Bonn-B-2	Bonn-B-3	OBEPT-D	Experiment [41]
σ_T $[mb]$	1033	1008	975	986	1038±10
σ $[mb]$	881	857	823	837	938± 56
σ_B $[mb]$	152	152	152	149	100±57

Tabelle 23: Totaler, elastischer und Aufbruchs-Wirkungsquerschnitt für verschiedene Zweiteilchen-Datensätze und experimentelle n-d-Daten bei 10.0 MeV.

Offensichtlich liegen ausschließlich die mit dem Zweiteilchen-Datensatz Bonn-B-1 generierten theoretischen Ergebnisse innerhalb des Genauigkeitsrahmens der experimentellen Daten, einmal abgesehen von dem Aufbruch-Wirkungsquerschnitt σ_B. Wie bei der Triton-Bindungsenergie ist die Variation der Wirkungsquerschnitte in Abhängigkeit vom k-Verlauf, d.h. vom Zweiteilchen-Datensatz Bonn-B-1, Bonn-B-2 oder Bonn-B-3, bemerkenswert. Auch hier zeigt sich, daß die Verwendung der energieabhängigen Version OBEPT des Bonn-Potentials keine Verbesserung sondern eine deutliche Verschlechterung der Ergebnisse zur Folge hat. Dieser Trend, der sich hier abzeichnet, wird insbesondere bei den Polarisationsobservablen deutlich werden.

In Abbildung 9 bis Abbildung 46 werden sowohl die in den Tabellen 3 bis 5 angegebenen und in einer J $\leq$ 2-Rechnung bei 10 MeV bestimmten Polarisationsobservablen als auch die entsprechenden experimentellen Daten [40, 39] gezeigt; dabei sind die Ergebnisse von Rechnungen mit Bonn-B unter Verwendung von Zweiteilchen-Datensatz Bonn-B-1 einerseits und mit OBEPT und OBEPT-D andererseits einander gegenübergestellt. Es ist offensichtlich, daß die energieabhängige Version in fast allen Belangen deutlich schlechtere Ergebnisse liefert als die energieunabhängige, mit Ausnahme vielleicht der Vektor-Analysierstärken A_y und iT_{11} von Neutron und Deuteron. Dieses Phänomen hat sich in allen Rechnungen mit verschiedenartigsten k-Verläufen gezeigt (siehe dazu die Abbildungen 11, 12, 13, 14 und 66). Erst bei höheren Energien zeigen beide Versionen des Bonn-Potentials deutliche Mängel.

Bei den mit der energieunabhängigen Version Bonn-B des Bonn-Potentials berechneten Polarisationsobservablen fällt auf, daß sie in ihrer gesamten Struktur sehr den Ergebnissen ähneln, die man mit der W-Matrix-Methode unter Verwendung des Paris-Potentials [42] erhält. Allerdings fitten die vorliegenden mit Bonn-B berechneten Resultate die experimentellen Daten erheblich besser an. Ob dies auf das Bonn-Potential oder auf eine optimalere Wahl der k-Verläufe zuzrückzuführen ist, läßt sich allerdings nicht klären. Wegen der großen Ähnlichkeit neigt der Autor dieser Arbeit jedoch dazu, die zweite Möglichkeit zu favorisieren. Leider existieren nach allem Wissen des Autors dieser Arbeit bei 10 MeV keine sogenannt exakten Faddeev-artigen zweidimensionalen Referenzrechnungen, die Bonn-B benutzen, so daß ein solcher direkter Vergleich bei dieser Energie unmöglich ist). Die experimentellen Daten werden durch die mit Bonn-B durchgeführten theoretischen Rechnungen bei dieser Energie sehr gut wiedergegeben; mit Ausnahme der Vektor- und Tensor-Analysierstärken A_y, iT_{11}, T_{20} und T_{21}. Das Phänomen, daß theoretische Vorhersagen für die Vektor-Analysierstärke A_y generell die experimentellen Resultate, wenn diese auch aus Proton-Deuteron-Streuexperimenten stammen, bei weitem nicht erreichen, ist wohlbekannt. Andererseits hat es den Anschein, daß die W-Matrix-Methode alle oben angeführten Analysierstärken praktisch immer nicht sonderlich gut reproduziert. Der Grund dafür ist unklar; sicherlich kann dies am k-Verlauf liegen. Dazu sind in den Abbildungen 47 bis 65 die Variationen der Observablen aufgetragen, die auftreten, wenn der k-Verlauf ausschließlich im $^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal verändert wird. Die Abweichungen sind teilweise erstaunlich groß. Selbst der differentielle Wirkungsquerschnitt zeigt in Vorwärts- und Rückwärtsrichtung deutliche k-abhängige Schwankungen. All dies bestätigt die Erfahrungen, die in dieser Hinsicht bei der Bestimmung der Triton-Bindungsenergie gemacht wurden. Da nun der k-Verlauf im $^3S_1 - {}^3D_1$-Kanal wesentlich und ziemlich eindeutig durch den Referenzwert der Triton-Bindungsenergie in einer J $\leq 1^+$-Rechnung festgelegt wird, andererseits die nicht-gekoppelten Kanäle erfahrungsgemäß nicht sonderlich sensibel auf kleine Veränderungen im k-Verlauf reagieren, zeigt sich wieder die Ausnahmestellung des $^3P_2 - {}^3F_2$-Kanals.

Um Klarheit darüber zu bekommen, ob die Analysierstärken im Rahmen des W-

Matrix-Formalismus generell schlecht dargestellt werden und um Informationen zu erhalten, inwieweit die W-Matrix-Methode bei festem Zweiteilchen-Input-Datensatz, d.h. bei festem k-Verlauf zu anderen Energien hin fortgesetzt werden kann (hier sei noch einmal darauf verwiesen, daß gemäß Abschnitt 4.6 der k-Verlauf von der Dreiteilchen-Energie abhängt), sind Rechnungen bei kleineren Energien als 10 MeV, nämlich bei 6.5 MeV, und bei größeren, nämlich bei 19.0 MeV und 22.7 Mev durchgeführt worden. Hier existieren in der Literatur experimentelle Daten [43, 44] und Referenzrechnungen unter Verwendung von Bonn-B für einige wenige Polarisationsobservable[18]. Abbildung 66 zeigt die Neutron-Vektoranalysierstärke A_y bei 6.5 MeV berechnet im W-Matrix-Formalismus mit der energieabhängigen und der energieunabhängigen Version des Bonn-Potentials im Vergleich zu einer Referenzrechnung mit Bonn-B und experimentellen Neutron-Deuteron-Streudaten von Tornow et al. [43] (die Rechnung stammt offenbar von H. Witala). Das Ergebnis ist nahezu spektakulär: einmal reproduziert die W-Matrix-Rechnung mit dem energieunabhängigen Potential Bonn-B exakt die Ergebnisse der zweidimensionalen Referenzrechnung, allerdings sind die Änderungen der Observablen bei leicht variierten k-Verlauf immer noch vorhanden. Zum anderen liefert das energieabhängige OBEPT ein A_y das unglaublich gut mit dem Experiment übereinstimmt. Es hat den Anschein, als werde das A_y-Paradoxon durch die korrekte, nämlich energieabhängige Beschreibung der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung gelöst. Leider scheinen in der Literatur keine anderen verläßlichen experimentellen Neutron-Deuteron-Streudaten bei dieser Energie zu existieren; ein Vergleich mit der hier vorliegenden theoretischen Vorhersage wäre äußerst interessant.

Die Abbildungen 67 bis 76 zeigen die Ergebnisse von Rechnungen bei 19 MeV im Vergleich zu einer ladungsabhängigen $J \leq 3$-Rechnung von H.Witala. Die im W-Matrix-Formalismus ausgeführte, ladungsunabhängige $J \leq 3$-Rechnung benutzt den Zweiteilchen-Datensatz Bonn-B-3. Für die Analysierstärke A_y sind zusätzlich die Ergebnisse von weiteren, auf anderen Zweiteilchen-Datensätzen basierenden Rechnungen aufgeführt, die sich alle nur im k-Verlauf des ${}^3P_2 - {}^3F_2$-Kanals unterscheiden. Offensichtlich ergeben sich mehr oder minder gravierende Diskrepanzen; insbesondere das A_y wird im Rahmen der W-Matrix-Methode äußerst schlecht dargestellt. Zusätzlich fällt die extreme starke Abhängigkeit gegenüber marginalen Änderungen im k-Verlauf auf, die im Vergleich mit den Ergebnissen bei 10 MeV deutlich zugenommen hat.

In den Abbildungen 77 bis 90 sind die Wirkungsquerschnitte, einige Analysierstärken und der Neutron-Neutron-Polarisations-Transfer-Koeffizient $K_y^{y'}$, berechnet mit der W-Matrix-Methode bei einer Energie von 22.7 MeV, sowohl für Bonn-B als auch für das energieabhängige OBEPT im Vergleich zu experimentellen Daten von

[18]Es muß darauf hingewiesen werden, daß zum Teil ladungsabhängige $J \leq 3$-Rechnungen mit ladungsunabhängigen $J \leq 2$-Rechnungen verglichen werden. Außerdem mußten alle experimentellen und theoretischen Referenzdaten bei 6.5 und 22.7 MeV aus Abbildungen in der Literatur entnommen werden und sind demzufolge mit einem Lesefehler behaftet.

Grüebler et al. [46] bzw. Clajus et al. [44] aufgetragen. Im Falle von Bonn-B wird zusätzlich mit Rechnungen verglichen, die von H. Witala ausgeführt wurden [47]. Im Falle der Tensor-Analysierstärke T_{22} existiert nur eine Referenzrechnung, die Bonn-A verwendet. Zusätzlich werden einige andere Polarisations-Transfer-Koeffizienten, die im W-Matrix-Formalismus mit Bonn-B und OBEPT bestimmt wurden, angegeben und untereinander und mit einer Referenzrechnung, die Bonn-B benutzt, verglichen. Der schon oben angesprochene Trend bestätigt sich: einmal liefert die energieabhängige Version OBEPT die deutlich schlechteren Ergebnisse. Sind zum anderen im Falle von Bonn-B die Tensor-Analysierstärken T_{20} und T_{22} noch erträglich gut, so weisen die Polarisations-Transfer-Koeffizienten und das A_y große Diskrepanzen zur Referenzrechnung und, falls vorhanden, zu den experimentellen Daten auf. Außerdem nimmt die Abhängigkeit dieser Observablen vom k-Verlauf drastisch zu. Es ist offensichtlich, daß mit zunehmender Dreiteilchen-Energie die mit der W-Matrix-Methode erzielten Resultate schlechter werden.

7.3 Diskussion der Ergebnisse

Im folgenden werden noch einmal die wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefaßt:

1. Es ist vollkommen problemlos, die Referenzwerte der Triton-Bindungsenergie für $J \leq 1^+$- und $J \leq 1$-Rechnungen im W-Matrix-Formalismus zu reproduzieren. Sie ebenfalls im Falle einer $J \leq 2$-Rechnung zu erreichen, d.h. unter Einbeziehung des ${}^3P_2 - {}^3F_2$-Kanals, ist nahezu unmöglich.

2. Die Triton-Bindungsenergie, die die energieabhängige Version OBEPT des Bonn-Potentials liefert, unterscheidet sich vom experimentellen Wert um mehr als 2 MeV und ist damit deutlich schlechter als die der energieunabhängigen Version.

3. Im niederenergetischen Grenzfall ($E \leq 8$ MeV) reproduziert die W-Matrix-Methode zweidimensionale Faddeev-artige Referenzrechnungen (nachweislich bei Verwendung der energieunabhängigen Version Bonn-B des Bonn-Potentials).

4. Beim Übergang zu höheren Energien verschlechtern sich die Ergebnisse teilweise dramatisch. Das ist offensichtlich der Fall ab etwa 20 MeV, beginnt jedoch vermutlich schon bei niedrigeren Energien. Es sei daran erinnert, daß $J \leq 2$-Rechnungen im W-Matrix-Formalismus unter Benutzung des Paris-Potentials bei 10.0 MeV deutlich von entsprechenden zweidimensionalen Referenzrechnungen abweichen, wenn auch bei vielen Observablen die experimentellen Daten gut wiedergegeben werden. Dagegen reproduzieren $J \leq 1^+$-W-Matrix-Rechnungen genau die

Ergebnisse entsprechender Faddeev-artiger Kalkulationen. Wegen fehlendem theoretischem Materials, das Bonn-B benutzt, ist ein Vergleich im Rahmen dieser Arbeit bei 10.0 MeV leider nicht möglich.

5. Die Resultate von Rechnungen im W-Matrix-Formalismus bei Verwendung des energieabhängigen Bonn-Potentials sind generell schlechter, mit Ausnahme der Vektoran-Anlysierstärken A_y und iT_{11}. Diese sind, sofern Vergleiche möglich sind, im niederenergetischen Bereich hervorragend und kommen den experimentellen Ergebnissen weitaus näher als theoretische Vorhersagen mit energieunabhängigen Potentialen. Ob die Ursache dafür die Energieabhängigkeit dieser Beschreibung der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung ist, kann wegen der übrigen schlechten Resultate allerdings bezweifelt werden. Beim Übergang zu höheren Energien werden auch sie deutlich schlechter.

Das Phänomen, daß die W-Matrix-Methode beim Verlassen des niederenergetischen Bereichs immer schlechtere Ergebnisse liefert, ist nach Ansicht des Autors dieser Arbeit eine direkte Folge des Versagens der W-Matrix Methode bei etwa 45 MeV. Sowohl der separable Term als auch der Restterm

$$p'^{L'} \Big(\hat{W}^{c2}_{k;L',L}(E;p',p) - \\ \sum_{\hat{L},\hat{L}'} \hat{W}^{c2}_{L',\hat{L}'}(E;p',k)\,(\hat{W}^{c2})^{-1}_{\hat{L}',\hat{L}}(E;k,k)\,\hat{W}^{c2}_{\hat{L},L}(E;k,p) \Big) \; p^L$$

in (4.47) werden singulär, wenn die On-Shell-W-Matrix und damit die On-Shell-$\hat{T}$-Matrix nicht invertierbar ist. Das läßt sich direkt auf die experimentell bestimmten Phasen bei etwa 45 MeV im ${}^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal zurückführen. Wenn die On-Shell-$\hat{T}$-Matrizen die Phasen richtig wiedergeben sollen, haben sie bei dieser Energie einen Nulldurchgang; bekanntlich legen die Zweiteilchen-Streuphasen $\delta^J_+(k)$, $\delta^J_-(k)$ und $\epsilon_J(k)$ wegen

$$\hat{S}^J_{L',L}(k) = \begin{pmatrix} s^J_{++} & s^J_{+-} \\ s^J_{-+} & s^J_{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\epsilon^J) & -\sin(\epsilon^J) \\ \sin(\epsilon^J) & \cos(\epsilon^J) \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} \exp(-2i\delta^J_{++}) & 0 \\ 0 & \exp(-2i\delta^J_{--}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\epsilon^J) & \sin(\epsilon^J) \\ -\sin(\epsilon^J) & \cos(\epsilon^J) \end{pmatrix}$$

und

$$\hat{S}^J_{L',L}(k) = \delta_{L',L} - i\pi m k\, \hat{T}^J_{L',L}(E + i0; k, k) \tag{7.3}$$

die On-Shell-$\hat{T}$-Matrix eindeutig fest.

Hinzu kommt, daß es schwierig ist, die Größe des Energieintervalls abzuschätzen, innerhalb sowohl Restterm als auch separabler Term von Singularitäten im

${}^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal dominiert werden. Im Streuenergie-Bereich läßt sich die Qualität der separablen Approximation stets durch die Größe

$$C_{L'L}(E+i0;p',p) = \frac{|R_{L'L}(E;p',p)|}{|\hat{T}_{L'L}(E+i0;p',p)|} \tag{7.4}$$

kennzeichnen. (E steht hier sowohl für $\hat{E}$ als auch für E^{rel}.) Rechnungen hierzu sind kompatibel mit den oben vorgestellten Ergebnissen: ab etwa 8 MeV nimmt $C_{L'L}$ stetig zu, so daß die separable Approximation schlechter wird. Demzufolge müssen Observable, in die der ${}^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal wesentlich eingeht, bspw. das A_y, mit zunehmender Energie immer deutlichere Abweichungen von Referenzrechnungen bzw. experimentellen Daten zeigen. Das erklärt auch, warum manche, mit der W-Matrix-Methode berechneten Observablen bei Energien zwischen 10 MeV und 25 Mev hervorragend mit Referenzrechnungen bzw. experimentellen Daten übereinstimmen, andere wiederum deutlich differieren. Insbesondere scheint die Abhängigkeit der Polarisationsobservablen vom k-Verlauf deutlich zuzunehmen.

Zusammenfassend bleibt zu sagen, daß die W-Matrix-Methode in der hier dargestellten Form anwendbar ist in allen Fällen, in denen der ${}^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal keine oder nur eine sehr untergeordnete Rolle spielt, wie etwa bei der Photodisintegration des Triton. Wird er berücksichtigt, sind vernünftige Resultate nur im niederenergetischen Bereich zu erwarten.

Zum Abschluß noch einige kurze Bemerkungungen: die W-Matrix-Methode wäre zweifellos ein elegantes und die Numerik im Vergleich zu zweidimensionalen Rechnungen stark vereinfachendes Verfahren, wäre da nicht der ${}^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal, und mögliche zusätzliche Nulldurchgänge der On-Shell-W-Matrix bei größeren Energien in anderen Kanälen, auf die es Hinweise gibt [53, 54, 56]. Will man diese Methode am Leben erhalten, so kann das nur durch eine separable Entwicklung des Restterms dergestalt geschehen, daß sämtliche solche Singularitäten des vorhandenen separablen Term kompensiert werden. Dann muß auch der neue Restterm frei von solchen Singularitäten sein. Die in [55] entwickelte Methode versagt nach allen Erfahrungen des Autors, [53] kommen zu einem ähnlichen Ergebnis. Vielversprechend dagegen scheint die in [53] entwickelte Methode, die Projektion der W-Matrix-Darstellung der Off-Shell-T-Matrix auf Sturmsche Funktionen zu sein. Hiermit lassen sich offenbar alle Nullstellen der On-Shell-W-Matrix bzw. deren Determinante umgehen. Damit wäre die so modifizierte W-Matrix-Methode in allen Energiebereichen anwendbar, gleichwertig zu zweidimensionalen Faddeev-Rechnungen und numerisch eine deutliche Vereinfachung.

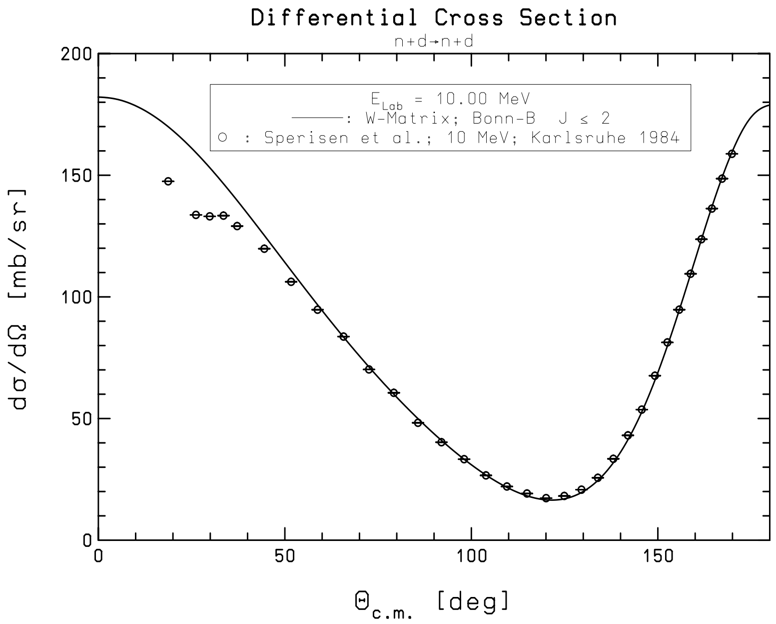

Abbildung 9: Differentieller Wirkungsquerschnitt; Potential: Bonn-B, energieunabhängig; E_{LAB}=10 MeV; experimentelle Werte aus [39].

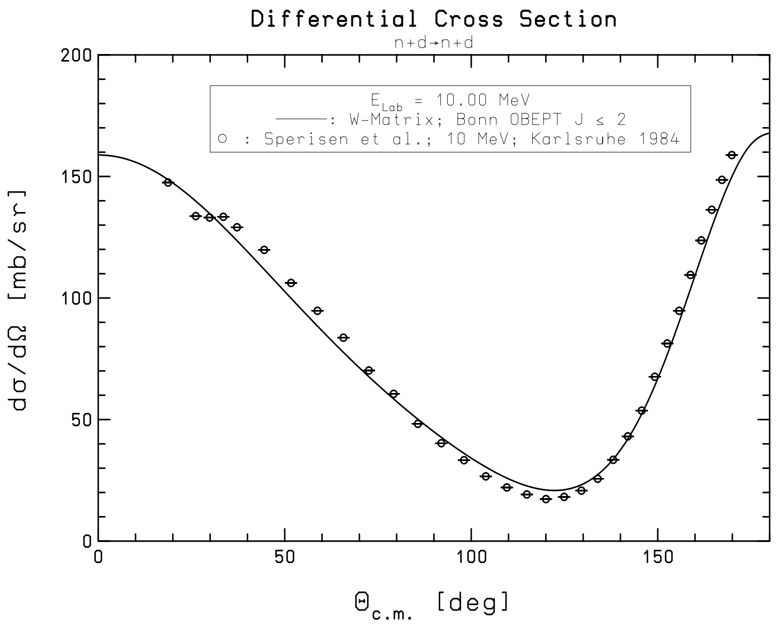

Abbildung 10: Differentieller Wirkungsquerschnitt; Potential: OBEPT, energieabhängig; E_{LAB}=10 MeV; experimentelle Werte aus [39].

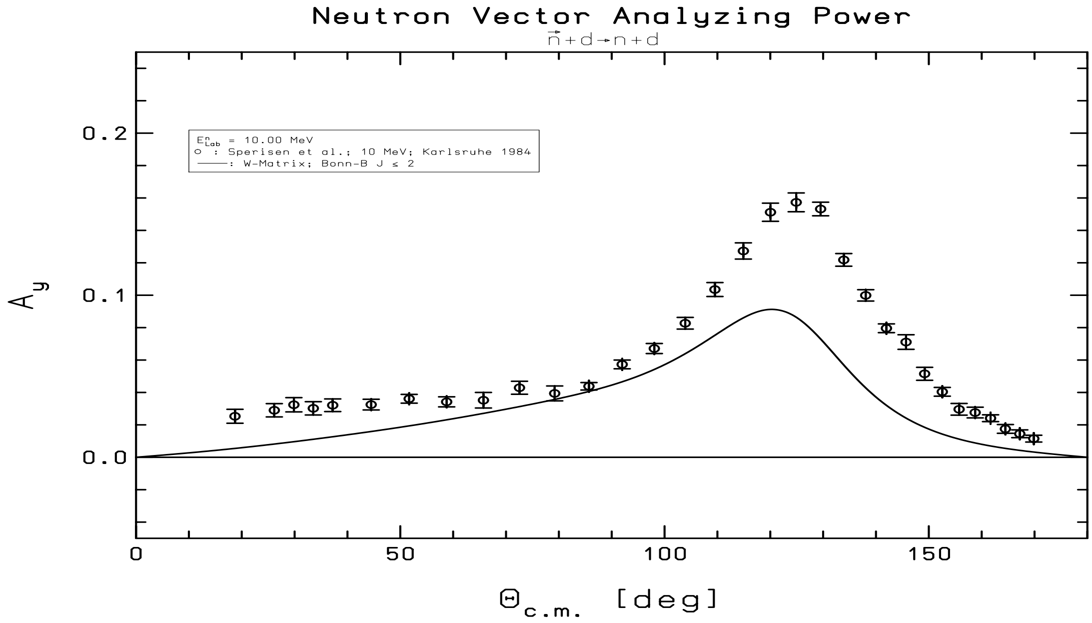

Abbildung 11: A_y, sonst wie in Abbildung 9.

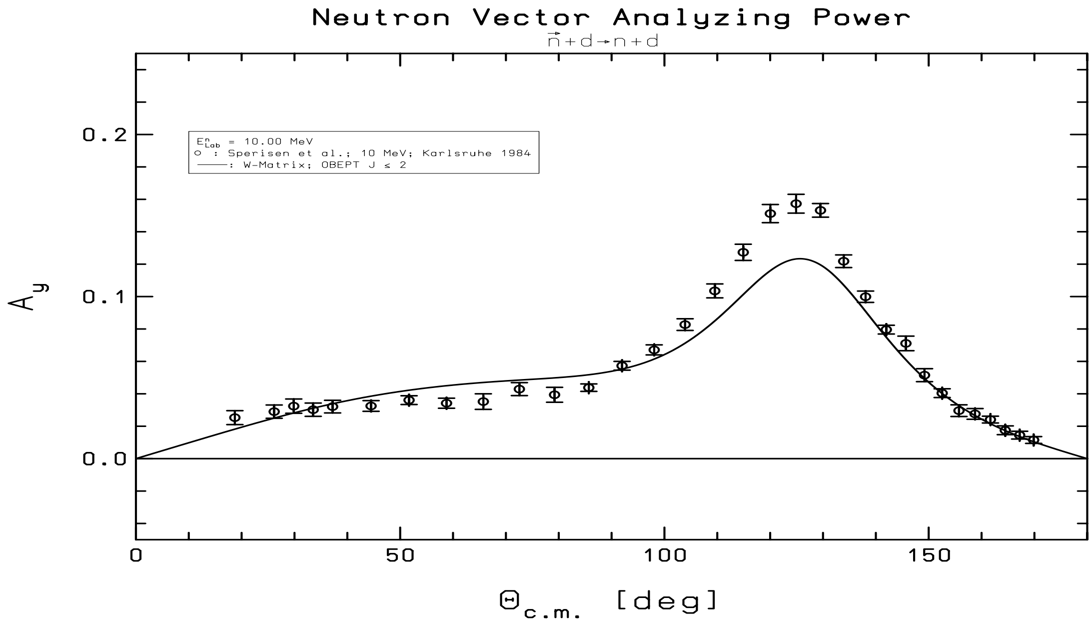

Abbildung 12: A_y, sonst wie in Abbildung 10.

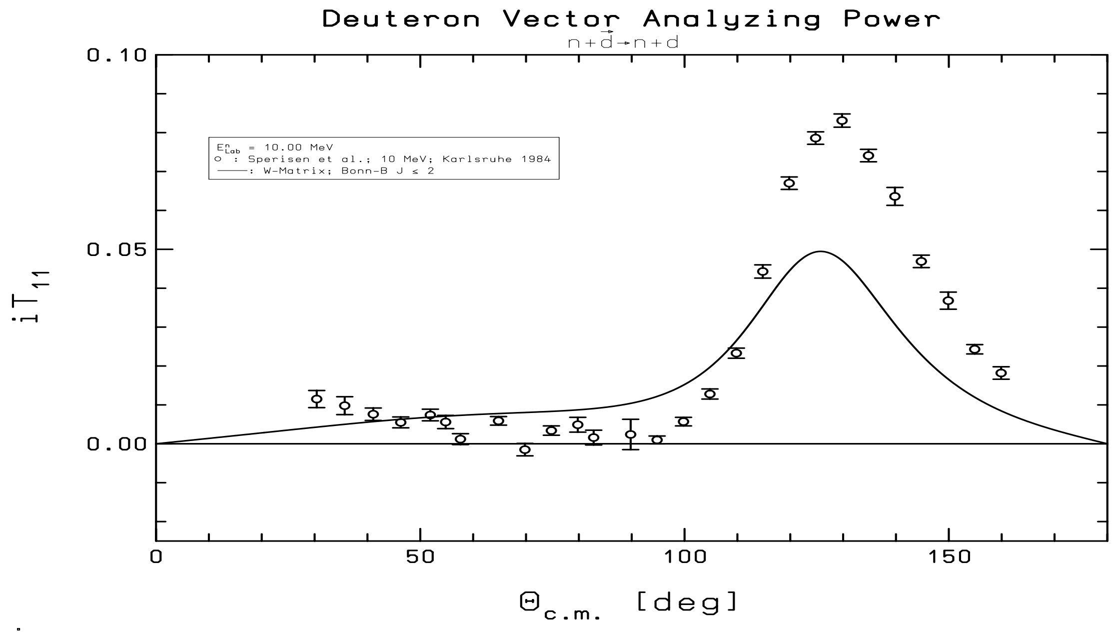

Abbildung 13: iT_{11}, sonst wie in Abbildung 9.

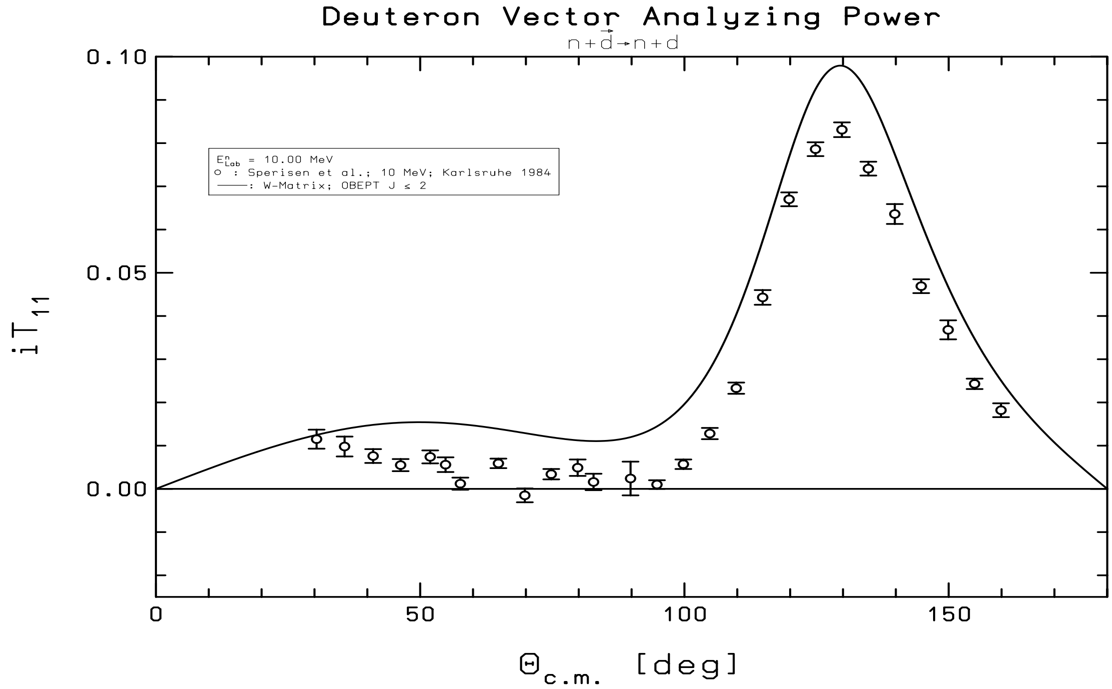

Abbildung 14: iT_{11}, sonst wie in Abbildung 10.

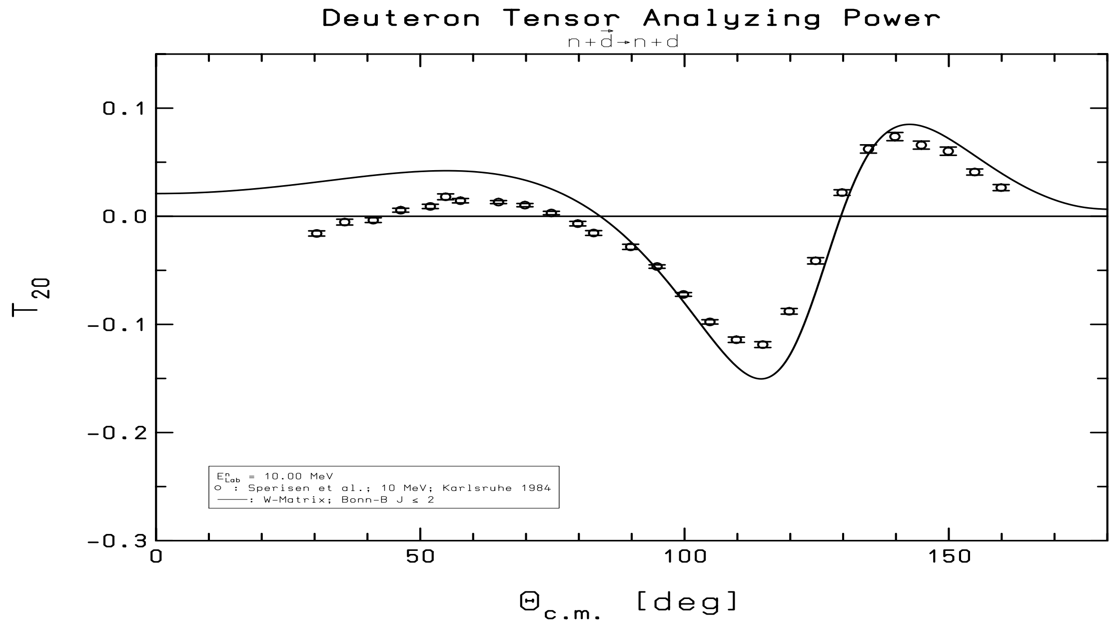

Abbildung 15: T_{20}, sonst wie in Abbildung 9.

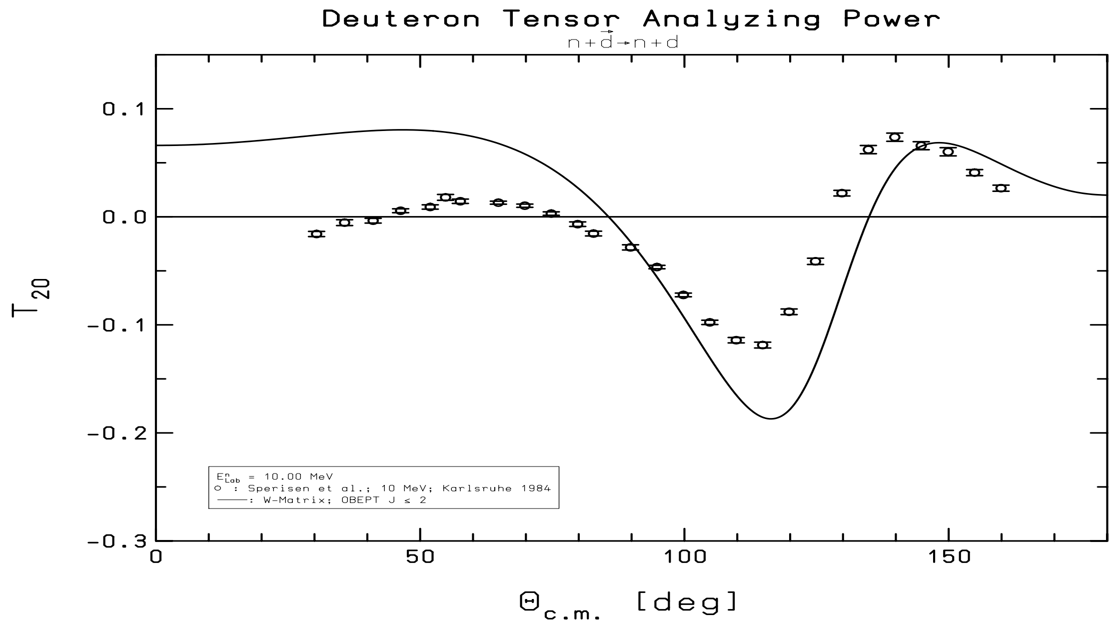

Abbildung 16: T_{20}, sonst wie in Abbildung 10.

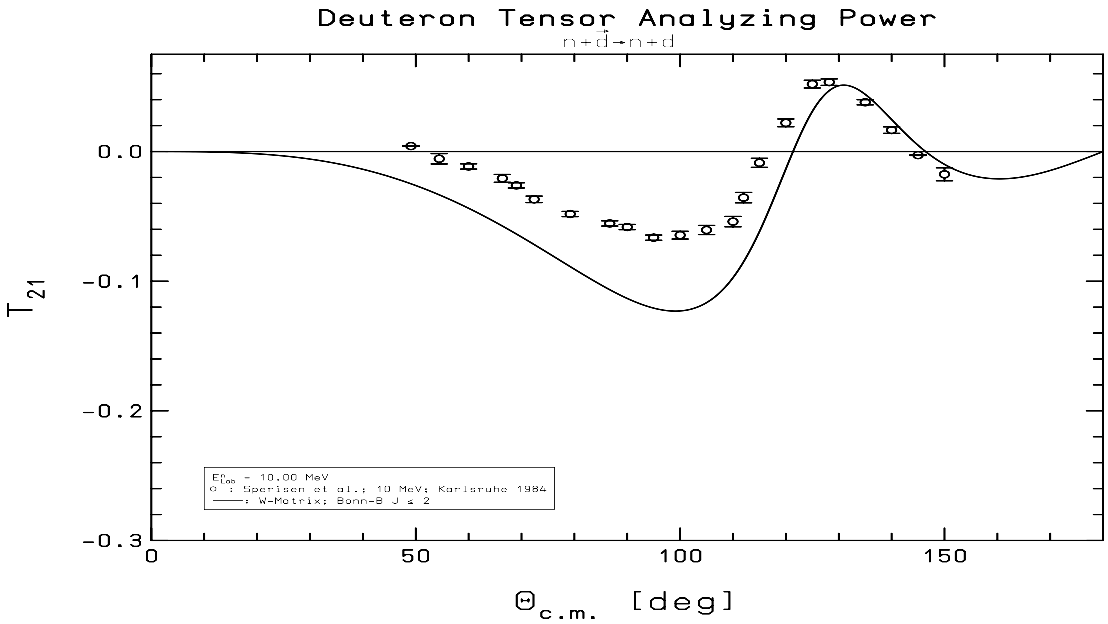

Abbildung 17: T_{21}, sonst wie in Abbildung 9.

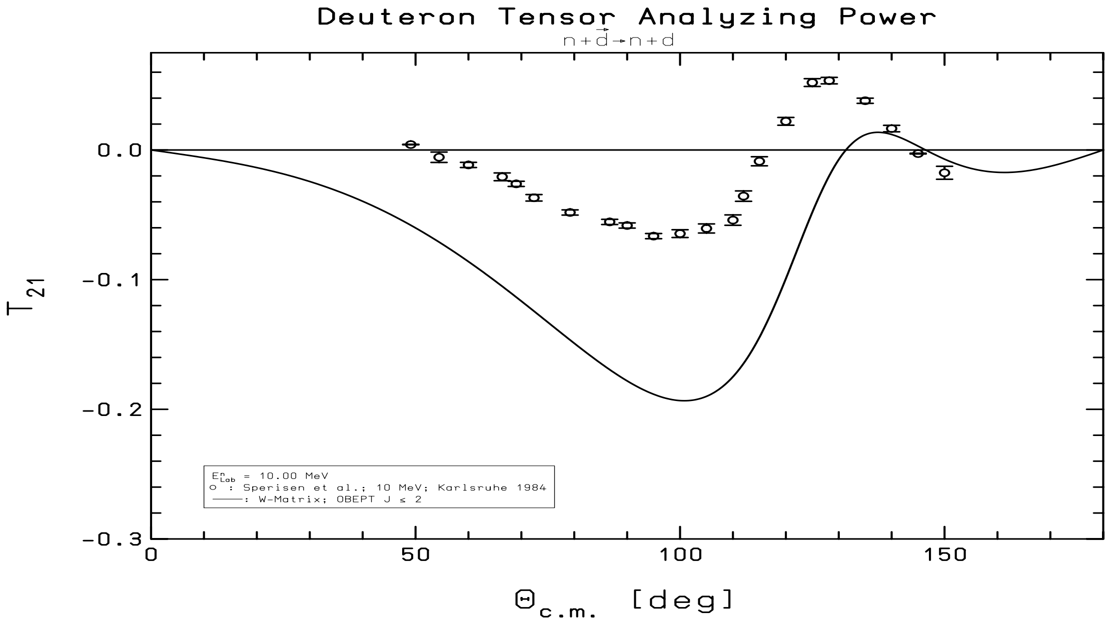

Abbildung 18: T_{21}, sonst wie in Abbildung 10.

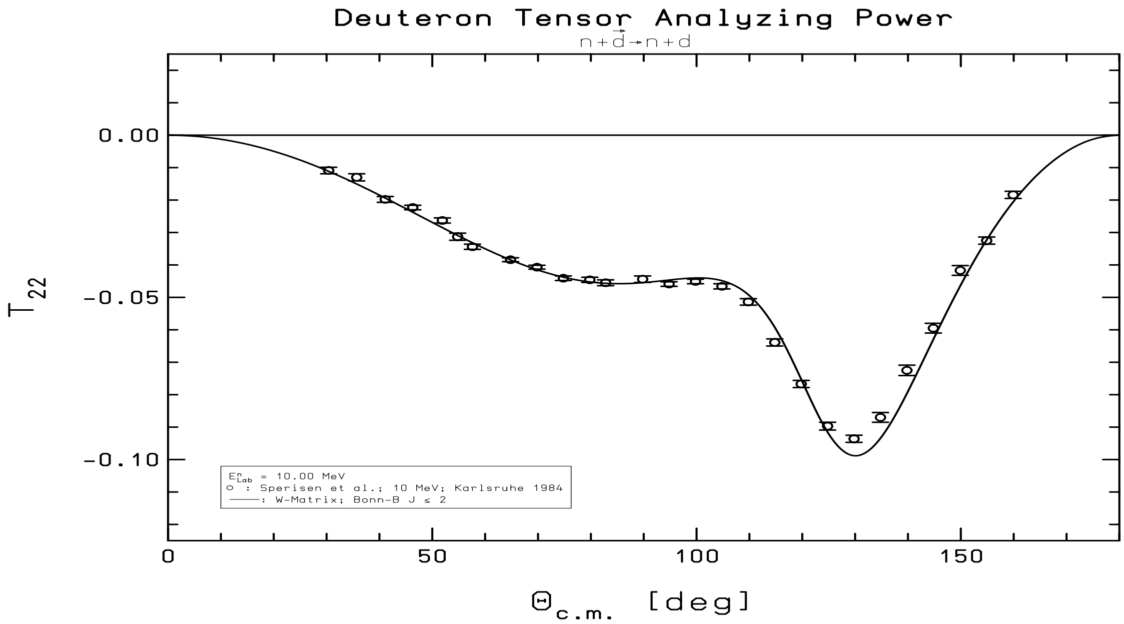

Abbildung 19: T_{22}, sonst wie in Abbildung 9.

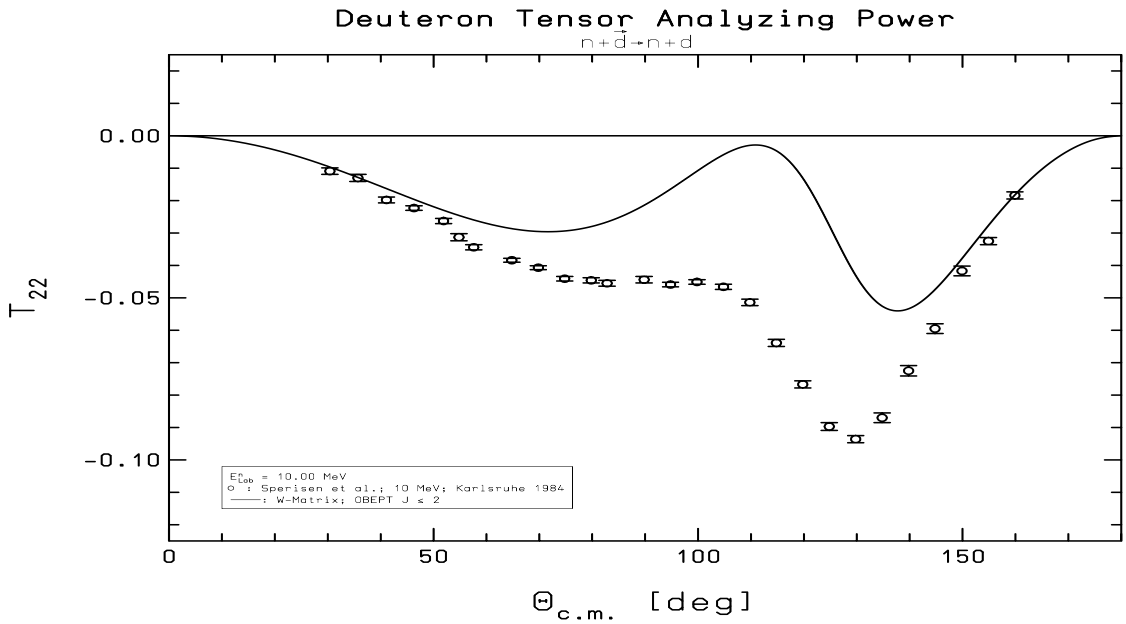

Abbildung 20: T_{22}, sonst wie in Abbildung 10.

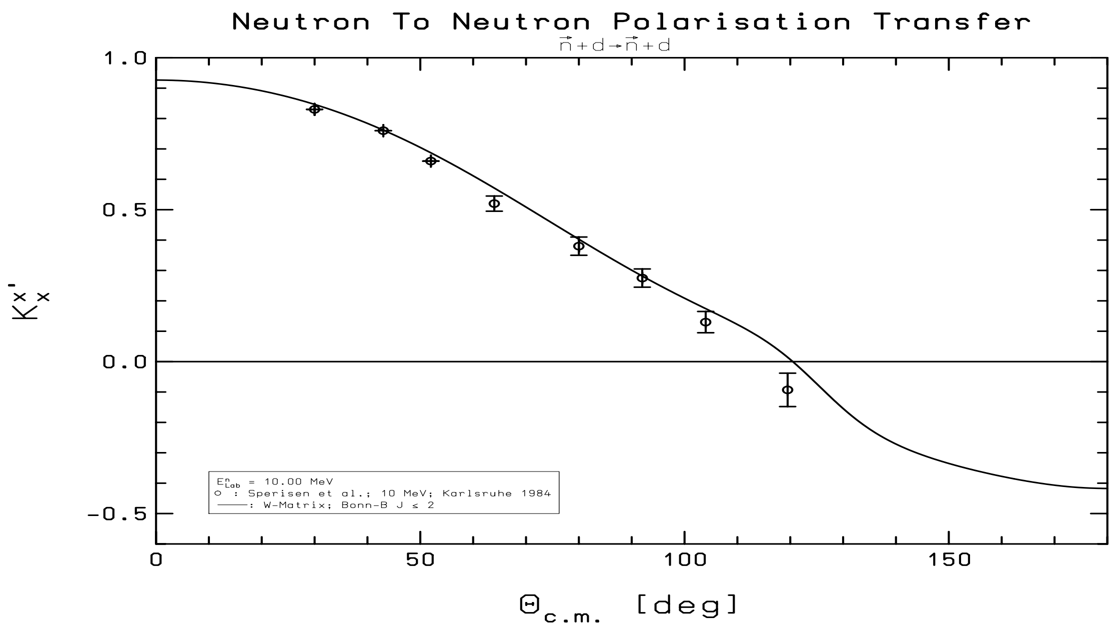

Abbildung 21: K$_x^{x'}$, sonst wie in Abbildung 9.

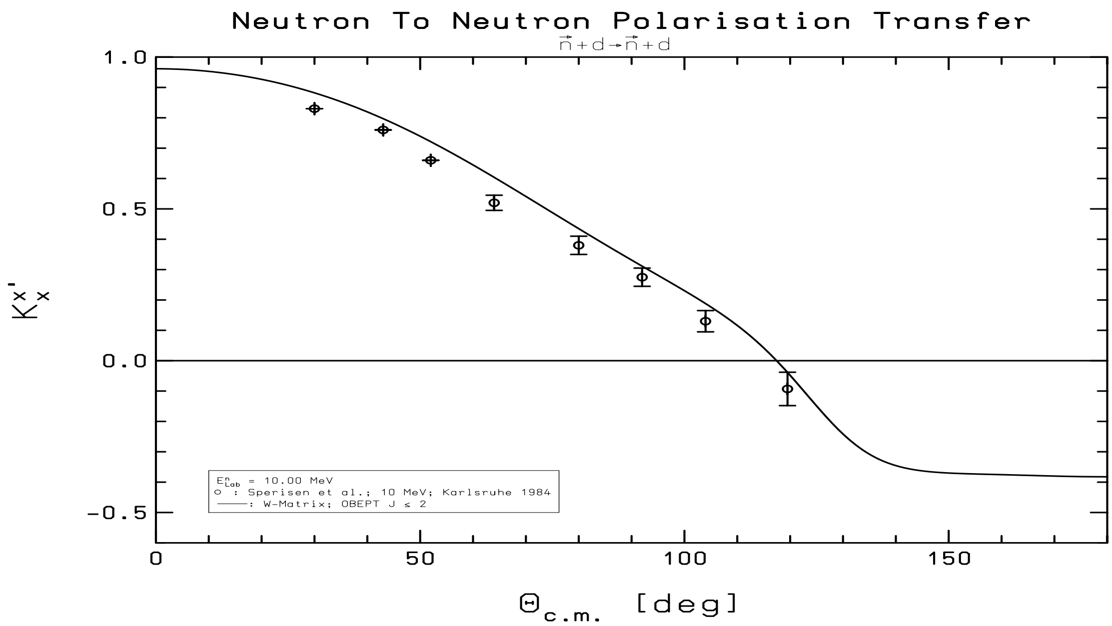

Abbildung 22: K$_x^{x'}$, sonst wie in Abbildung 10.

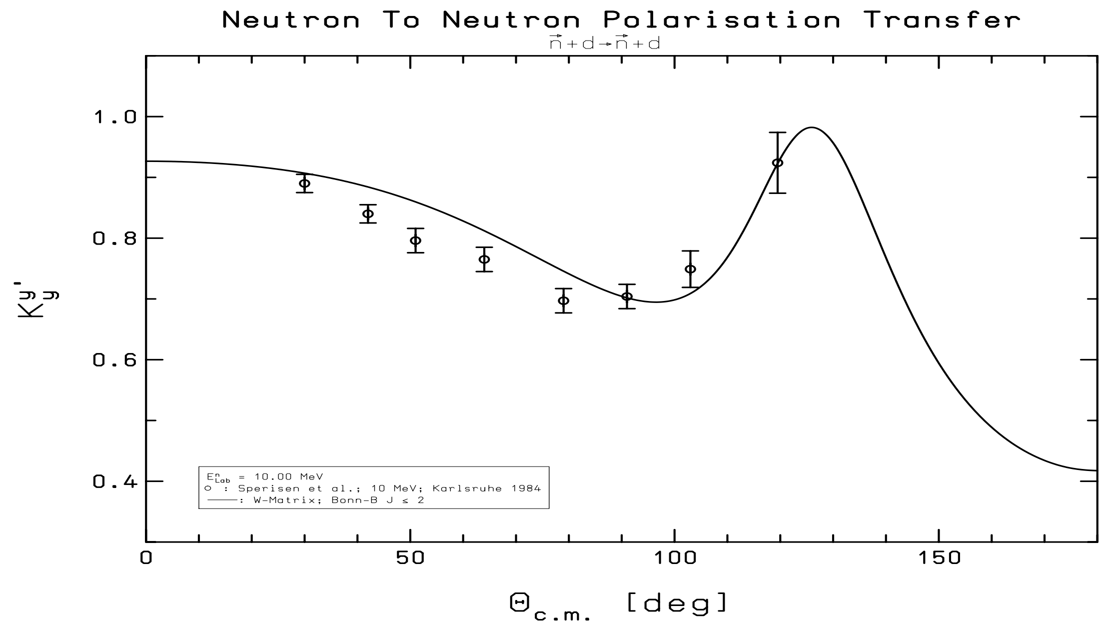

Abbildung 23: $K_y^{y'}$, sonst wie in Abbildung 9.

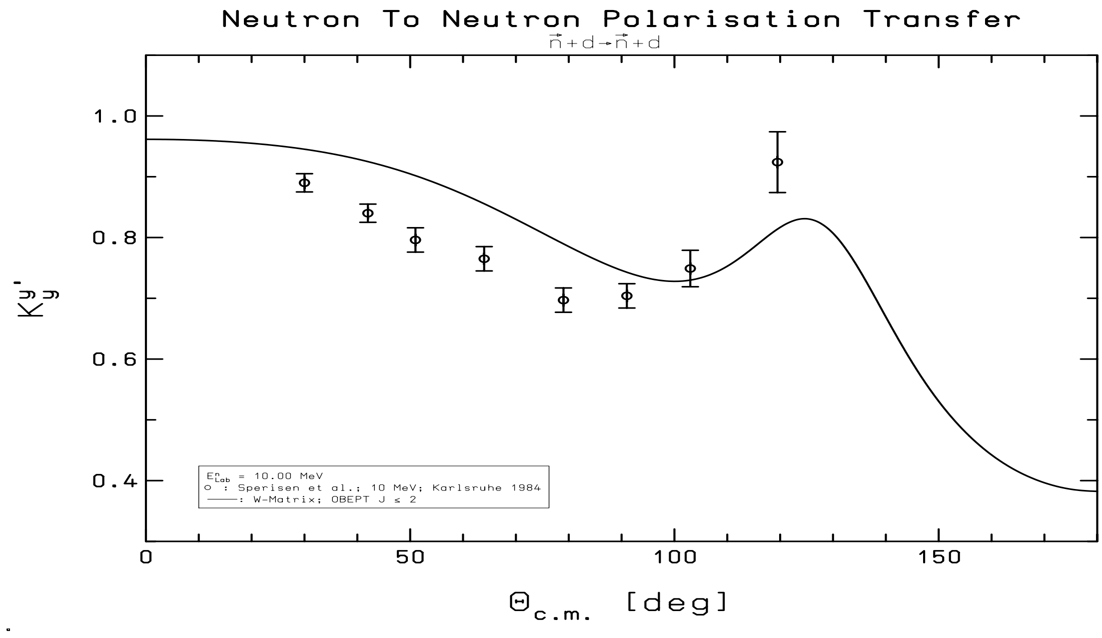

Abbildung 24: $K_y^{y'}$, sonst wie in Abbildung 10.

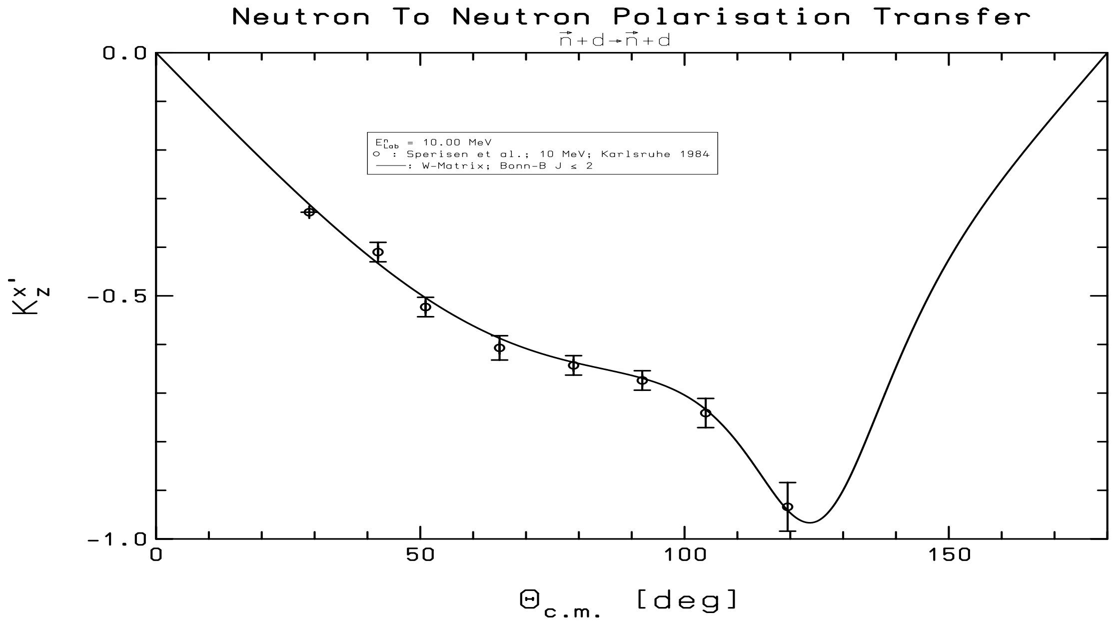

Abbildung 25: $K^{x'}_z$, sonst wie in Abbildung 9.

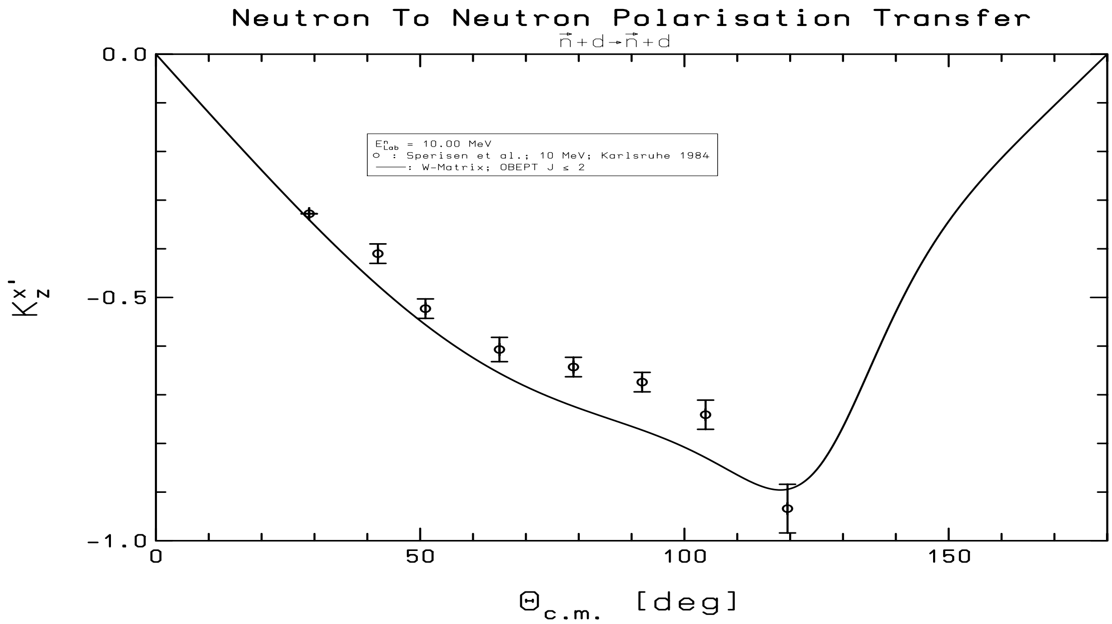

Abbildung 26: $K^{x'}_z$, sonst wie in Abbildung 10.

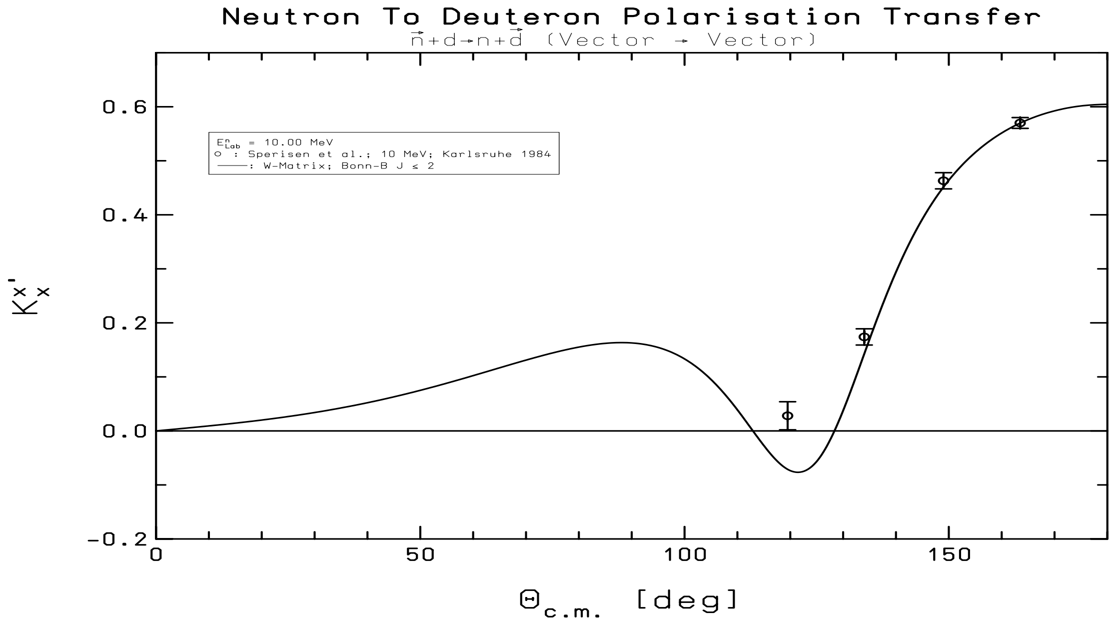

Abbildung 27: $K_x^{x'}$ (Vektor→Vektor), sonst wie in Abbildung 9.

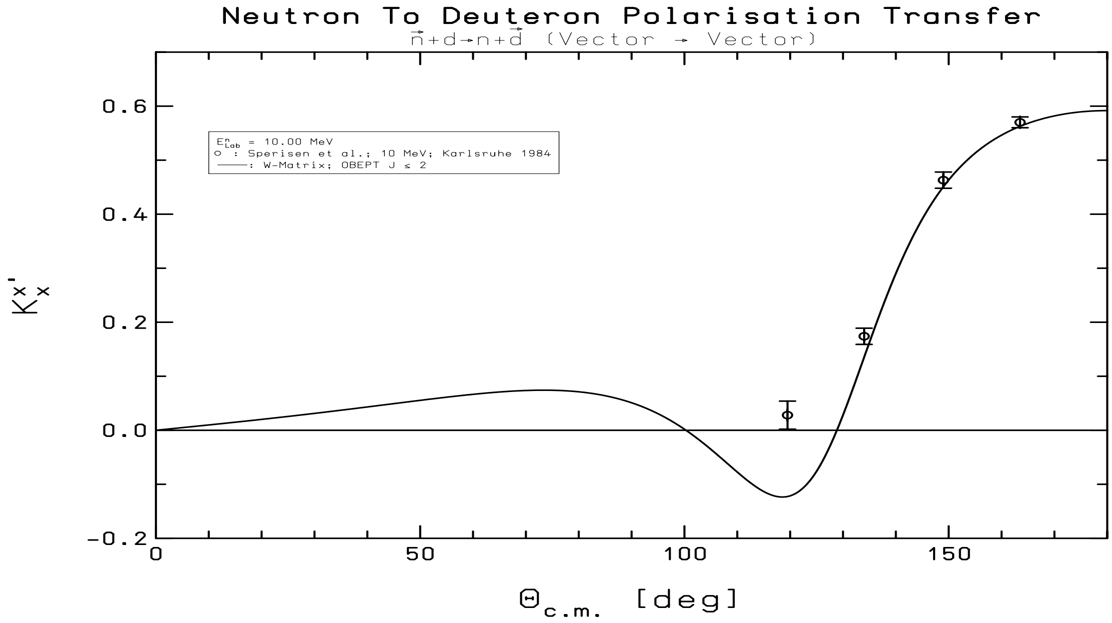

Abbildung 28: $K_x^{x'}$, (Vektor→Vektor), sonst wie in Abbildung 10.

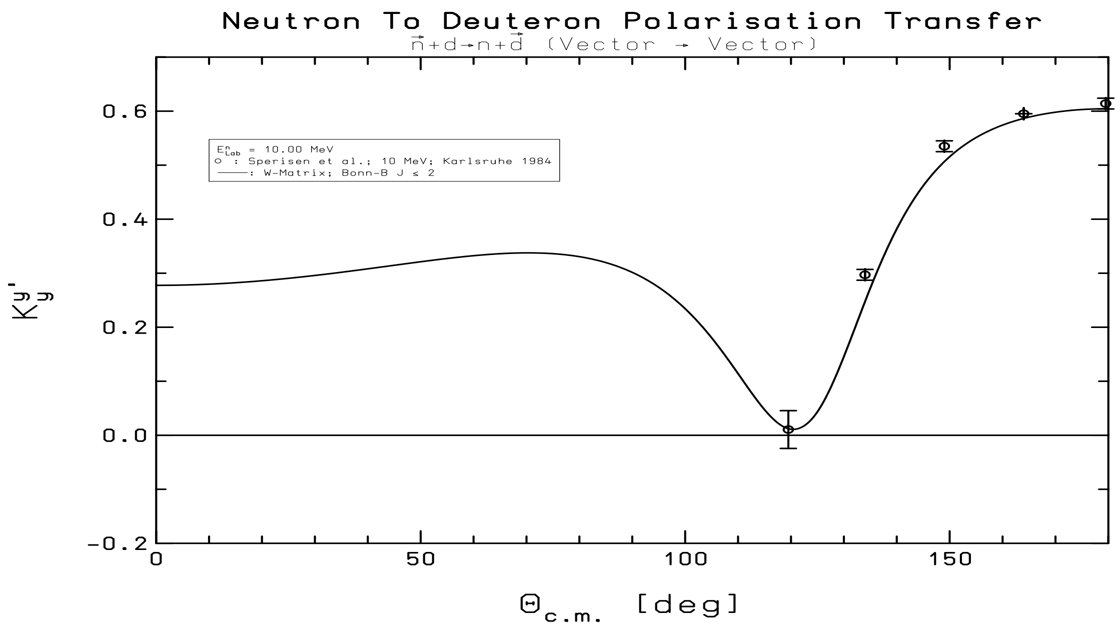

Abbildung 29: $K_y^{y'}$ (Vektor→Vektor), sonst wie in Abbildung 9.

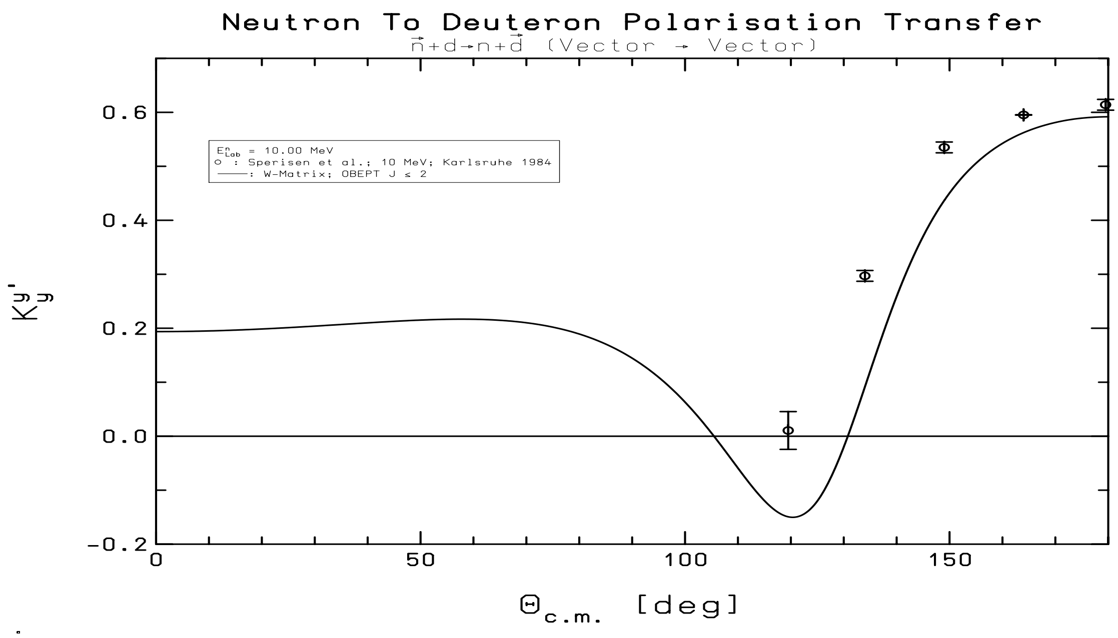

Abbildung 30: $K_x^{x'}$, (Vektor→Vektor), sonst wie in Abbildung 10.

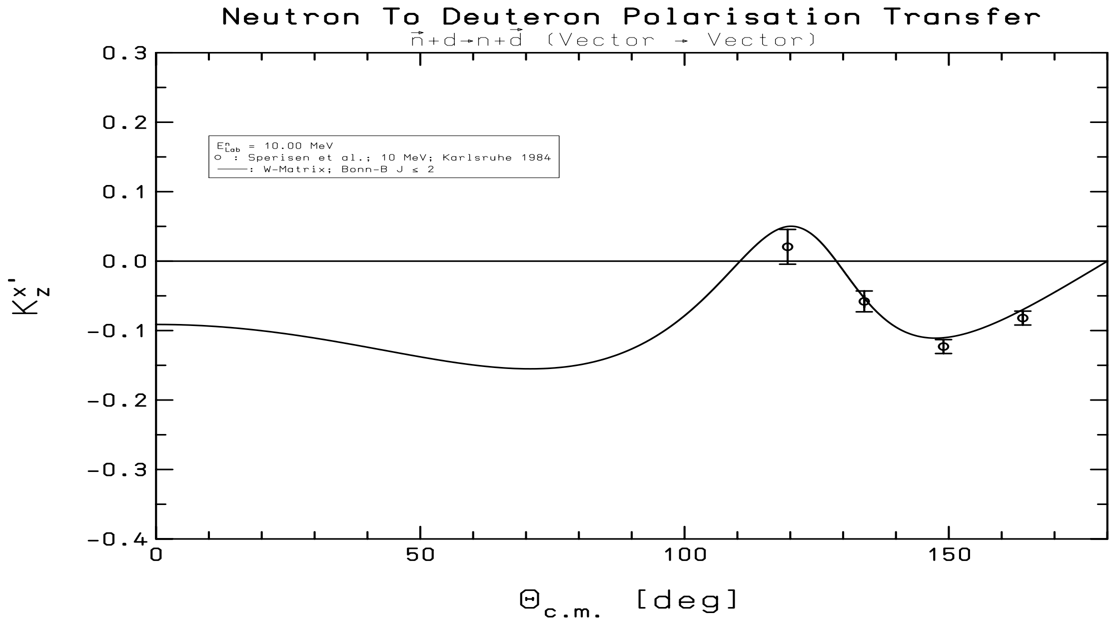

Abbildung 31: $K_z^{x'}$ (Vektor→Vektor), sonst wie in Abbildung 9.

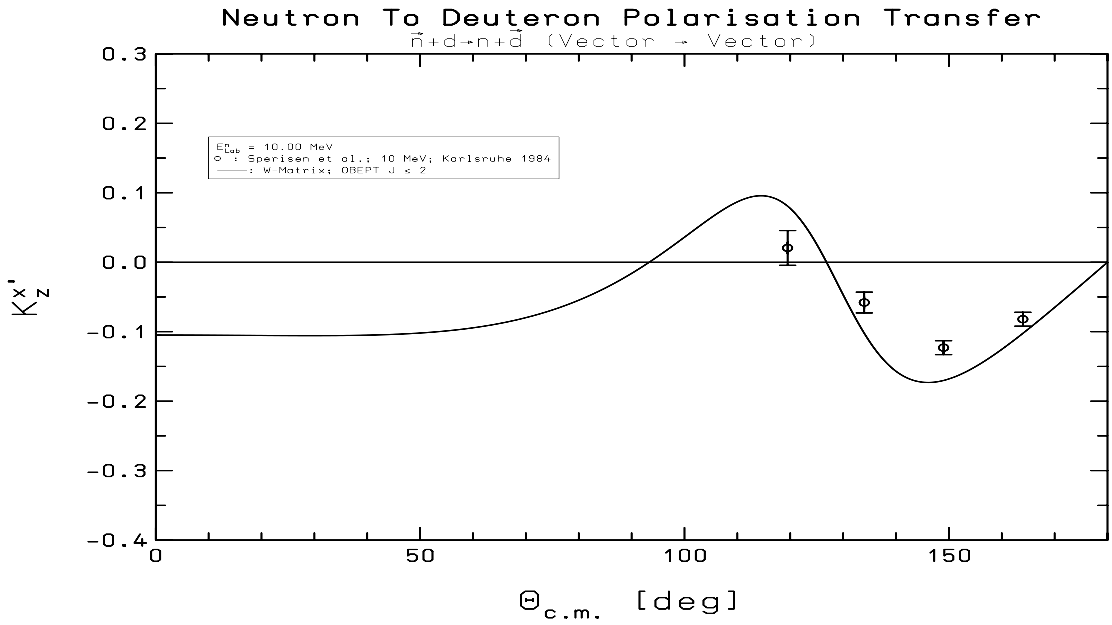

Abbildung 32: $K_z^{x'}$, (Vektor→Vektor), sonst wie in Abbildung 10.

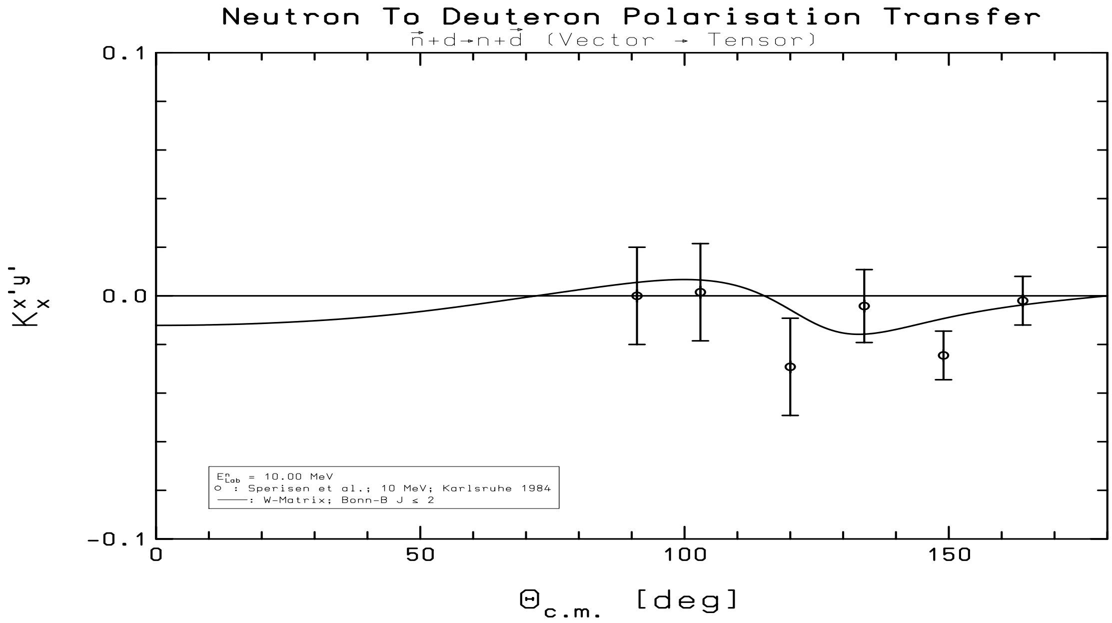

Abbildung 33: $K_x^{x'y'}$, sonst wie in Abbildung 9.

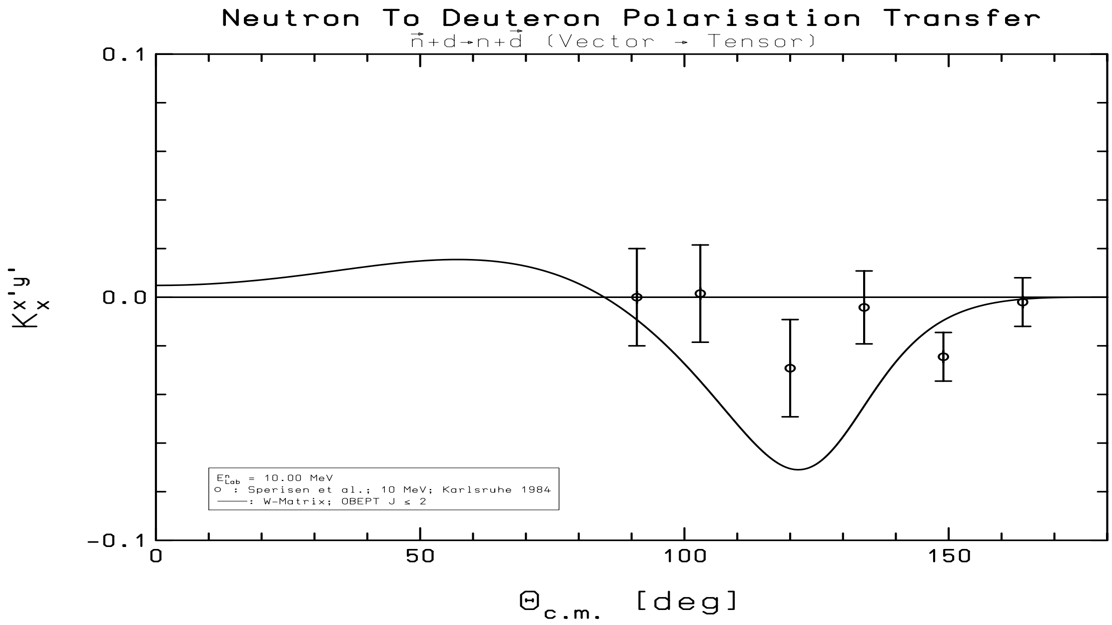

Abbildung 34: $K_x^{x'y'}$, sonst wie in Abbildung 10.

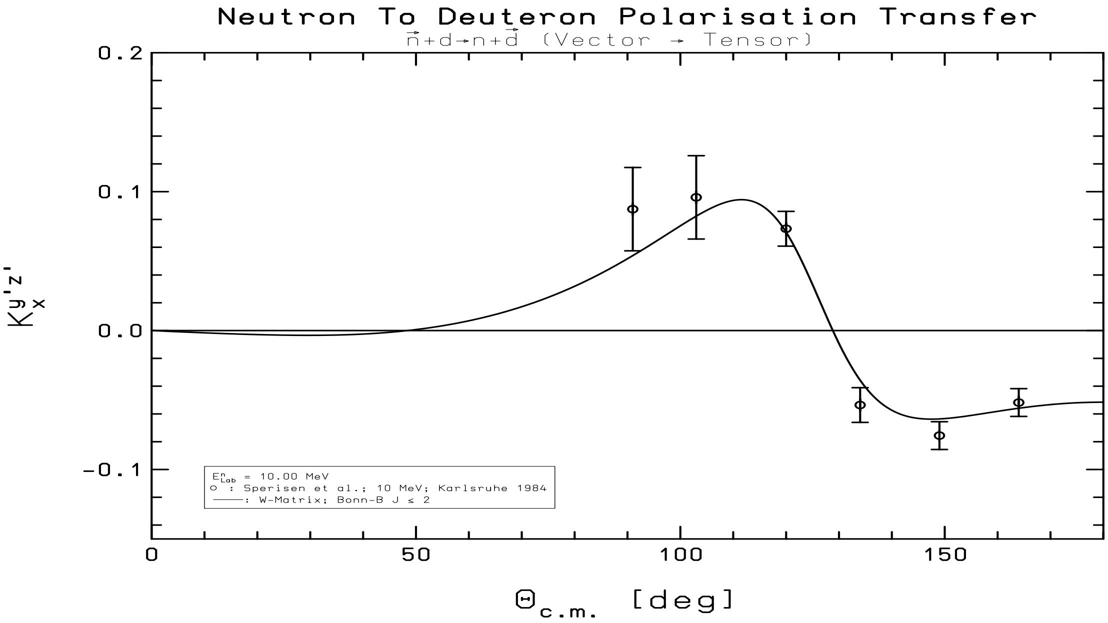

Abbildung 35: $K_x^{y'z'}$, sonst wie in Abbildung 9.

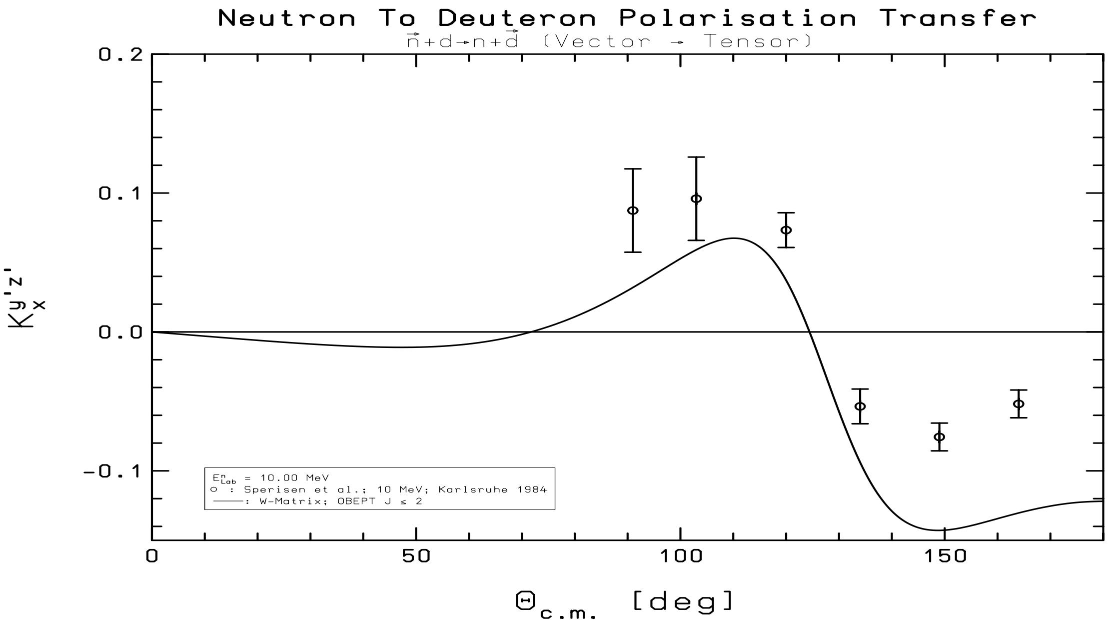

Abbildung 36: $K_x^{y'z'}$, sonst wie in Abbildung 10.

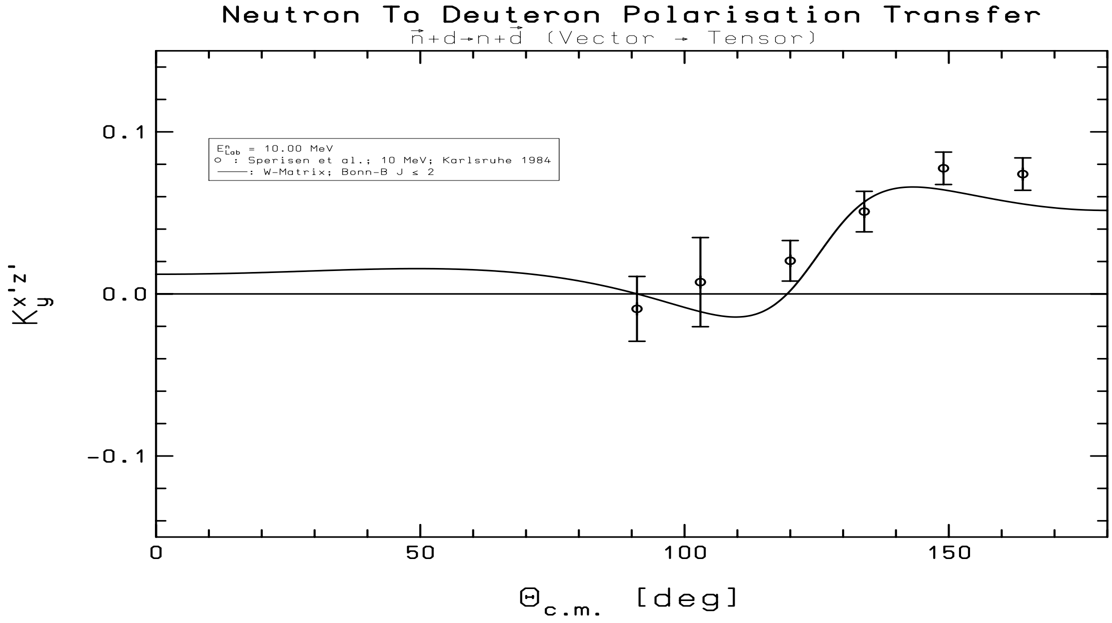

Abbildung 37: $\mathrm{K}_y^{x'z'}$, sonst wie in Abbildung 9.

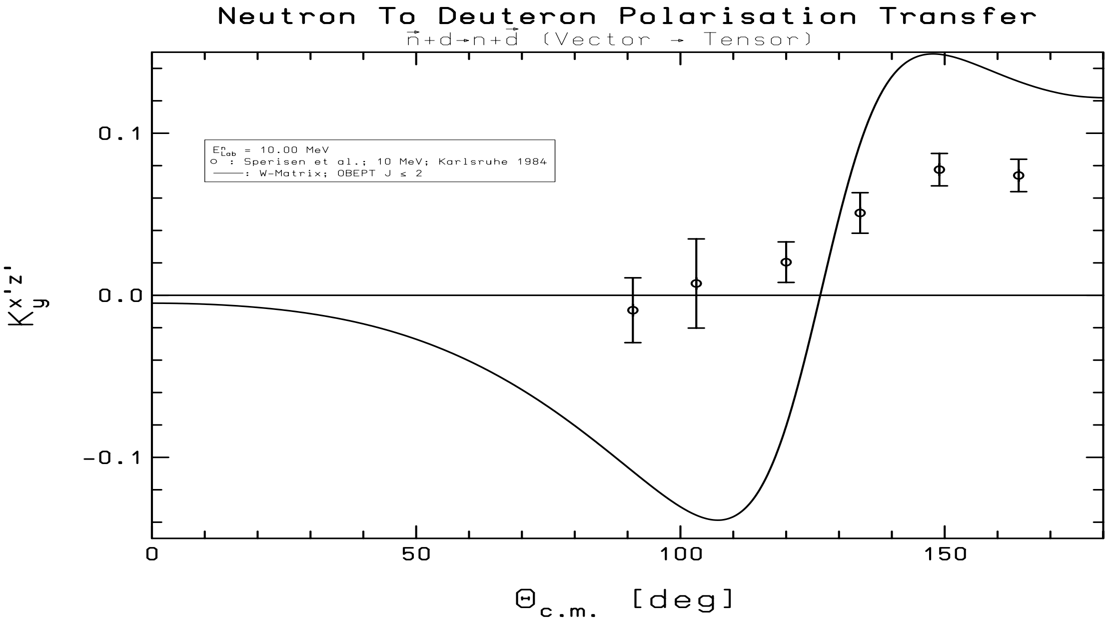

Abbildung 38: $\mathrm{K}_y^{x'z'}$, sonst wie in Abbildung 10.

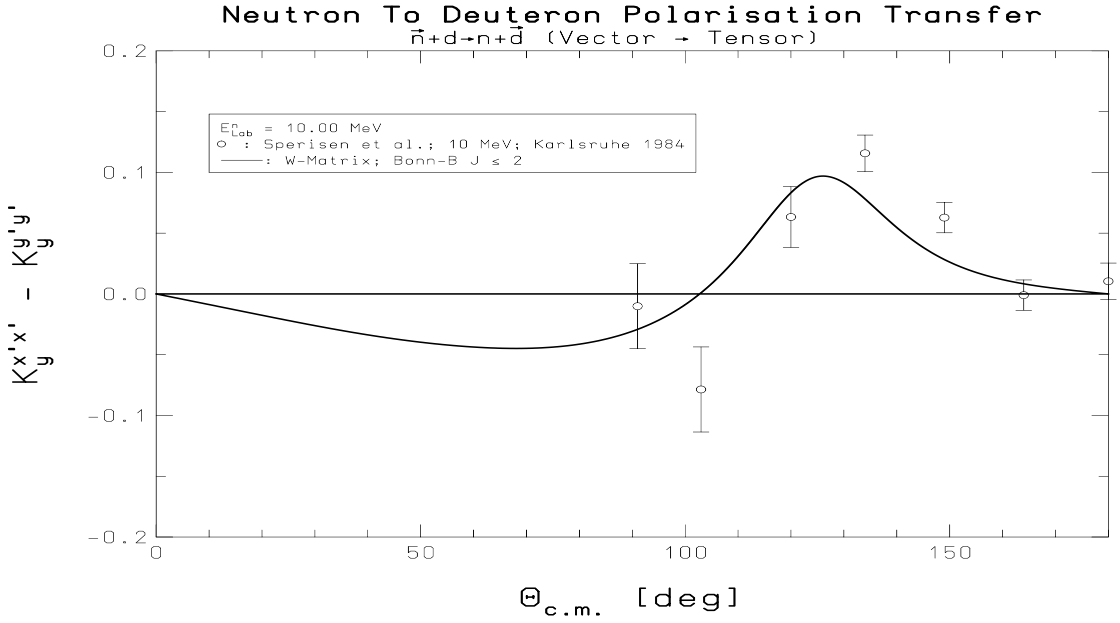

Abbildung 39: $K_y^{x'x'}$- $K_y^{y'y'}$, sonst wie in Abbildung 9.

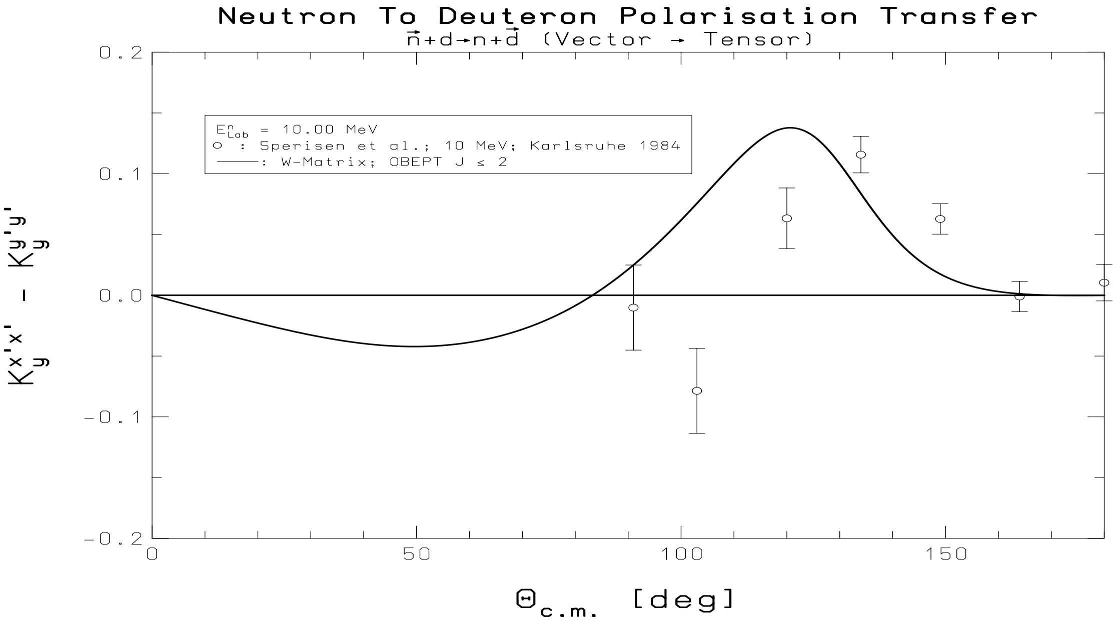

Abbildung 40: $K_y^{x'x'}$- $K_y^{y'y'}$, sonst wie in Abbildung 10.

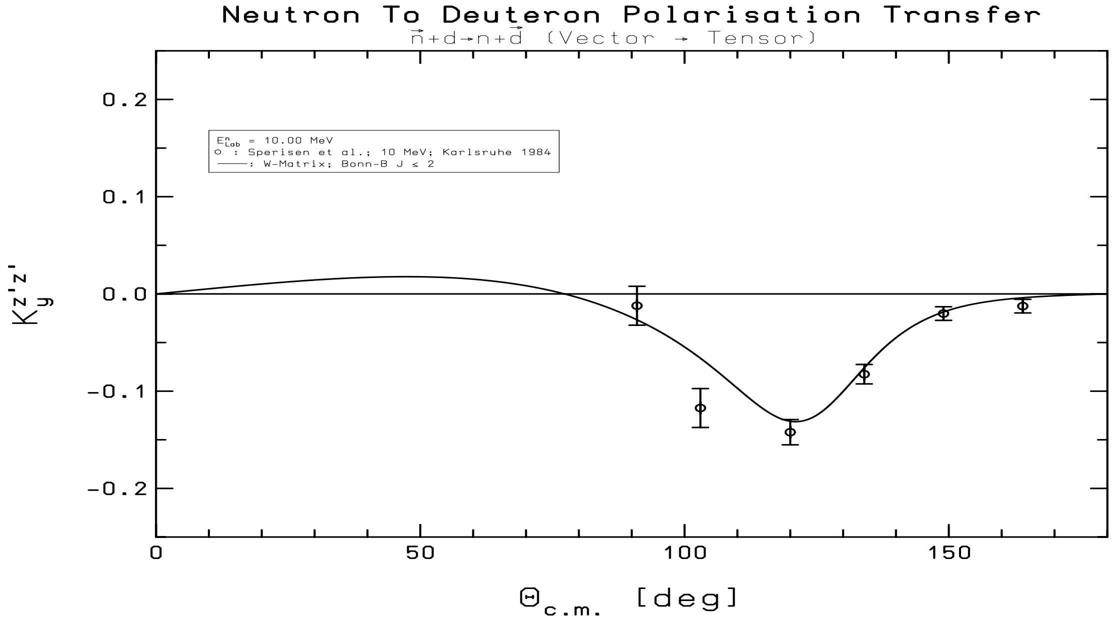

Abbildung 41: $\mathrm{K}_y^{z'z'}$, sonst wie in Abbildung 9.

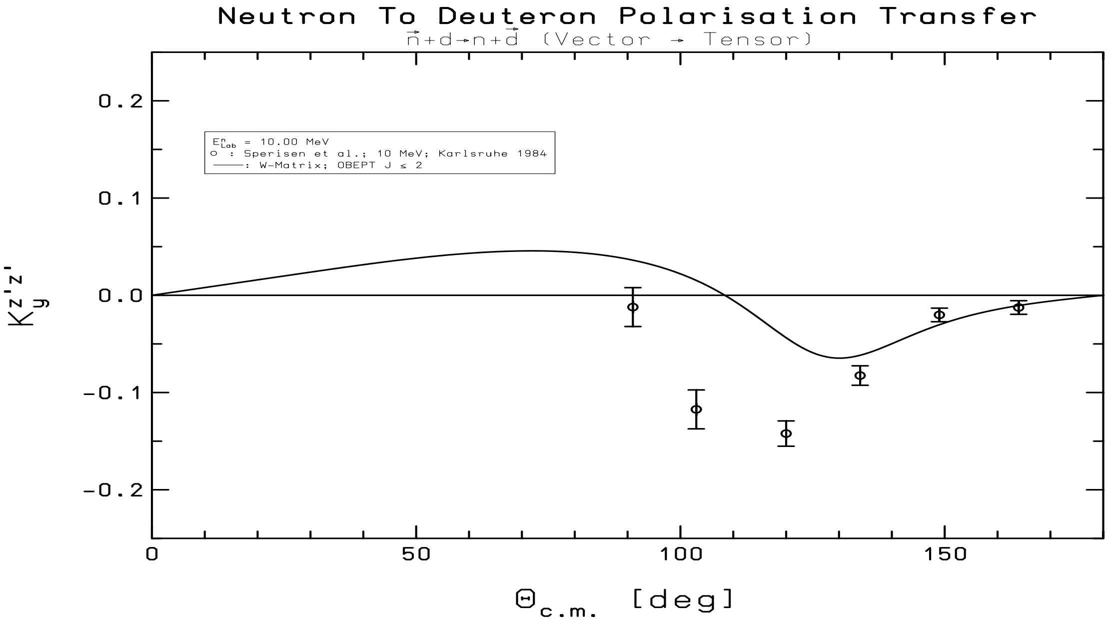

Abbildung 42: $\mathrm{K}_y^{z'z'}$, sonst wie in Abbildung 10.

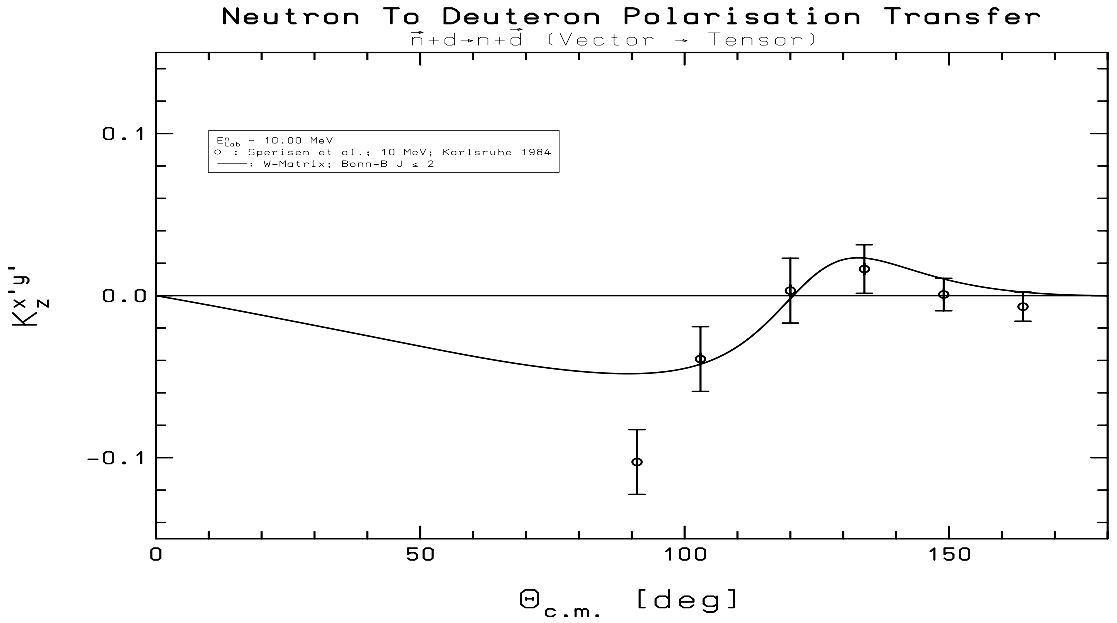

Abbildung 43: $\mathrm{K}_z^{x'y'}$, sonst wie in Abbildung 9.

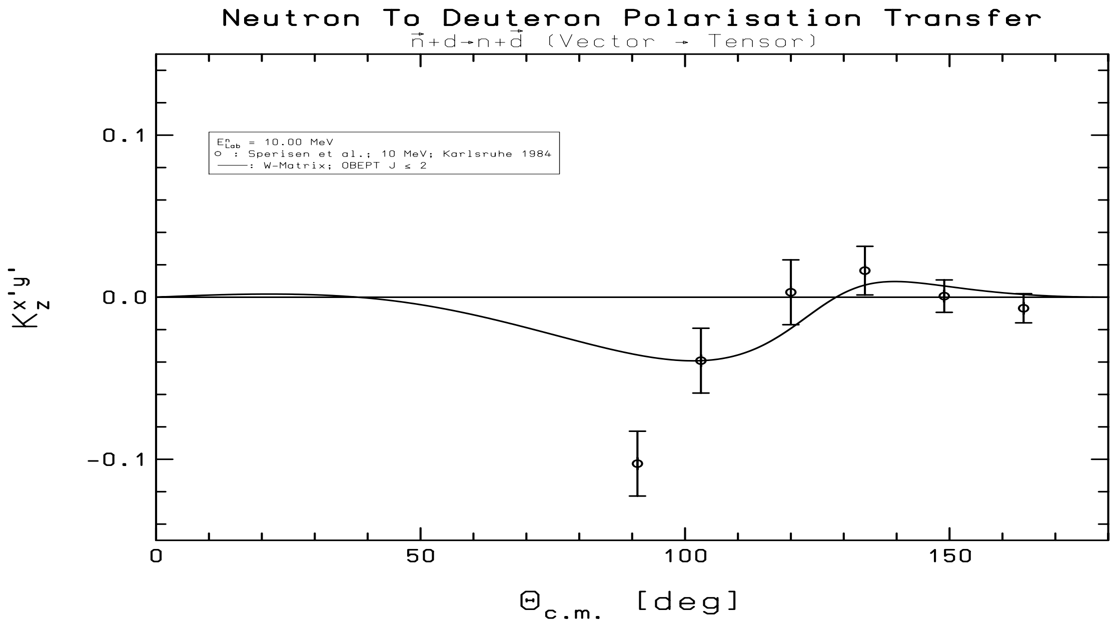

Abbildung 44: $\mathrm{K}_z^{x'y'}$, sonst wie in Abbildung 10.

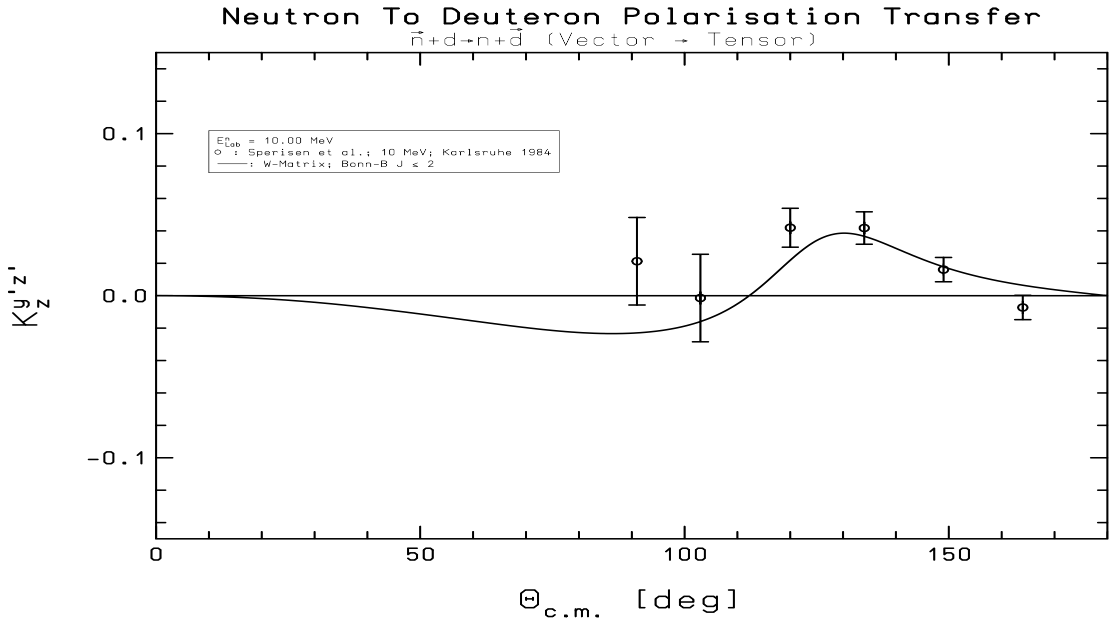

Abbildung 45: $K_z^{y'z'}$, sonst wie in Abbildung 9.

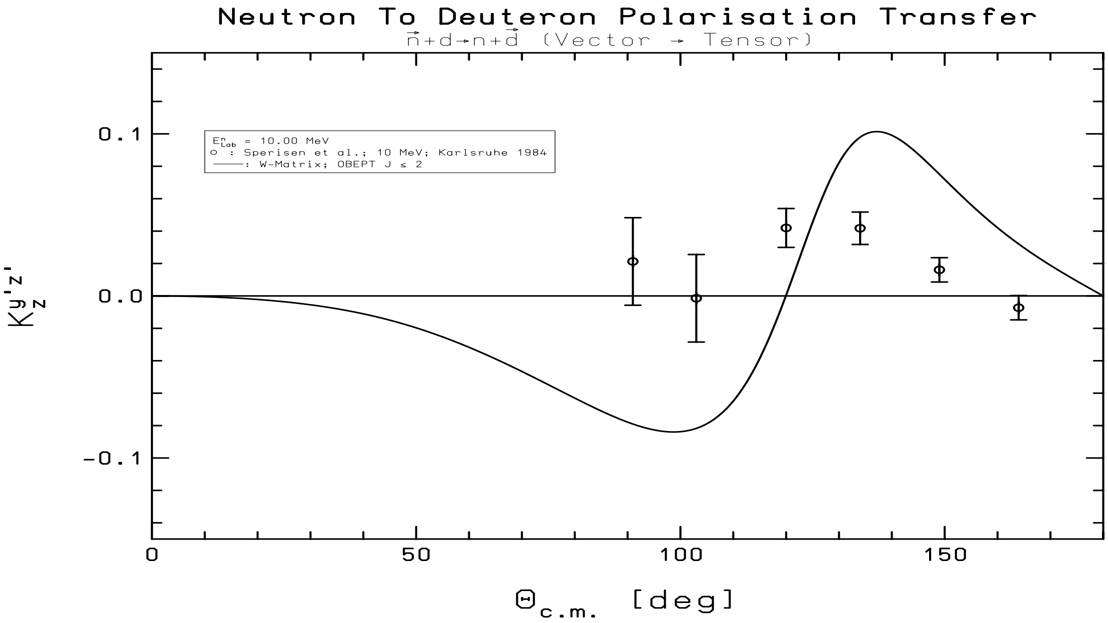

Abbildung 46: $K_z^{y'z'}$, sonst wie in Abbildung 10.

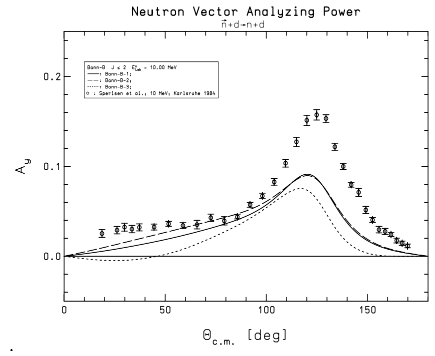

Abbildung 47: A_y bei verschiedenem k-Verlauf ausschließlich im $^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal; Potential: Bonn-B J≤2, experimentelle Daten aus [39].

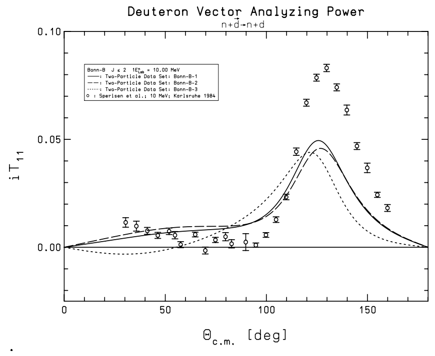

Abbildung 48: Wie Abbildung 47, jetzt aber iT_{11}.

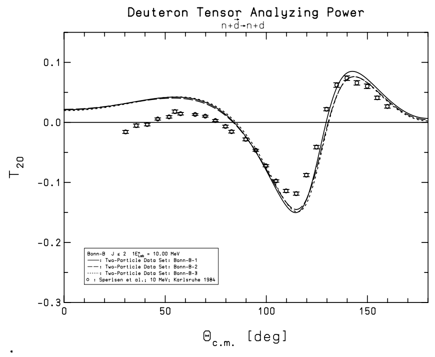

Abbildung 49: Wie Abbildung 47, jetzt aber T_{20}.

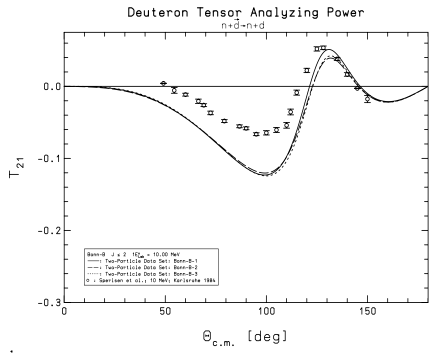

Abbildung 50: Wie Abbildung 47, jetzt aber T_{21}.

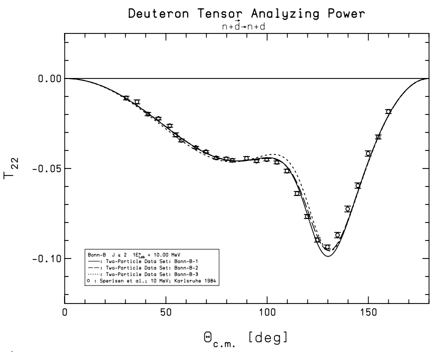

Abbildung 51: Wie Abbildung 47, jetzt aber T_{22}.

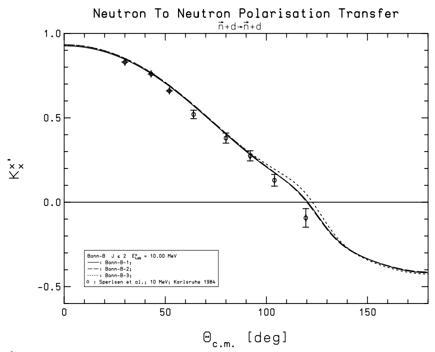

Abbildung 52: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_x^{x\prime}$.

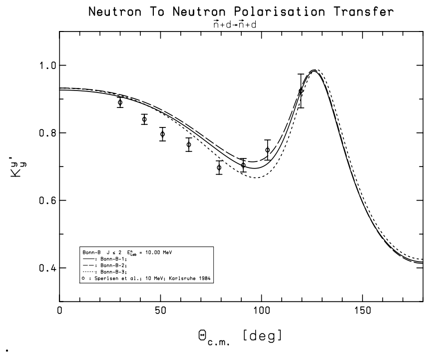

Abbildung 53: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_y^{y'}$.

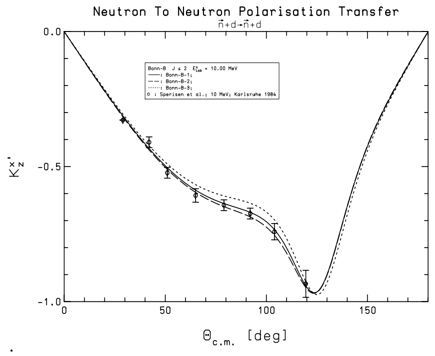

Abbildung 54: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_x^{z'}$.

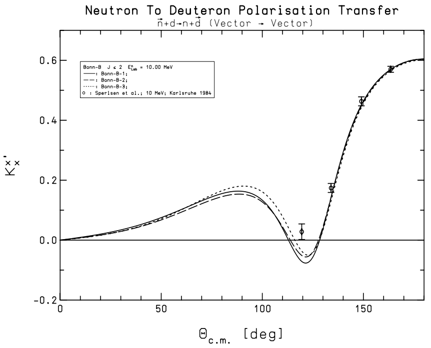

Abbildung 55: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_x^{x'}$ (Vektor→Vektor).

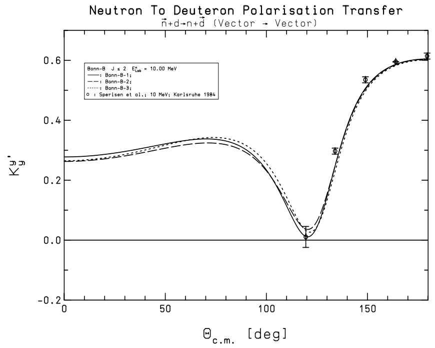

Abbildung 56: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_y^{y'}$ (Vektor→Vektor).

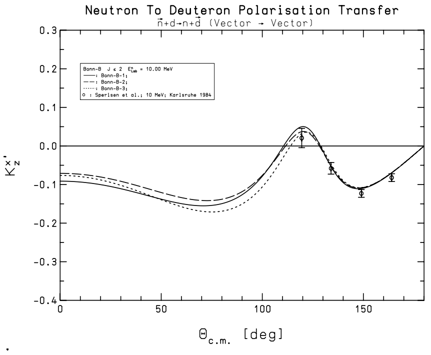

Abbildung 57: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_z^{x'}$ (Vektor→Vektor).

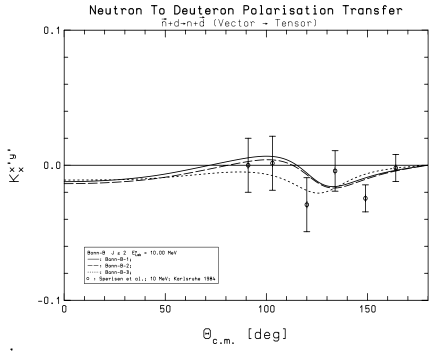

Abbildung 58: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_x^{x'y'}$.

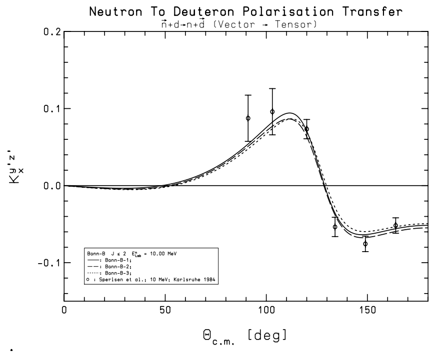

Abbildung 59: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_x^{y'z'}$.

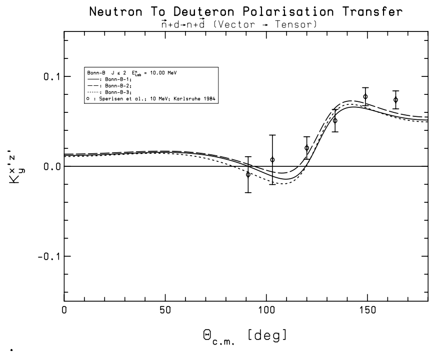

Abbildung 60: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_y^{x'z'}$.

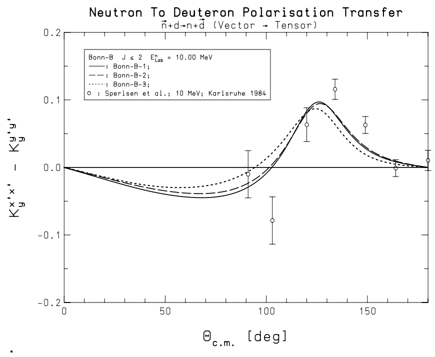

Abbildung 61: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_y^{x'x'} - K_y^{y'y'}$.

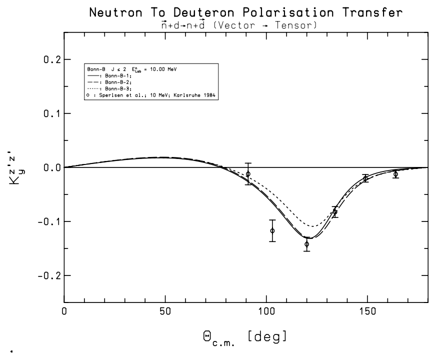

Abbildung 62: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_y^{z'z'}$.

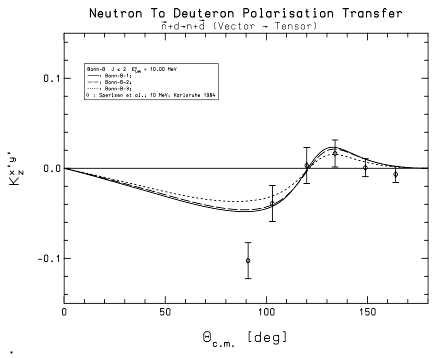

Abbildung 63: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_z^{x'y'}$.

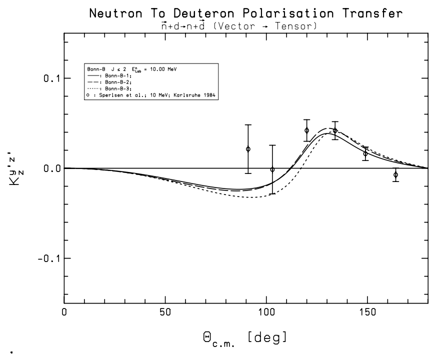

Abbildung 64: Wie Abbildung 47, jetzt aber $K_z^{y'z'}$.

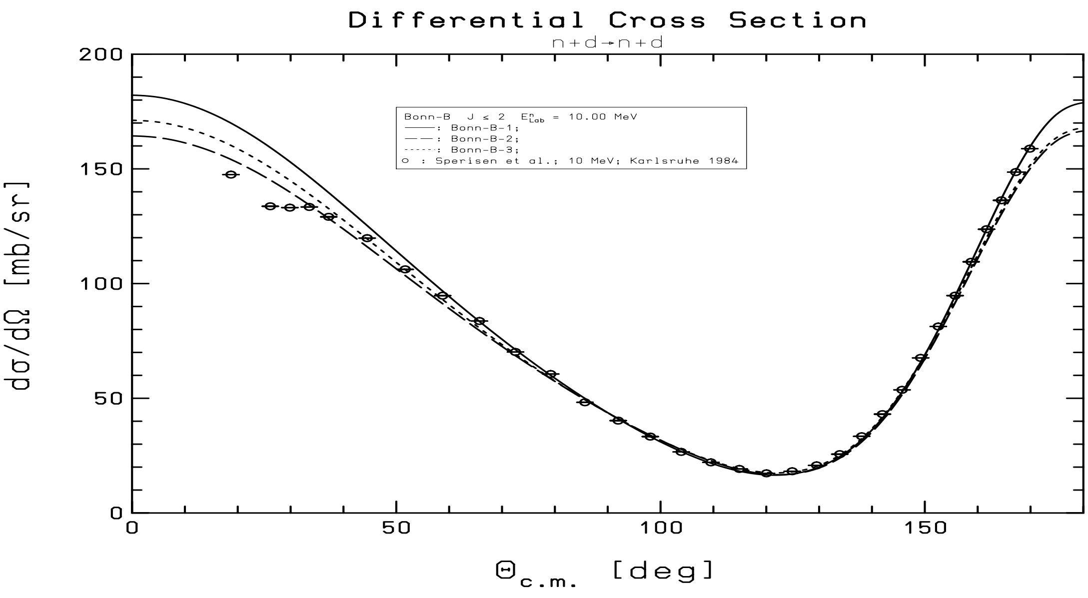

Abbildung 65: Wie Abbildung 47, jetzt aber $\frac{d\sigma}{d\Omega}$.

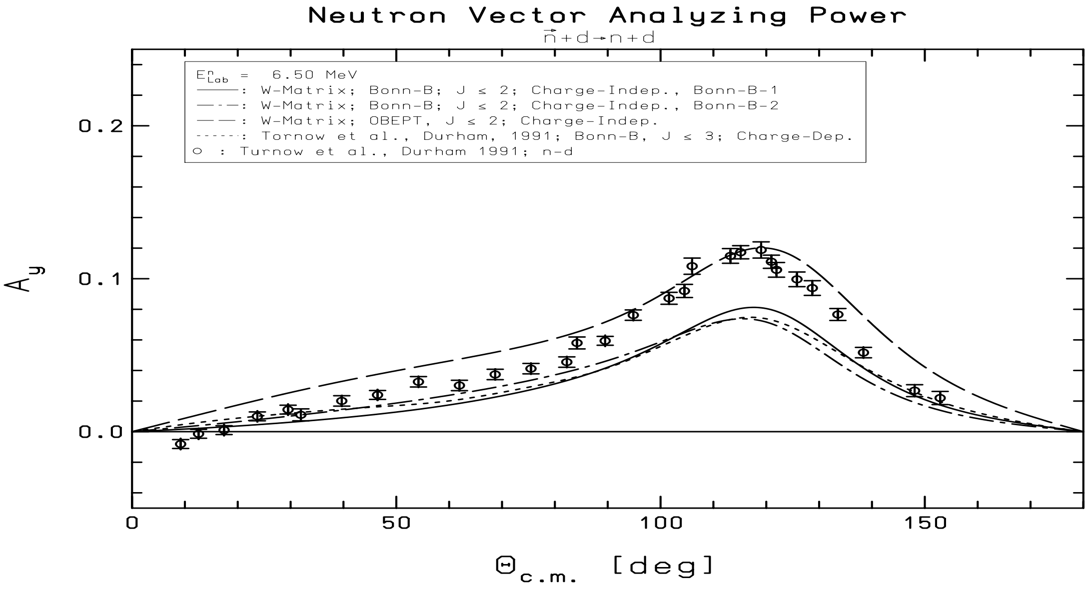

Abbildung 66: Die Neutron-Vektoranalysiertstärke A_y bei 6.5 MeV ausgerechnet mit der W-Matrix-Methode unter Verwendung der energieunabhängigen Version Bonn-B und Zweiteilchen-Datensatz Bonn-B-1 bzw.Bonn-B-2 und der energieabhängigen Version OBEPT des Bonn-Potentials im Vergleich zu experimentellen Daten [43] und einer Faddeev-artigen zweidimensionalen Referenzrechnung mit Bonn-B [43].

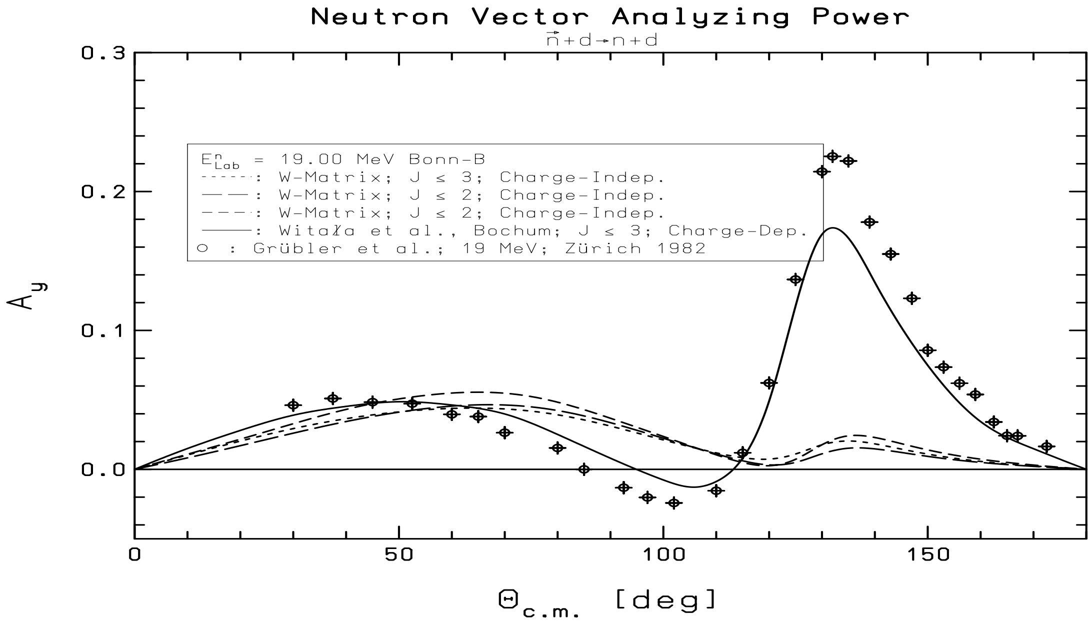

Abbildung 67: A_y, Potential: Bonn-B, $J \leq 2, 3$, E_{Lab}=19 MeV, verschiedene k-Verläufe im Vergleich zu einer Faddeev-artigen Rechnung aus [51] und experimentellen Daten [46].

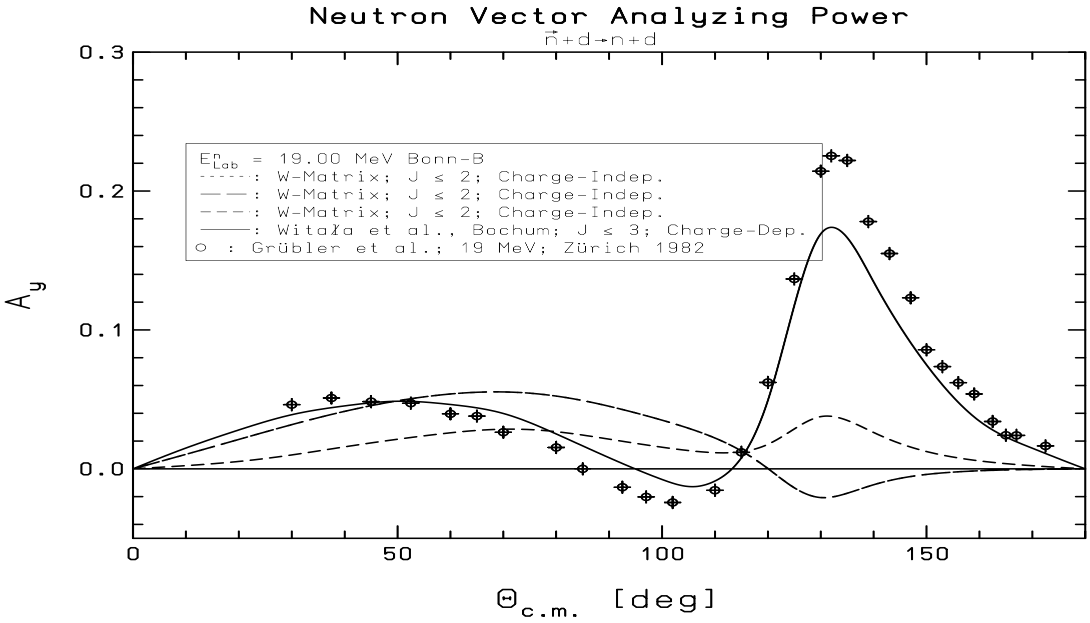

Abbildung 68: A_y, sonst wie Abbildung 67.

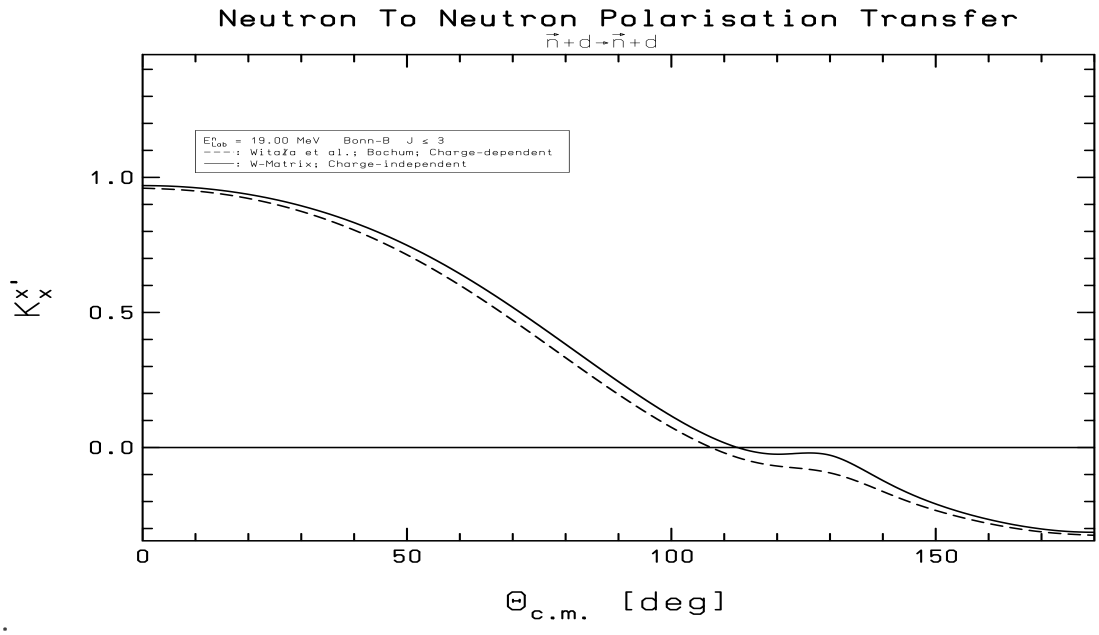

Abbildung 69: $K_x^{x'}$, Potential: Bonn-B, J≤3, E_{Lab}=19 MeV, im Vergleich zu einer Faddeev-artigen Referenzrechnung aus [51].

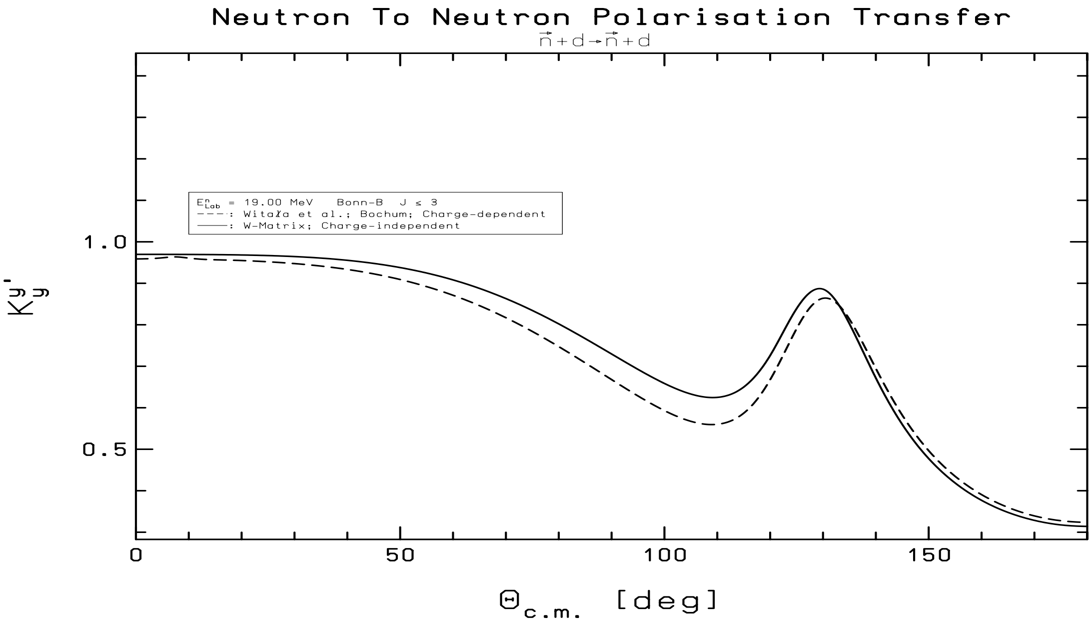

Abbildung 70: $K_y^{y'}$, sonst wie Abbildung 69.

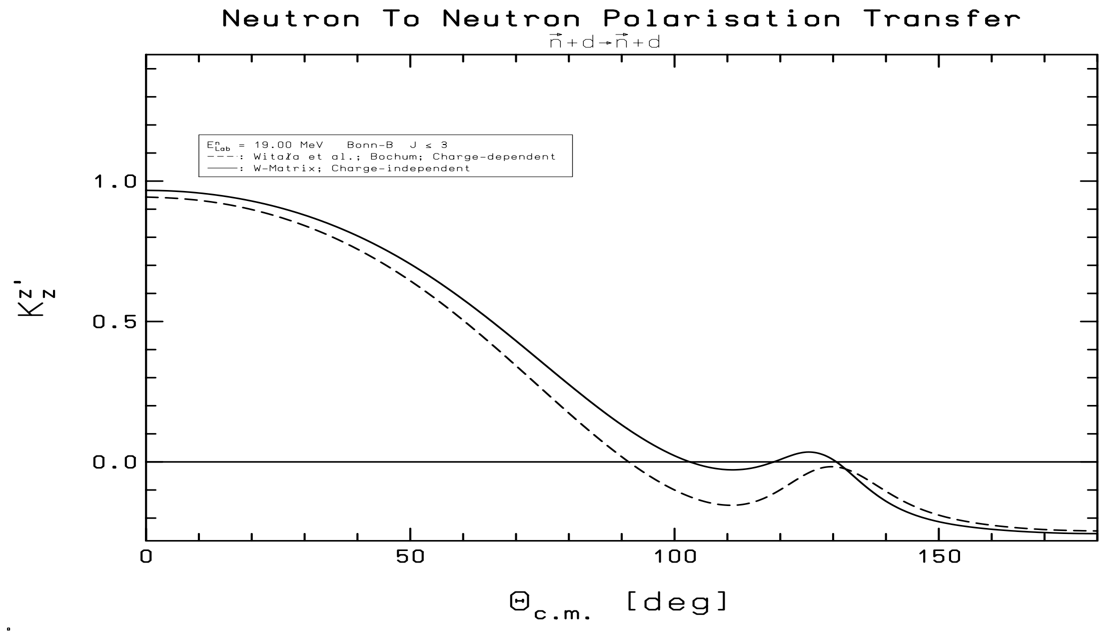

Abbildung 71: $K_z^{z\prime}$, sonst wie Abbildung 69.

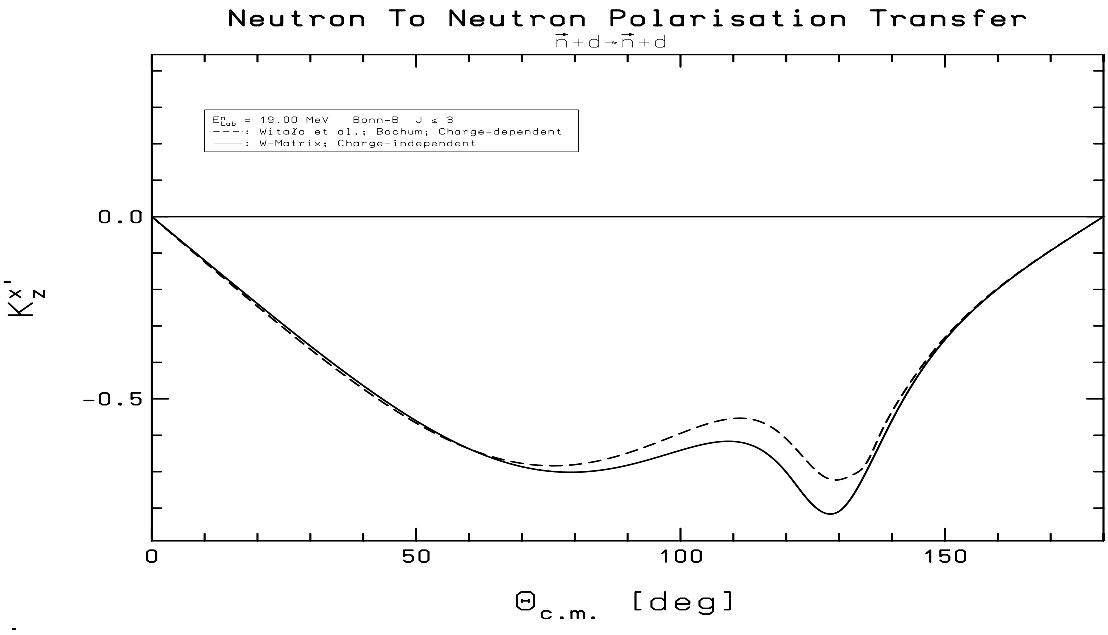

Abbildung 72: $K_z^{x\prime}$, sonst wie Abbildung 69.

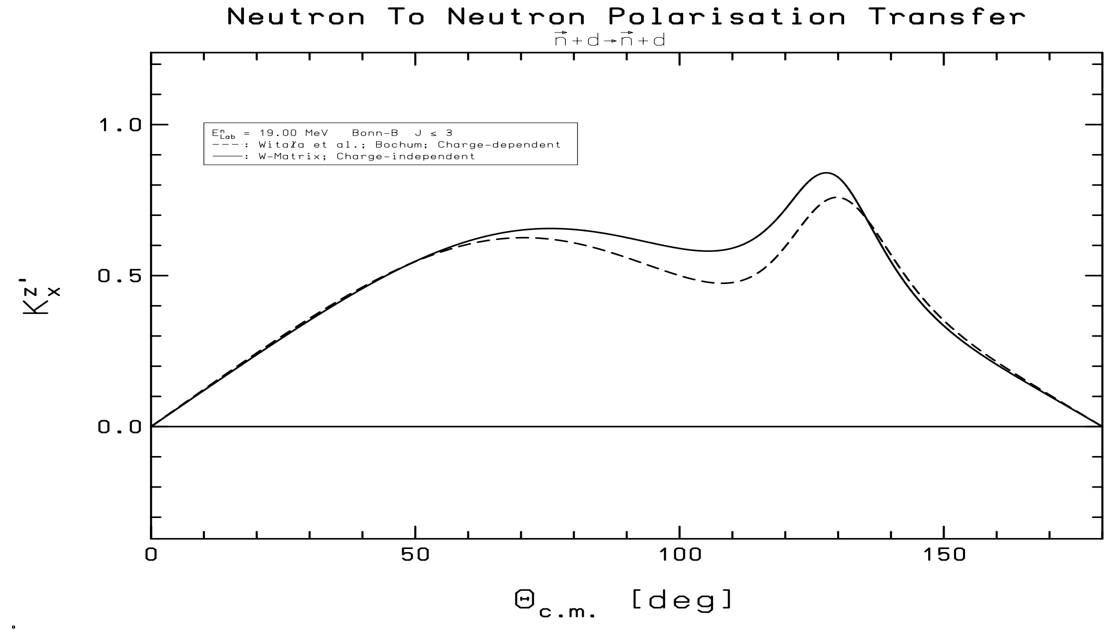

Abbildung 73: $K_x^{z'}$, sonst wie Abbildung 69.

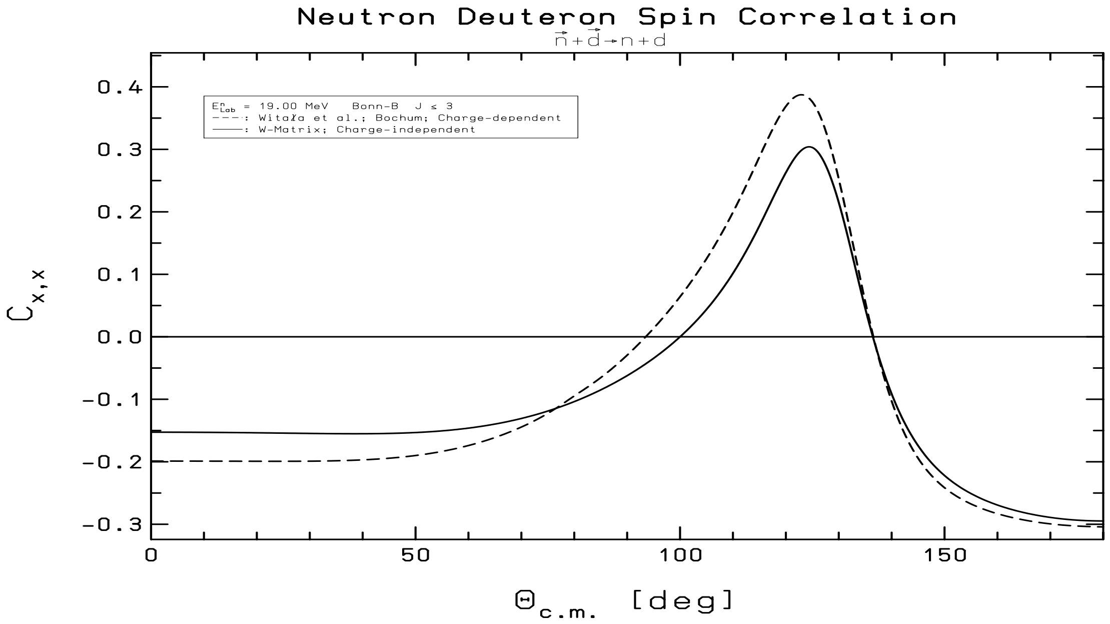

Abbildung 74: C_{xx}, sonst wie Abbildung 69.

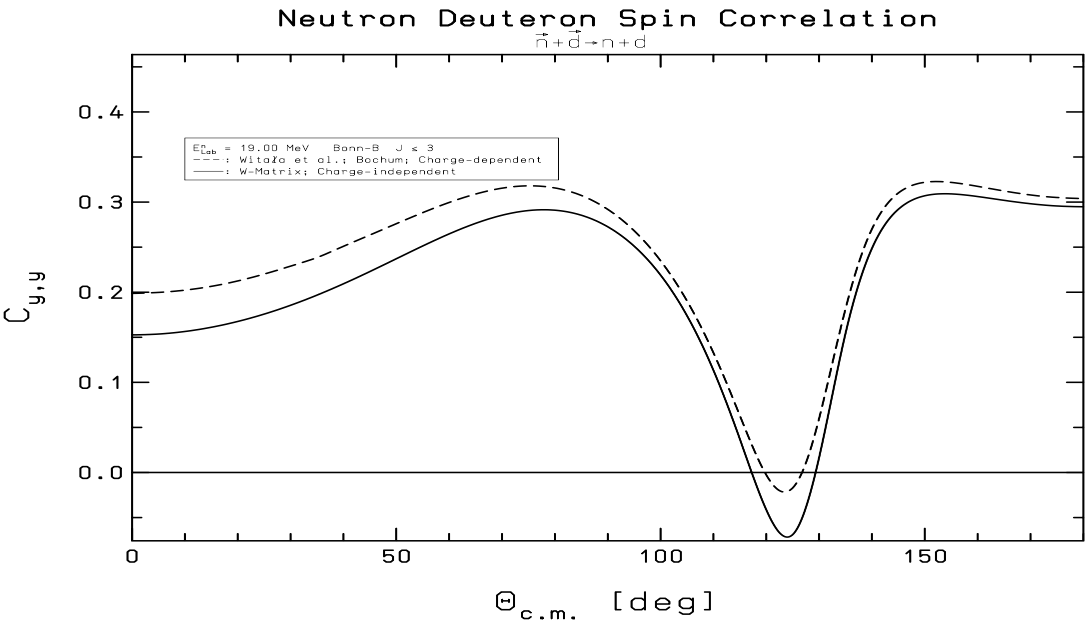

Abbildung 75: C_{yy}, sonst wie Abbildung 69.

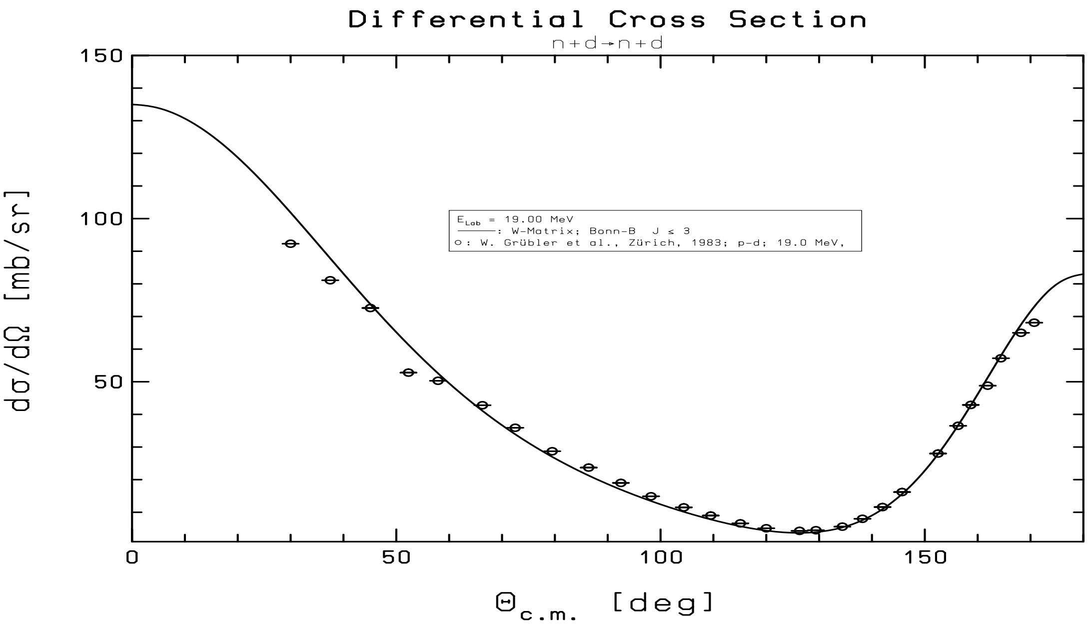

Abbildung 76: Differentieller Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$, sonst wie Abbildung 69, experimentelle Daten aus [46].

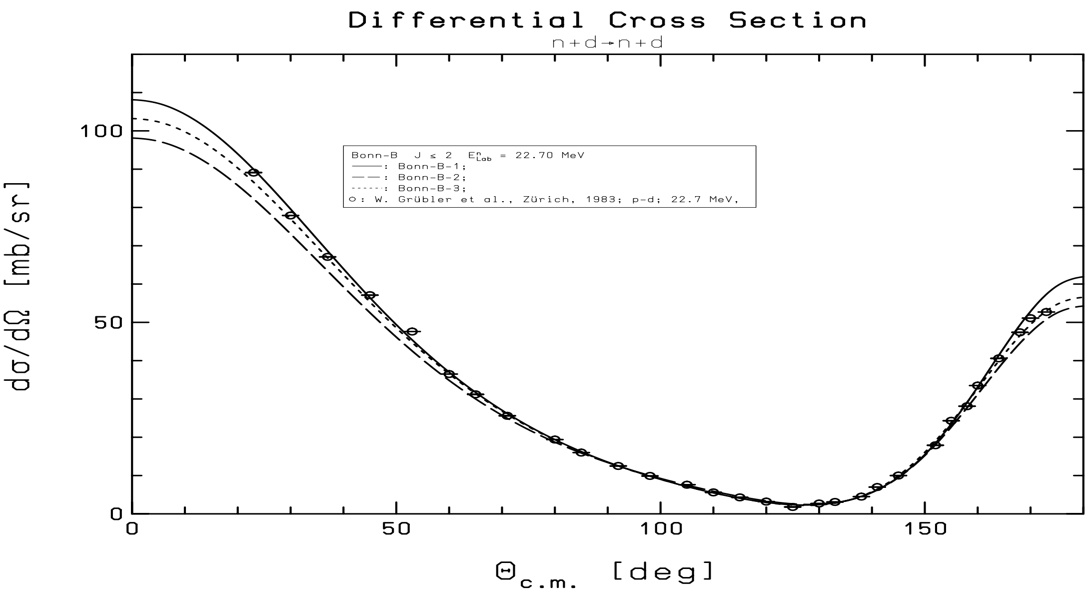

Abbildung 77: Differentieller Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ bei 22.7 MeV, berechnet bei ausschließlich im $^3P_2 - {}^3F_2$-Kanal verschiedenem k-Verlauf im W-Matrix-Formalismus mit Bonn-B, und experimentellen Daten aus [46].

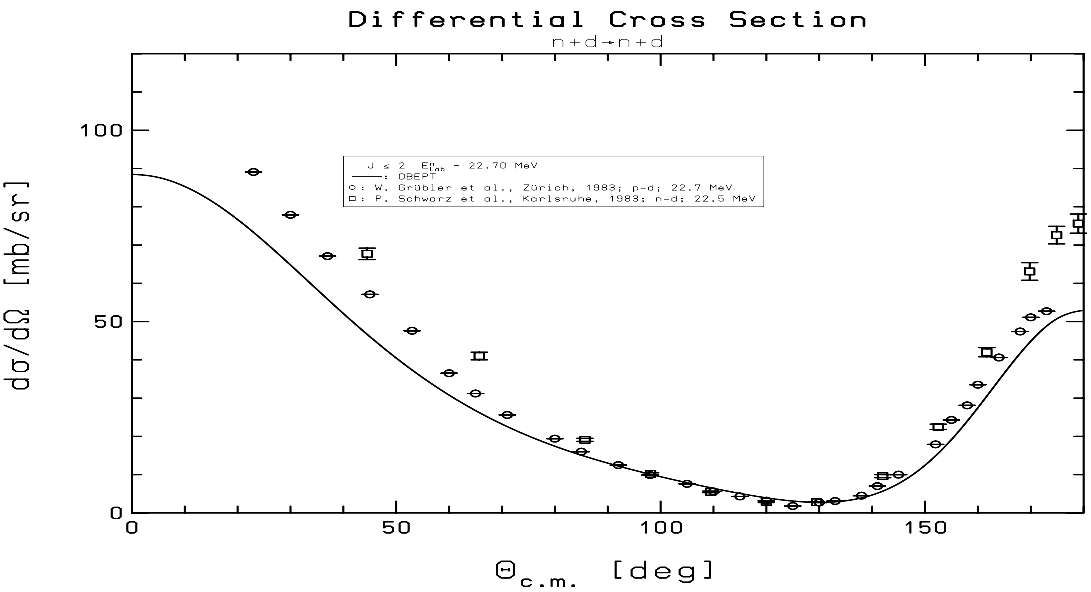

Abbildung 78: Differentieller Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ bei 22.7 MeV, bestimmt im W-Matrix-Formalismus mit OBEPT, und experimentelle Daten aus [46] und [41].

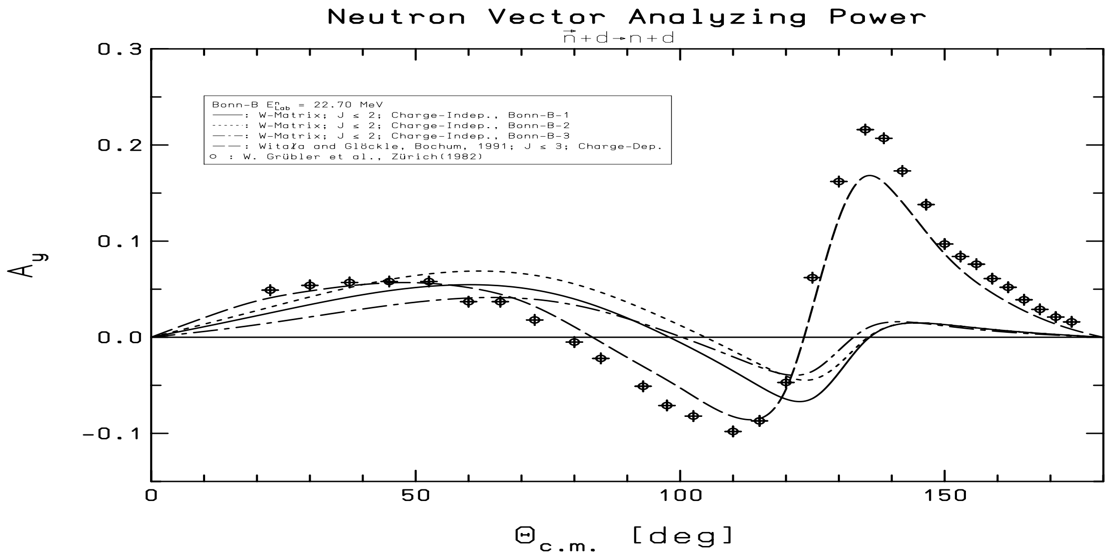

Abbildung 79: Die Neutron-Vektoranalysierstärke A_y bei 22.7 MeV, berechnet mit Bonn-B im W-Matrix-Formalismus, zusätzlich in Abhängigkeit vom Zweiteilchen-Input-Datensatz, aufgetragen gegen experimentelle Daten aus [46] und eine Referenzrechnung von Witala und Glöckle [47].

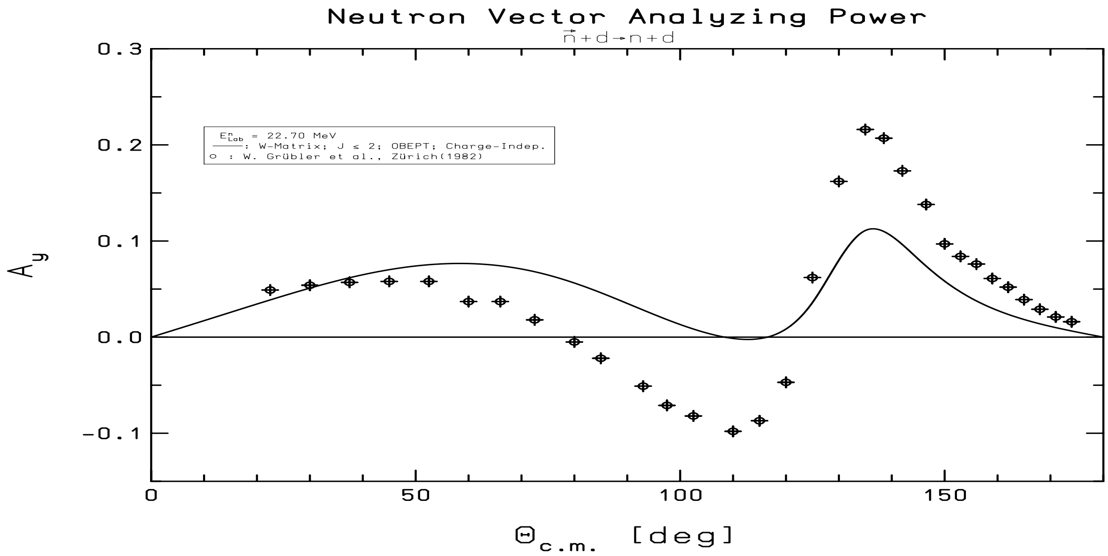

Abbildung 80: Die Neutron-Vektoranalysierstärke A_y bei 22.7 MeV, berechnet mit OBEPT im W-Matrix-Formalismus, aufgetragen gegen experimentelle Daten aus [46].

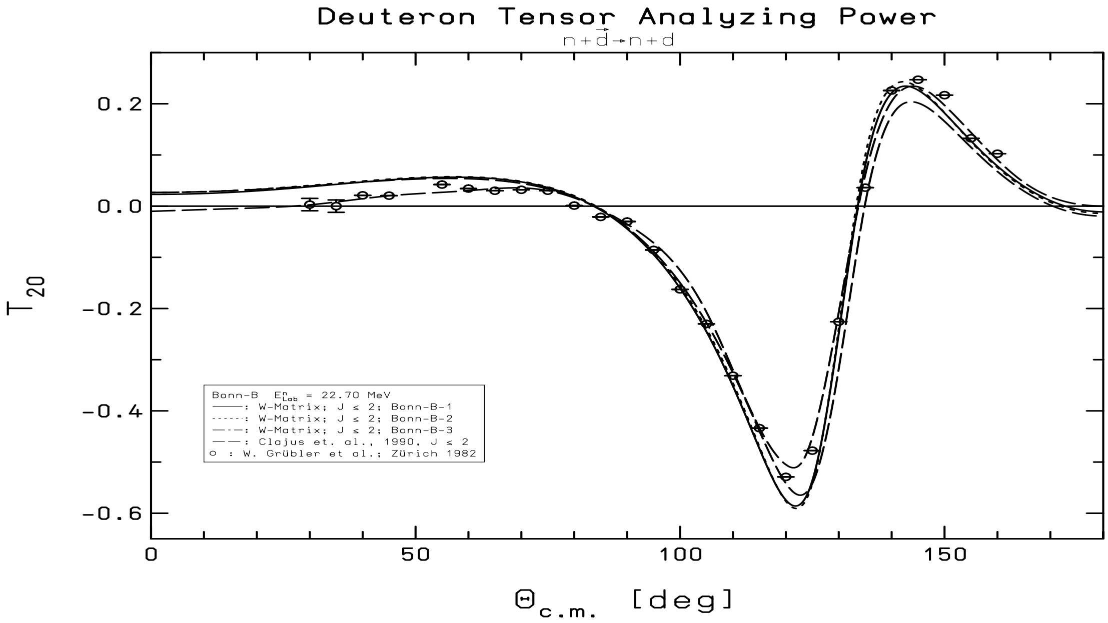

Abbildung 81: T_{20}, W-Matrix-Rechnungen wie Abbildung 79, Referenzrechnung und experimentelle Werte aus [45], letztere werden dort aus [46] zitiert.

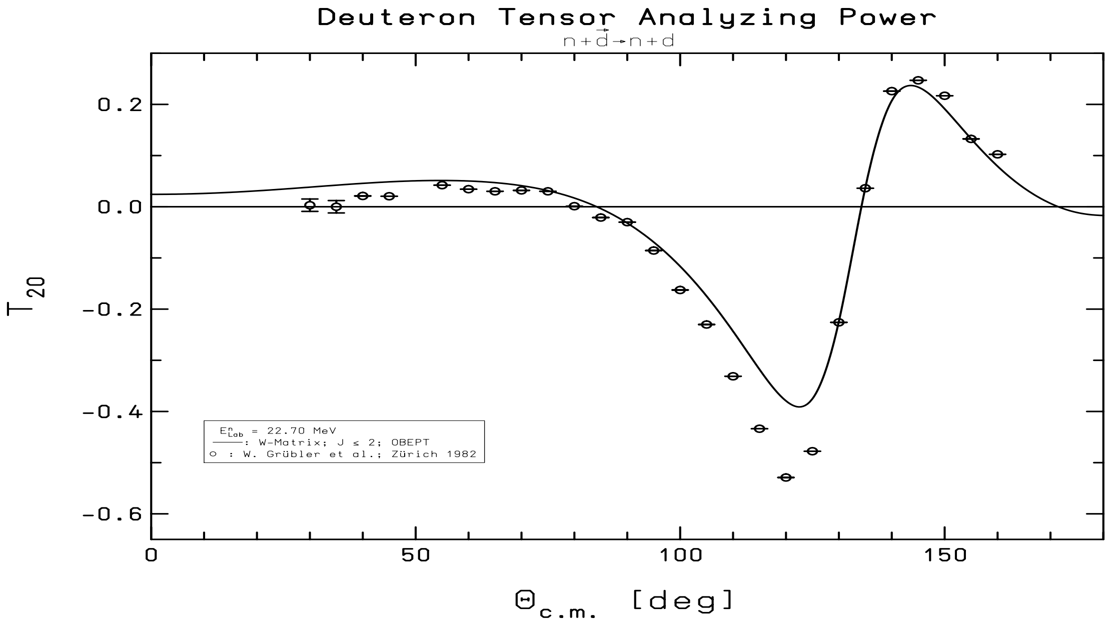

Abbildung 82: T_{20}, wie 81, allerdings jetzt OBEPT und ohne Referenzrechnungen.

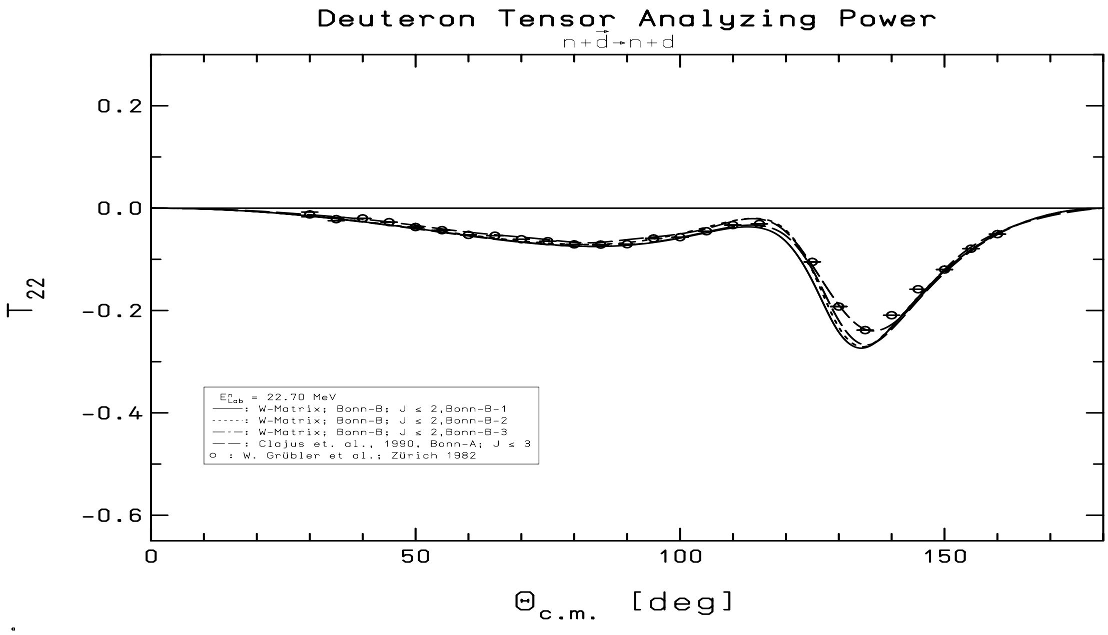

Abbildung 83: T_{22}, W-Matrix Rechnung mit Bonn-B, experimentelle Werte ebenso wie Referenzrechnung mit Potential Bonn-A aus [44].

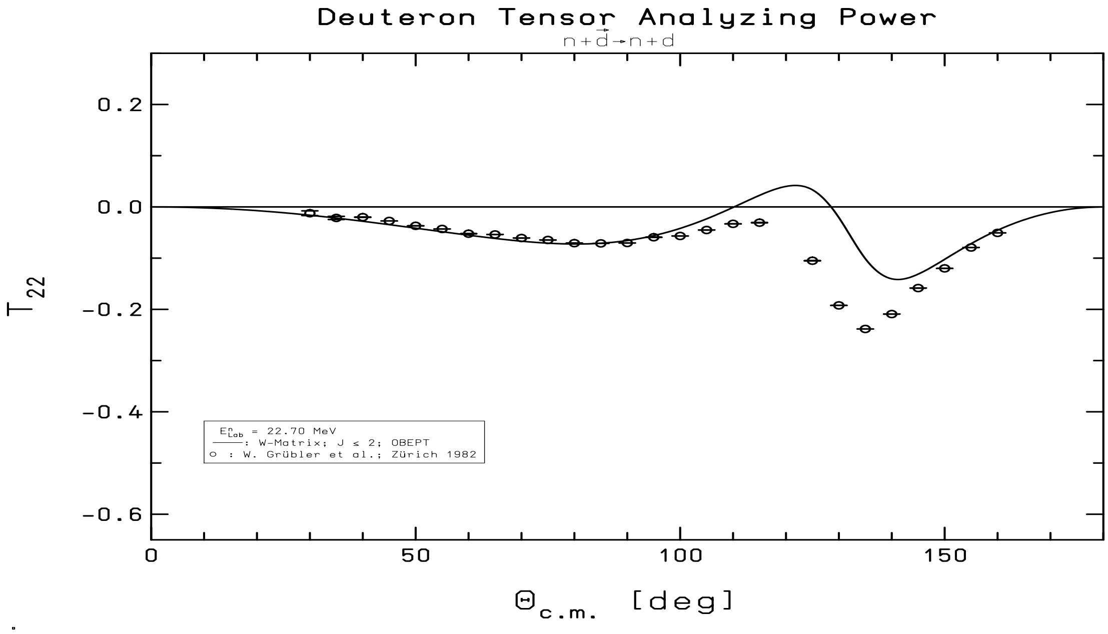

Abbildung 84: T_{22} berechnet mit OBEPT, sonst wie Abbildung 83 allerdings ohne Referenzrechnung.

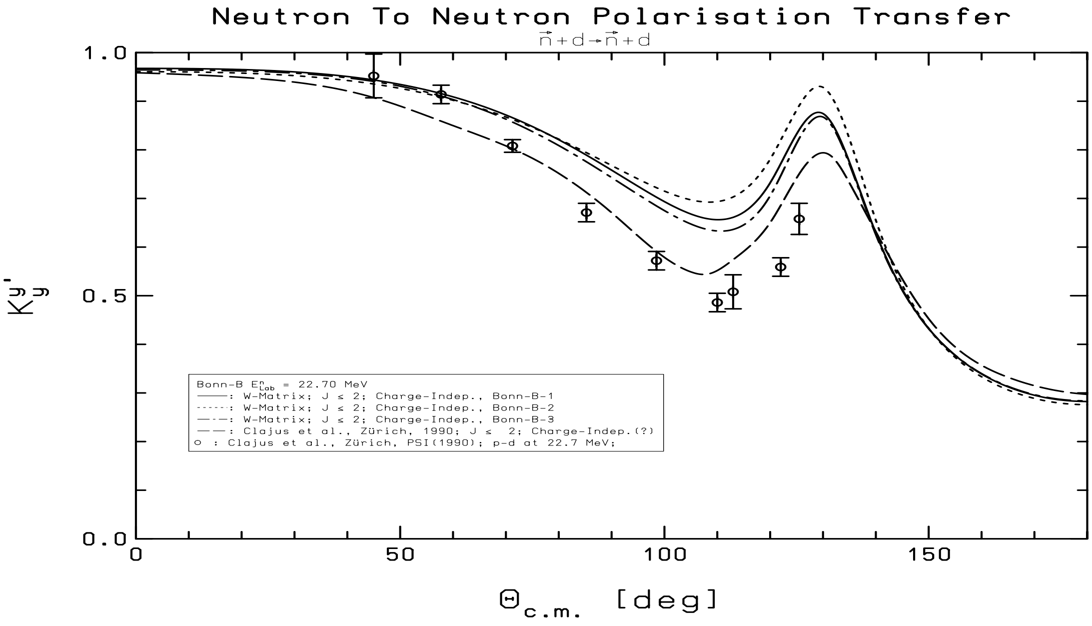

Abbildung 85: $K_y^{y'}$, sonst wie Abbildung 83, Referenzrechnung allerdings jetzt mit Bonn-B.

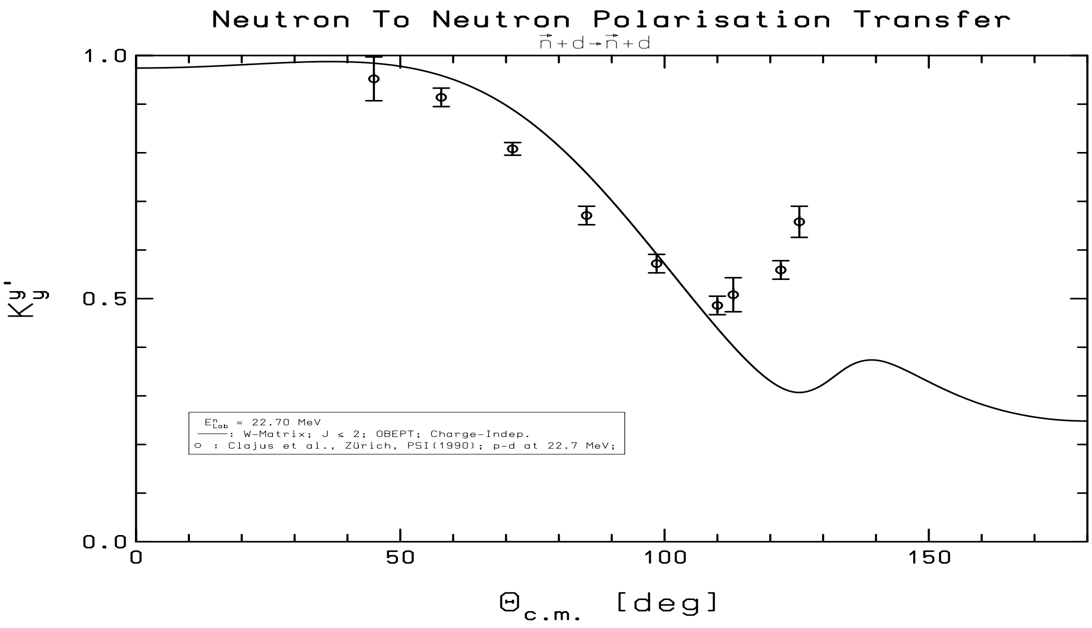

Abbildung 86: $K_y^{y'}$, sonst wie Abbildung 84.

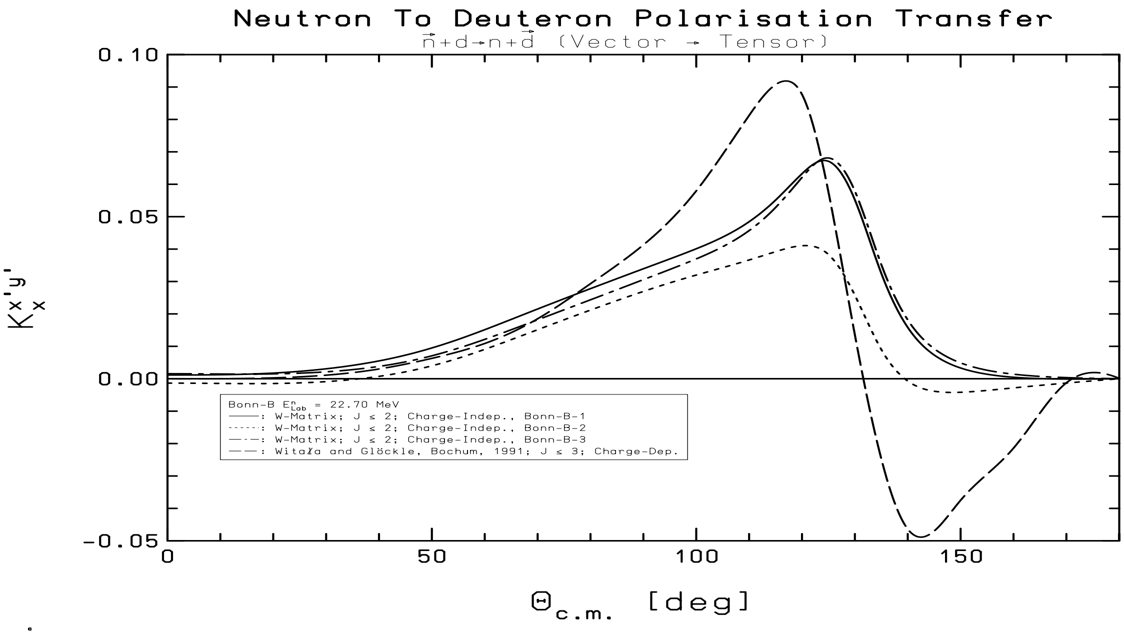

Abbildung 87: $K_x^{x'y'}$, verschiedene k-Verläufe bei W-Matrix-Rechnungen mit Bonn-B im Vergleich zu einer Referenzrechnung aus [47].

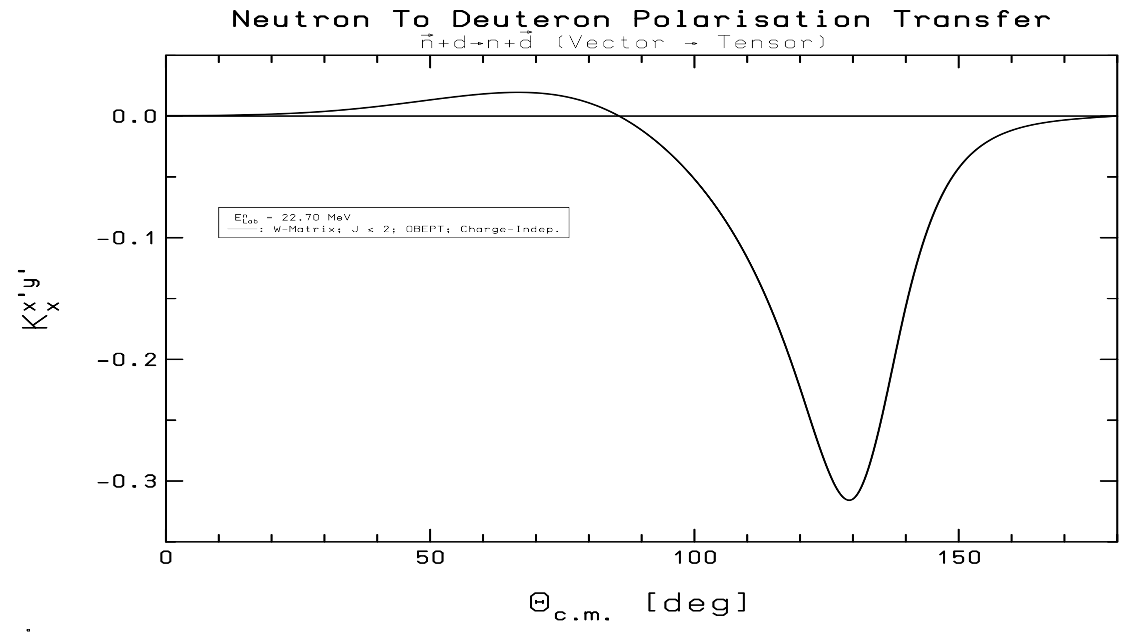

Abbildung 88: $K_x^{x'y'}$, berechnet mit OBEPT, ohne Referenzrechnung.

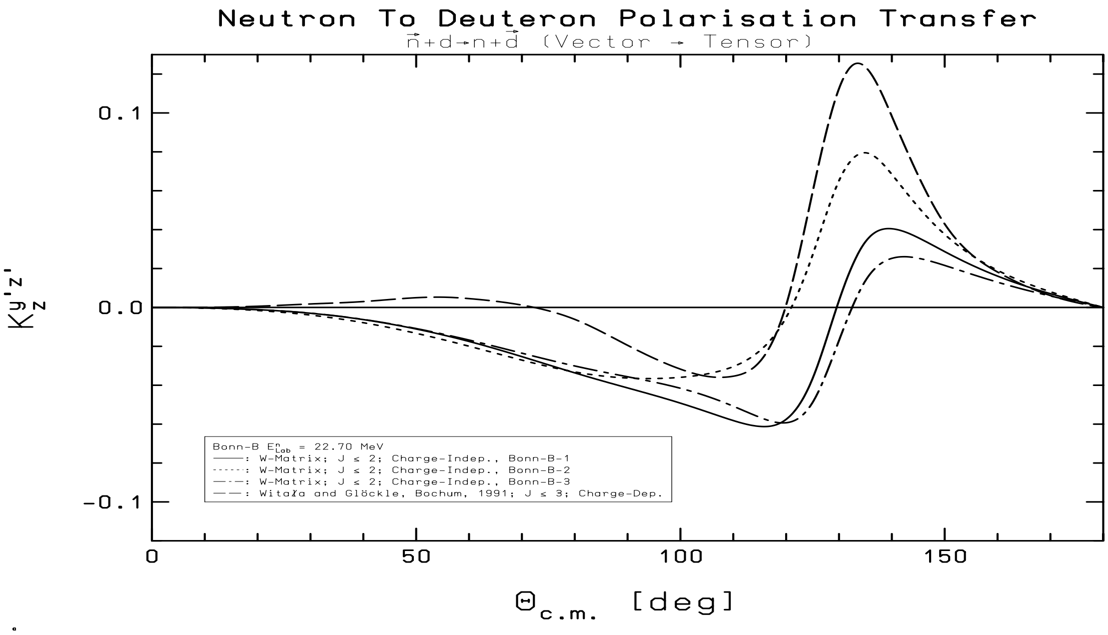

Abbildung 89: $K_z^{y'z'}$, sonst wie Abbildung 87.

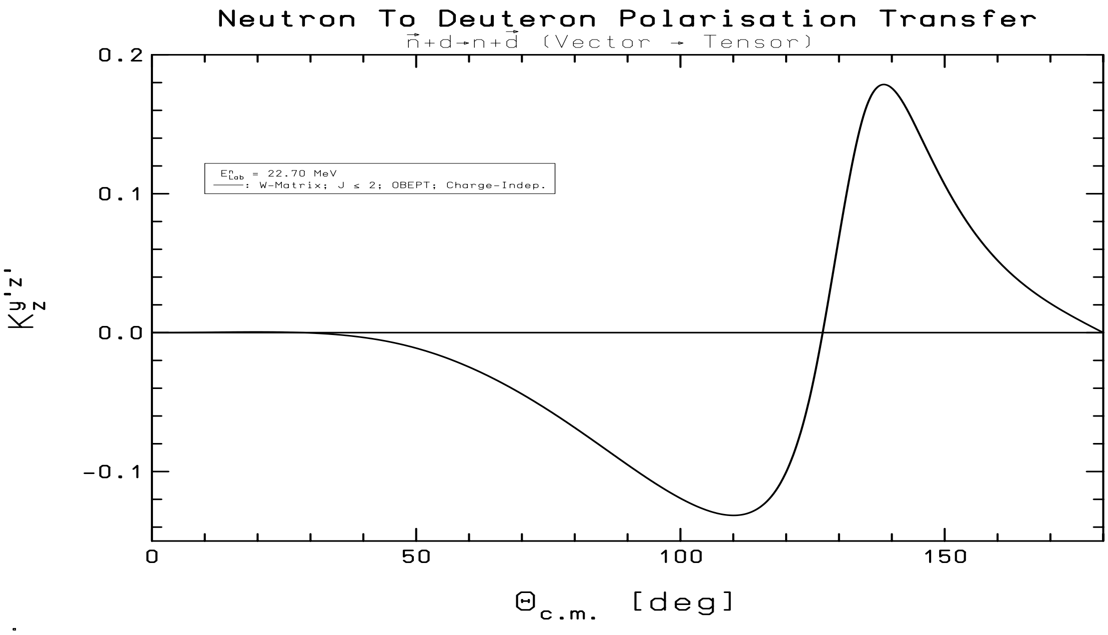

Abbildung 90: $K_z^{y'z'}$, sonst wie Abbildung 88.

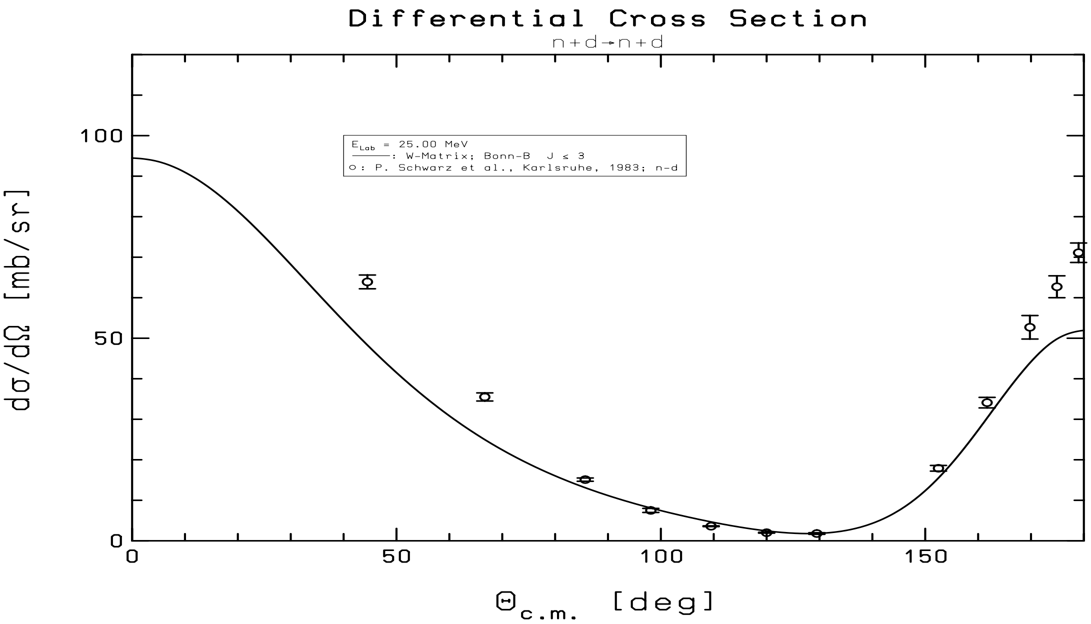

Abbildung 91: Differentieller Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ bei 25.0 MeV, berechnet im W-Matrix-Formalismus mit Bonn-B, und experimentelle Daten.

A Anhänge

A.1 Transformation der Impulskoordinaten

Im folgenden werden Transformationen zwischen verschiedenen Impulskoordinatensätzen angegeben. Die Notation ist die von Kapitel 2.1. $(\alpha\beta\gamma)$ ist eine zyklische Permutation der Zahlen (123). Es sei noch einmal daran erinnert, daß die Nukleonenmasse auf m=1 gesetzt worden ist.

Zuerst wird der Zusammenhang zwischen den kartesischen Impulsen $\vec{k}_\alpha$ einerseits und andererseits dem Gesamtimpuls $\vec{P}$ sowie den Relativimpulsen $\vec{p}_\alpha$ und $\vec{q}_\alpha$ zu einem festen Jacobi-Koordinatensatz α angegeben.

$$\begin{pmatrix} \vec{P} \\ \vec{p}_\alpha \\ \vec{q}_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{k}_\alpha \\ \vec{k}_\beta \\ \vec{k}_\gamma \end{pmatrix}. \tag{A.1}$$

Die inverse Transformation lautet:

$$\begin{pmatrix} \vec{k}_\alpha \\ \vec{k}_\beta \\ \vec{k}_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 1 \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{P} \\ \vec{q}_\alpha \\ \vec{p}_\alpha \end{pmatrix}. \tag{A.2}$$

Die Transformation der Relativimpulse von einem Koordinatensatz α in einen anderen Satz β und die Umkehrtransformation sind gegeben durch:

$$\begin{pmatrix} \vec{q}_\alpha \\ \vec{p}_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -1 \\ \frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{q}_\beta \\ \vec{p}_\beta \end{pmatrix} \tag{A.3}$$

$$\begin{pmatrix} \vec{q}_\beta \\ \vec{p}_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 1 \\ -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{q}_\alpha \\ \vec{p}_\alpha \end{pmatrix}. \tag{A.4}$$

A.2 Resolventen und Mølleroperatoren

A.2.1 Die Resolventengleichungen

Die vollständige Dreiteilchen-Resolvente ist qua definitione gegeben durch

$$G(z) = \frac{1}{z - H}, \tag{A.5}$$

mit Hilfe der Kanalresolventen $G_\alpha(z) = (z - H_\alpha)^{-1}$ folgt wegen der Beziehung $G_\alpha^{-1}(z) - G^{-1}(z) = \bar{V}_\alpha(z)$ durch Anwendung von $G_\alpha(z)$ von links und G(z) von rechts sofort

$$G(z) = G_\alpha(z) + G_\alpha(z)\,\bar{V}_\alpha(z)\,G(z) \tag{A.6}$$

und durch Anwendung von G(z) von links und $G_\alpha(z)$ von rechts

$$G(z) = G_\alpha(z) + G(z)\,\bar{V}_\alpha(z)\,G_\alpha(z). \tag{A.7}$$

In Anhang A.3 wird eine nützliche Identität verwendet, es ist

$$V_\gamma G_\gamma = T_\gamma G_0 \qquad G_\gamma V_\gamma = G_0 T_\gamma. \tag{A.8}$$

Das ergibt sich direkt aus der Resolventengleichung im Kanal γ

$$G_\gamma = G_0 + G_0\,V_\gamma\,G \tag{A.9}$$

und der Darstellung der Kanalresolvente durch den Zweiteilchen-Übergangsoperator T_γ

$$G_\gamma = G_0 + G_0\,T_\gamma\,G_0. \tag{A.10}$$

Auf die gleiche Weise zeigt man die Gültigkeit von

$$G = G_0 + G_0\,V\,G. \tag{A.11}$$

A.2.2 Mølleroperatoren und Streuzustände

Für einen physikalischen, also normierbaren Streuzustand

$$\mid \Phi \,\rangle_\alpha^\pm = \sum_n \int d^3q\,\phi_n(\vec{q})\;\Omega_\alpha^\pm \mid n, \vec{q}\,\rangle_\alpha = \Omega_\alpha^\pm \mid \Phi\,\rangle_\alpha, \tag{A.12}$$

wobei

$$\mid \Phi \,\rangle_\alpha = \sum_n \int d^3q\,\phi_n(\vec{q}) \mid n, \vec{q}\,\rangle_\alpha \tag{A.13}$$

ist, erhält man gemäß der Definition der starken Konvergenz[19]:

$$\begin{aligned} \mid \Phi \,\rangle_\alpha^{(\pm)} &= \Omega_\alpha^{(\pm)} \mid \Phi\,\rangle_\alpha \\ &= s - \lim_{t\to\infty} \exp(iHt)\,\exp(-iH_\alpha t) \mid \Phi\,\rangle_\alpha \qquad \Longleftrightarrow \end{aligned} \tag{A.14}$$

$$\lim_{t\to\infty} \Big\| \mid \Phi \,\rangle_\alpha^{(\pm)} - \exp(iHt)\,\exp(-iH_\alpha t) \mid \Phi\,\rangle_\alpha \Big\| = 0. \tag{A.15}$$

[19]Hier ist zu beachten, daß die $\mid n, \vec{q}\,\rangle_\alpha^{(\pm)}$ ebenso wie die $\mid n, \vec{q}\,\rangle_\alpha$ nicht normierbar sind; demzufolge muß bei Konvergenzbetrachtungen in diesem Zusammenhang die Normierbarkeit der betrachteten Zustände stets vorausgesetzt werden.

Daraus ergibt sich sofort die Existenz des adjungierten Operators $\Omega_\alpha^{(\pm)\dagger}$ auf dem Abschluß von $\Omega_\alpha^{(\pm)}(\mathcal{H}_\alpha)$:

$$\lim_{t\to\infty} \left\| \exp(-iH_\alpha t)\, \exp(iHt) \mid \Phi\, \rangle_\alpha^{(\pm)} - \mid \Phi\, \rangle_\alpha \right\| = 0. \tag{A.16}$$

Die Orthogonalitsrelation ${}^{(\pm)}_{\beta}\langle\, \vec{q}\,', m \mid n, \vec{q}\, \rangle_\alpha^{(\pm)} = \delta_{\beta\alpha}\, \delta_{mn}\, \delta(\vec{q}_\beta\,' - \vec{q}_\beta)$ läßt sich sehr einfach beweisen. Es ist

$$\begin{aligned}
&{}^{(\pm)}_{\beta}\langle\, \vec{q}\,', m \mid n, \vec{q}\,\rangle_\alpha^{(\pm)} \\
&= \lim_{t\to\mp\infty} \langle\, \vec{q}\,', m \mid \exp(iH_\beta\, t)\, \exp(-iHt) \mid n, \vec{q}\,\rangle_\alpha^{(\pm)} \\
&= \lim_{t\to\mp\infty}\, \lim_{\epsilon\to 0+} \exp\left(i\,(\, E_{\beta m} - E_{\alpha n})\, t\right)\, (\pm i\epsilon) \\
&\quad {}_\beta\langle\, \vec{q}\,', m \mid G(E_{\alpha n} \pm i\epsilon) \mid n, \vec{q}\,\rangle_\alpha .
\end{aligned} \tag{A.17}$$

Mit Hilfe der Beziehung $G(z) = G_\alpha(z)\, \delta_{\alpha\beta} + G_\alpha(z) U_{\alpha\beta}(z) G_\beta(z)$ ergibt sich sofort für die Darstellung der vollständige Dreiteilchen-Greenfunktion in der Kanalzustandsbasis:

$$\begin{aligned}
&\langle\, \vec{q}\,', m \mid G(z) \mid n, \vec{q}\,\rangle \\
&= \delta_{\beta\alpha}\, \delta_{mn}\, \delta(\, \vec{q}\,' - \vec{q}\,) \frac{1}{z - E_{\alpha n}} \\
&+ \frac{1}{z - E_{\beta m}} \langle\, \vec{q}\,', m \mid U_{\beta\alpha}(z) \mid n, \vec{(q)}\,\rangle \frac{1}{z - E_{\alpha n,}}
\end{aligned} \tag{A.18}$$

also für z=E$_{\alpha n}$$\pm$i$\epsilon$

$$\begin{aligned}
&{}^{(\pm)}_{\beta}\langle\, \vec{q}\,', m \mid n, \vec{q}\,\rangle_\alpha^{(\pm)} \\
&= \lim_{t\to\mp\infty}\, \lim_{\epsilon\to 0+} (\pm\, i\epsilon) \\
&\left(\frac{\mp i}{\epsilon}\, \delta_{\beta\alpha}\delta_{mn}\, \delta(\vec{q}\,' - \vec{q}) + \frac{\exp\left(i\,(\, E_{\beta m} - E_{\alpha n})\, t\right)}{E_{\beta m} - E_{\alpha n} \pm i\epsilon} \langle\, \vec{q}\,', m \mid U_{\beta,\alpha} \mid n, \vec{q}\,\rangle . \right)
\end{aligned} \tag{A.19}$$

Damit und wegen der Relationen

$$\lim_{t\to\pm\infty} \frac{\exp(ixt)}{x - i\epsilon} = \left\{ \begin{array}{c} 2\pi\delta(x) \\ 0 \end{array} \right\} \qquad \lim_{t\to\mp\infty} \frac{\exp(ixt)}{x + i\epsilon} = \left\{ \begin{array}{c} -2\pi\delta(x) \\ 0 \end{array} \right\} \tag{A.20}$$

erhält man sofort das gewünschte Ergebnis

$${}^{(\pm)}_{\beta}\langle\, \vec{q}\,', m \mid n, \vec{q}\,\rangle_\alpha^{(\pm)} = \delta_{\beta\alpha}\, \delta_{mn}\, \delta(\, \vec{q}\,' - \vec{q}\,). \tag{A.21}$$

A.2.3 Das Grenzwert-Theorem von Abel

Der Abelsche Limitierungsprozeß behandelt Limites von Funktionen, die von einem Parameter abhängen. Sei etwa $|\Psi\rangle_t \in \mathcal{H}_\alpha$ ein Kanalzustand mit

$$|| \, |\Psi\rangle_t || = C \quad \text{für } alle \ t. \tag{A.22}$$

Wenn die Grenzwerte $|\Psi\rangle_{\pm\infty} = \lim_{t\to\pm\infty} |\Psi\rangle_t$ existieren, so existieren auch die Abelschen Grezwerte

$$\lim_{\epsilon\to 0+} \epsilon \int\limits_{-\infty}^{0} dt \exp(\epsilon t) \; |\Psi\rangle_t \qquad und \qquad \lim_{\epsilon\to 0+} \epsilon \int\limits_{0}^{\infty} dt \exp(-\epsilon t) \; |\Psi\rangle_t \tag{A.23}$$

und es gilt

$$|\Psi\rangle_{+\infty} = \lim_{\epsilon\to 0+} \epsilon \int\limits_{-\infty}^{0} dt \exp(\epsilon t) \; |\Psi\rangle_t \tag{A.24}$$

$$|\Psi\rangle_{-\infty} = \lim_{\epsilon\to 0+} \epsilon \int\limits_{0}^{\infty} dt \exp(-\epsilon t) \; |\Psi\rangle_t \tag{A.25}$$

A.3 Die AGS-Operatorintegralgleichungen

Zur Herleitung einer Integralgleichung für die $U_{\beta\alpha}$ geht man von der Resolventengleichung $G = G_\beta + G_\beta \bar{V}_\beta G$ aus. Ausnutzen von $\bar{V}_\beta = \sum_{\gamma\neq\beta} V_\gamma$ und Einsetzen der Darstellung von G mittels der Übergangsoperatoren $U_{\beta,\alpha}$

$$G = G_\beta \, \delta_{\beta\alpha} + G_\beta \, U_{\beta\alpha} \, G_\alpha \tag{A.26}$$

auf der rechten Seite sowie Verwendung von Gleichung (A.8) liefern einerseits

$$\begin{aligned} G &= G_\beta + G_\beta \sum_{\gamma=1}^{3} \bar{\delta}_{\beta\gamma} \, V_\gamma \, (G_\gamma \, \delta_{\gamma\alpha} + G_\gamma \, U_{\gamma\alpha} \, G_\alpha) \\ &= G_\beta + G_\beta \sum_{\gamma=1}^{3} \bar{\delta}_{\beta\gamma} \, \delta_{\gamma\alpha} \, V_\gamma \, G_\gamma + G_\beta \sum_{\gamma=1}^{3} \bar{\delta}_{\beta\gamma} T_\gamma \, G_0 U_{\gamma\alpha} \, G_\alpha . \end{aligned} \tag{A.27}$$

Andererseits ist

$$G = G_\beta \, \delta_{\beta\alpha} + G_\beta \, U_{\beta\alpha} \, G_\alpha . \tag{A.28}$$

Gleichsetzen und Umordnen ergibt Gleichung (2.39)

$$U_{\beta\alpha}(z) = \bar{\delta}_{\beta\alpha} \, G_0^{-1}(z) + \sum_{\gamma=1}^{3} \bar{\delta}_{\beta\gamma} \, T_\gamma(z) \, G_0(z) \, U_{\gamma\alpha}(z). \tag{A.29}$$

Ist andererseits die Resolventenbeziehung $G = G_\beta + G\,\bar{V}_\beta\,G_\beta$ der Ausgangspunkt, so erhält man auf die gleiche Weise

$$U_{\beta\alpha}(z) = \bar{\delta}_{\beta\alpha}\,G_0^{-1}(z) + \sum_{\gamma=1}^{3} U_{\beta\gamma}(z)\,G_0(z)\,T_\gamma(z)\,\bar{\delta}_{\gamma\alpha}. \tag{A.30}$$

Daraus folgt insbesondere, daß der zu $U_{\beta\alpha}(z)$ adjungierte Übergangsoperator durch

$$(U_{\beta\alpha}(z))^\dagger = U_{\alpha\beta}(z^*) \tag{A.31}$$

gegeben ist, denn $(G_0(z))^\dagger = G_0(z^*)$, $(T_\gamma(z))^\dagger = T_\gamma(z^*)$ und beide Übergangsoperatoren erfüllen dieselbe Integralgleichung.

A.4 Drehimpulsentwicklung der Kanalzustände

Wegen der Darstellung des Subsystem-Bindungszustands $|\,n\,\rangle_\gamma$ in der nach Partialwellen zerlegten Drehimpulsbasis (2.87)

$$|\,n\,\rangle_\gamma = \sum_{L,c_2,M_J,M_T} \int dp\,p^2\;|\,p,L,c_2,M_J,M_T\,\rangle_\gamma\;\;{}_\gamma\langle\,M_T,M_J,c_2,L,p\,|\,n\,\rangle_\gamma. \tag{A.32}$$

ergibt sich sofort, daß jeder Bindungszustand als Eigenzustand von T^2, T_3, J^2, J_3 und S^2 in der Form

$$|\,n,c_2,M_J,M_T\,\rangle_\gamma = \sum_L \int dp\,p^2\;|\,p,L,c_2,M_J,M_T\,\rangle_\gamma\;\;{}_\gamma\langle\,M_T,M_J,c_2,L,p\,|\,n\,\rangle_\gamma \tag{A.33}$$

geschrieben werden kann. Mit Hilfe der Beziehung (2.80)

$$|\,\vec{p}\,\rangle = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m_\ell=-\ell}^{+\ell} |\,p,\ell\,\rangle\;|\,\ell m_\ell\rangle\,\langle\,m_\ell,\ell\,|\,\hat{p}\rangle \quad mit \quad p = |\,\vec{p}\,| \quad und \quad \hat{p} = \frac{\vec{p}}{p} \tag{A.34}$$

erhält man für einen Kanalzustand $|\,n,c_2,M_J,M_T\;\vec{q},\;s\,m_s,t\,m_t\rangle_\gamma$ sofort

$$\begin{aligned}|\,n,c_2,M_J,M_T\;\vec{q},\;s\,m_s,t\,m_t\rangle_\gamma &= |\,n,L,c_2,M_J,M_T\,\rangle \\ &\sum_{\ell,m_\ell} |\,q,\ell\,\rangle_\gamma\;|\,\ell m_\ell\rangle_\gamma\,\langle\,m_\ell\ell\,|\,\hat{q}\,\rangle\;|\,sm_s\rangle\;|\,tm_t\rangle_\gamma\end{aligned} \tag{A.35}$$

Koppelt man wie in Abschnitt (2.4.1) beschrieben erst Subsystem-Gesamtdrehimpuls und Spin des dritten Teilchens zum Kanalspin und dann diesen mit dessen Bahndrehimpuls ℓ zum Dreiteilchen-Gesamtdrehimpuls Γ, so erhält man

$$\begin{aligned}|\,n,\;\vec{q},\;s\,m_s,t\,m_t\rangle_\gamma = &\sum_{\Gamma,M_\Gamma,k,\ell} |\,n,q,c_3,k,\ell,\Gamma M\Gamma,M_T\,\rangle_\gamma \\ &\sum_{m_k,m_l} \langle\,m_\ell\ell,m_k k\,|\,\Gamma\,M_\Gamma,k,\ell\,\rangle\,\langle\,m_s s,M_J J\,|\,km_k,J,s\,\rangle\;|\,tm_t\rangle_\gamma\,\langle\,m_l\,l\,|\,\hat{q}\,\rangle.\end{aligned} \tag{A.36}$$

Geht man schließlich zum Dreiteilchen-Gesamtisospin über, so folgt letztlich

$$
\begin{aligned}
|\, n,\ \vec{q},\, s\, m_s, t\, m_t \rangle_\gamma = & \sum_{\Gamma, M_\Gamma, k, \ell, I, M_I} |\, n, q, c_2, k, \ell, \Gamma M \Gamma, I M_I \rangle_\gamma \\
& \sum_{m_k, m_\ell} \langle\, m_\ell \ell, m_k k \,|\, \Gamma\, M_\Gamma, k, \ell \,\rangle \langle\, m_s s, M_J J \,|\, k m_k, J, s \,\rangle \\
& \langle\, m_t t, M_T T \,|\, I M_I, T, t \,\rangle \langle\, m_\ell \ell \,|\, \hat{q} \,\rangle
\end{aligned} \tag{A.37}
$$

A.5 Der Umkopplungskoeffizient

Umkopplungskoeffizienten sind die Entwicklungskoeffizienten, die sich ergeben, wenn ein freier Dreinukleonen-Zustand einer bestimmten Clusterung α in einer Basis freier Dreinukleonen-Zustände mit einer anderen Clusterung β entwickelt wird; für drehimpulszerlegte Zustände muß demnach das Matrixelement

$$
{}_\beta\langle\, M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3', L', q', p' \,|\, p', q', L', c_3', \Gamma M_\Gamma, I M_I \,\rangle_\alpha \tag{A.38}
$$

bestimmt werden. Dessen Berechnung ist kompliziert, äußerst länglich und findet sich auch in der Literatur [9], weswegen hier nur das Ergebnis angegeben werden soll. Es lautet:

$$
\begin{aligned}
& {}_\beta\langle\, M_I I, M_\Gamma \Gamma, c_3', L', q', p' \,|\, p, q, L, c_3, \Gamma M_\Gamma, I M_I \,\rangle_\alpha = \\
& \quad q'^{L'+L} \sum_{\ell}^{\ell max} \sum_{h=0}^{L'+L} \left(\frac{q}{q'}\right)^h U_{\Gamma I}^{c_3' c_3}(\ell, h)\, \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} dx\, P_\ell(x)\, \frac{\delta(p' - p_\beta(x))\, \delta(p - p'_\alpha(x))}{p'^2\, p^2\, p_\beta^{L'}(x) p_\alpha'^{L}(x)},
\end{aligned} \tag{A.39}
$$

wobei

$$
p_\beta(x) = \sqrt{q^2 + \frac{1}{4} q'^2 + q q' x} \qquad p'_\alpha(x) = \sqrt{q'^2 + \frac{1}{4} q^2 + q q' x}, \tag{A.40}
$$

$2\,\ell_{max} = L' + l' + L + l$ und $P_\ell(x)$ ein Legendre-Polynom ℓ-ter Ordnung ist. Die Funktion

$$
U_{\Gamma I}^{c_3' c_3}(\ell, h) = F_\Gamma^{c_3' c_3}(\ell, h) + T_I^{c_2' c_2} \tag{A.41}
$$

beschreibt den Spinanteil $F_\Gamma^{c_3' c_3}(\ell, h)$ und Isospinanteil $G_I^{c_2' c_2}$. Im Detail: Für den Gesamtisospin $I = \frac{1}{2}$ ist mit $\hat{T} = 2T + 1$ (gestrichene Größen gehören immer zum Cluster β, nicht gestrichene Größen zum Cluster α)

$$
G_I^{c_2' c_2} = (-1)^T \sqrt{\hat{T}' \hat{T}} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T' \\ & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T \end{pmatrix}. \tag{A.42}
$$

$F_\Gamma^{c_3'c_3}(\ell,h)$ ist komplizierter. Mit $h = L' + f - f'$ und $\bar{f} = f' + f$ gilt

$$F_\Gamma^{c_3'c_3}(\ell,h) = \frac{1}{2} \sum_{\bar{f}=|L'-h|}^{L'+L-|L-h|} \left(1 + (-1)^{L'+\bar{f}-h}\right) \delta_{f',\frac{1}{2}\left(L'+\bar{f}-h\right)} \, \delta_{f,\frac{1}{2}\left(\bar{f}+h-L'\right)} \, E_\Gamma^{c_2'c_2}(\ell,f',f) \tag{A.43}$$

$E_\Gamma^{c_2'c_2}(\ell,f',f)$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned} E_\Gamma^{c_2'c_2}(f',f) = (-1)^{L+l'+l} \, \hat{L}'^2 \, \hat{L}^2 \, l' \, l \left(\frac{1}{2}\right)^{f'+f} \sqrt{\begin{pmatrix} 2L' \\ 2f' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2L \\ 2f \end{pmatrix}} \\ \sum_{h',h} \hat{h}'^2 \, \hat{h}^2 \begin{pmatrix} l' & f' & h' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h' & D & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & f & h \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h & D' & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \sum_{\bar{L}} \hat{\bar{L}}^2 \begin{pmatrix} D' & f' & L' \\ l' & \bar{L} & h' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D & f & L \\ l & \bar{L} & h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D' & \ell & h \\ D & \bar{L} & h' \end{pmatrix} C_\Gamma^{c_3'c_3}(\bar{L}), \end{aligned} \tag{A.44}$$

dabei ist

$$\begin{aligned} C_\Gamma^{c_3'c_3}(\bar{L}) = \hat{J}' \, \hat{J} \, \hat{K}' \, \hat{K} \, \hat{S}' \, \hat{S} \, (-1)^{S'+2\Gamma+1} \sum_{\bar{S}} \hat{S}^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S' \\ \\ \frac{1}{2} & \bar{S} & \bar{S} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} L' & S' & J' \\ \\ \frac{1}{2} & K' & \bar{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{S} & L' & K' \\ \\ l' & \Gamma & \bar{L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L' & S' & J' \\ \\ \frac{1}{2} & K' & \bar{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{S} & L & K \\ \\ l & \Gamma & \bar{L} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{A.45}$$

Die Summationsgrenzen von $\bar{L}$ und $\bar{S}$ ergeben sich hier aus den Regeln der Drehimpulskopplung, wenn nämlich sowohl $S's'$ und Ss zu $\bar{S}$ als auch $L'l'$ und Ll zu $\bar{L}$ zusammengekoppelt werden.

A.6 Das Residuum des W-Matrix-Propagators $\widetilde{\Delta}^{c_2}_{L',L}(E{+}i0)$

Ausgangspunkt des Beweises, daß das Residuum des normierten Propagators genau 1 ist, ist die Darstellung der vollen Zweiteilchen-Off-Shell-$\hat{T}$-Matrix im W-Matrix-Formalismus (4.47), nämlich

$$\begin{aligned} \hat{T}^{c_2}_{L',L}(\hat{E}+i0;p',p) = \\ p^{L'} \Bigg[\sum_{\hat{L},\hat{L}'} W^{c_2}_{k;L',\hat{L}'}(\hat{E};p',k) \, \Delta^{c_2}_{\hat{L}',\hat{L}}(\hat{E}+i0) \, {}^{\dagger}W^{c_2}_{k;\hat{L},L}(\hat{E};k,p) + \Big(W^{c_2}_{k;L',L}(\hat{E};p',p) \\ - \sum_{\hat{L},\hat{L}'} W^{c_2}_{k;L',\hat{L}'}(\hat{E};p',k) \, (W^{c_2})^{-1}_{k;\hat{L}',\hat{L}}(\hat{E};k,k) \, W^{c_2}_{k;\hat{L},L}(\hat{E};k,p) \Big) \Bigg] p^{L} \\ = {}^{sep}\hat{T}^{c_2}_{L',L}(\hat{E}+i0;p',p,k) + \hat{R}^{c_2}_{L',L}(\hat{E};p',p,k). \end{aligned}$$

Da der Restterm singularitätenfrei ist, muß das Residuum der exakten $\hat{T}$-Matrix identisch mit dem der separablen Approximation ${}^{sep}\hat{T}$ sein, es genügt also, diese zu betrachten. Gemäß [25] ist das Residuum der $\hat{T}$-Matrix gegeben durch

$$res(\hat{T}) = \frac{\hat{V} \mid \Psi \rangle \langle \Psi \mid \hat{V}}{\langle \Psi \mid \Psi \rangle}, \tag{A.46}$$

so daß die $\hat{T}$-Matrix in der Umgebung des Poles an der Deuteron-Bindungsenergie $\hat{E}_D$ die Form

$$\hat{T}(z) = \frac{\hat{V} \mid \Psi \rangle}{\sqrt{\langle \Psi \mid \Psi \rangle}} \frac{1}{z - \hat{E}_D} \frac{\langle \Psi \mid \hat{V}}{\sqrt{\langle \Psi \mid \Psi \rangle}}. \tag{A.47}$$

Hier ist $\mid \Psi \rangle$ der richtig normierte Bindungszustand, d.h. für energieunabhängige Potentiale

$$\langle \Psi \mid \Psi \rangle = 1 \tag{A.48}$$

und für energieabhängige muß die Normierung

$$\langle \Psi \mid \left[1 - \frac{d\hat{V}}{dz}(z)_{|_{\hat{E}_D}} \right] \mid \Psi \rangle = 1 \tag{A.49}$$

lauten, damit der $\hat{T}$-Operator im energieghängigen und energieunabhängigen Fall stets dasselbe Residuum hat. Dann ergibt sich in der LSJ-T-Basis

$$\begin{aligned} &\langle M_T', M_J', c_{c_2}^D, L', p' \mid \hat{T}(z) \mid p, L, c_2^D, M_J, M_T \rangle = \\ &\langle M_T', M_J', c_{c_2}^D, L', p' \mid \hat{V}(z) \mid \Psi \rangle \frac{1}{z - \hat{E}_D} \langle \Psi \mid \hat{V} \mid p, L, c_2^D, M_J, M_T \rangle \end{aligned} \tag{A.50}$$

und man erhält durch Einschieben zweier Einsen (2.85)

$$\begin{aligned} &\hat{T}^{c_2}_{L',L}(z; p', p)\, \delta_{M_T',M_T}\, \delta_{M_J',M_J} = \\ &\quad \sum_{\tilde{L}'} \int dq'\, q'^2\, \hat{V}^{c_2^D}_{L',\tilde{L}'}(z; p', q') \langle M_T', M_J', c_2^D, \tilde{L}', q' \mid \Psi \rangle \\ &\quad \frac{1}{z - \hat{E}_D} \sum_{\tilde{L}} \int dq\, q^2 \langle \Psi \mid q, \tilde{L}, c_2^D, M_J, M_T \rangle \hat{V}^{c_2^D}_{\tilde{L},L}(z; q, p) \end{aligned} \tag{A.51}$$

folgenden Ausdruck für das Residuum

$$res(\hat{T})(\hat{E}_D; p', p) = A_{L'}(\hat{E}_D; p') \quad B_L(\hat{E}_D; p) \tag{A.52}$$

mit

$$A_{L'}(\hat{E}_D; p') = \sum_{\tilde{L}} \int dq\, q^2\, \hat{V}^{c_2^D}_{L',\tilde{L}}(\hat{E}_D; p', q) \sum_{\tilde{L}'} q^{\tilde{L}} \frac{\widetilde{W}^{c_2^D}_{k;\tilde{L},\tilde{L}'}(\hat{E}_D, q, k)}{\hat{E}_D + i0 - h_0(q)} \tag{A.53}$$

$$B_L\,(\hat{E}_D;p) = \sum_{\tilde{L}} \int dq\, q^2 \sum_{\tilde{L}\,'} q^{\tilde{L}} \frac{\widetilde{W}^{c_2^D}_{k;\tilde{L},\tilde{L}\,'}(\hat{E}_D,q,k)}{\hat{E}_D + i0 - h_0(q)} \hat{V}^{c_2^D}_{\tilde{L},L}(\hat{E}_D;q,p) \tag{A.54}$$

Hier ist wieder (4.27)

$$h_0(q) = \begin{cases} \frac{q^2}{m} & \text{für nicht-relativistische Zweinukleonen-Dynamik,} \\ & \hat{E}_D = \hat{E}^{c_2^D} \\ & \\ 2\sqrt{m^2+q^2} & \text{für relativistische Zweinukleonen-Dynamik.} \\ & \hat{E}_D = 2m + \hat{E}^{c_2^D} \end{cases} \tag{A.55}$$

und $E^{c_2^C}$ die nicht-relativistische Deuteron-Bindungsenergie. Jeder der letzten beiden Ausdrücke sollen im folgenden mittels im wesentlichen der W-Matrix-Gleichung und der verallgemeinerten Jost-Funktion in eine einfachere Form gebracht werden. Offenbar ist wegen (4.34)

$$\begin{aligned} A_{L\,'}\,(\hat{E}_D;p') &= p'^{L\,'} \sum_{\tilde{L},\tilde{L}\,'} \int dq\, q^2\; \hat{U}^{c_2^D}_{L\,',\tilde{L}}(\hat{E}_D;p',q)\, q^{2\tilde{L}} \frac{\widetilde{W}^{c_2^D}_{k;\tilde{L},\tilde{L}\,'}(\hat{E}_D,q,k)}{\hat{E}_D + i0 - h_0(q)} \\ &= p'^{L\,'} \sum_{\tilde{L},\tilde{L}\,'} \int dq\, q^2\; \frac{\hat{U}^{c_2^D}_{L\,',\tilde{L}}(\hat{E}_D;p',q) - \hat{U}^{c_2^D}_{L\,',\tilde{L}}(\hat{E}_D;p',k)}{\hat{E}_D + i0 - h_0(q)}\; q^{2\tilde{L}} \widetilde{W}^{c_2^D}_{k;\tilde{L},\tilde{L}\,'}(\hat{E}_D,q,k)\, C^{c_2^D}_{\tilde{L}\,'} \\ &+ p'^{L\,'} \sum_{\tilde{L},\tilde{L}\,'} \hat{U}^{c_2^D}_{L\,',\tilde{L}}(\hat{E}_D;p',k) \int dq\, q^2\, q^{2\tilde{L}} \widetilde{W}^{c_2^D}_{k;\tilde{L},\tilde{L}\,'}(\hat{E}_D,q,k)\, C^{c_2^D}_{\tilde{L}\,'} \end{aligned} \tag{A.56}$$

so daß sich unter Verwendung von (4.33) und (4.37)

$$\begin{aligned} A_{L\,'}\,(\hat{E}_D;p') &= p'^{L\,'} \sum_{\tilde{L}\,'} \Big(W^{c_2^D}_{k;L\,',\tilde{L}\,'}(\hat{E}_D,p',k) - \hat{U}^{c_2^D}_{L\,',\tilde{L}\,'}(\hat{E}_D,p',k) \\ &\quad + \sum_{\tilde{L}} \hat{U}^{c_2^D}_{L\,',\tilde{L}}(\hat{E}_D;p',k) \left[\delta_{\tilde{L},\tilde{L}\,'} - F^{c_2^D}_{\tilde{L},\tilde{L}\,'}(\hat{E}_D + i0)\right]\Big)\; C^{c_2^D}_{\tilde{L}\,'} \\ &= p'^{L\,'} \sum_{\tilde{L}\,'} \widetilde{W}^{c_2^D}_{k;L\,',\tilde{L}\,'}(\hat{E}_D,p',k)\, C^{c_2^D}_{\tilde{L}\,'}, \end{aligned} \tag{A.57}$$

ergibt, weil die $C^{c_2^D}_L$ Eigenvektoren der verallgemeinerten Jost-Matrix $F^{c_2^D}_{L\,',L}(\hat{E}_D + i0)$ zum Eigenwert 0 sind (4.40).

Andereseits ist wegen $\hat{V}^{c_2^D}_{\tilde{L},L}(\hat{E};q,p) = \hat{V}^{c_2^D}_{L,\tilde{L}}(\hat{E};p,q)$, eine Beziehung, die aus der Zeitumkehrinvarianz und der Selbstadjungiertheit von $\hat{V}$ folgt,

$$
\begin{aligned}
B_L(\hat{E}_D;p) &= \sum_{\tilde{L},\tilde{L}'} \int dq\, q^2\, q^{\tilde{L}}\, \frac{\hat{V}^{c_2^D}_{L,\tilde{L}}(\hat{E}_D;p,q)\widetilde{W}^{c_2^D}_{k;\tilde{L},\tilde{L}'}(\hat{E}_D,q,k)}{\hat{E}_D+i0-h_0(q)} \\
&= p^L \sum_{\tilde{L},\tilde{L}'} \int dq\, q^2\, q^{2\tilde{L}}\, \frac{\hat{U}^{c_2^D}_{L,\tilde{L}}(\hat{E}_D;p,q)\widetilde{W}^{c_2^D}_{k;\tilde{L},\tilde{L}'}(\hat{E}_D,q,k)}{\hat{E}_D+i0-h_0(q)} \\
&= p^L \sum_{\tilde{L},\tilde{L}'} \int dq\, q^2\, q^{2\tilde{L}}\, \frac{\hat{U}^{c_2^D}_{L,\tilde{L}}(\hat{E}_D;p,q)-\hat{U}^{c_2^D}_{L,\tilde{L}}(\hat{E}_D;p,k)}{\hat{E}_D+i0-h_0(q)}\widetilde{W}^{c_2^D}_{k;\tilde{L},\tilde{L}'}(\hat{E}_D,q,k)\, C^{c_2^D}_{\tilde{L}'} \\
&+p^L \sum_{\tilde{L},\tilde{L}'} \hat{U}^{c_2^D}_{L,\tilde{L}}(\hat{E}_D;p,k) \int dq\, q^2\, q^{2\tilde{L}}\, \frac{\widetilde{W}^{c_2^D}_{k;\tilde{L},\tilde{L}'}(\hat{E}_D,q,k)}{\hat{E}_D+i0-h_0(q)} C^{c_2^D}_{\tilde{L}'} \\
&= p^L \sum_{\tilde{L}'} \Bigg(\widetilde{W}^{c_2^D}_{k;L,\tilde{L}'}(\hat{E}_D,p,k) - \hat{U}^{c_2^D}_{L,\tilde{L}'}(\hat{E}_D,p,k) \\
&+ \sum_{\tilde{L}} \hat{U}^{c_2^D}_{L,\tilde{L}}(\hat{E}_D;p,k)\left[\delta_{\tilde{L},\tilde{L}'} - F^{c_2^D}_{\tilde{L},\tilde{L}'}(\hat{E}_D+i0)\right]\Bigg)\, C^{c_2^D}_{\tilde{L}'} \\
&= \sum_{\tilde{L}'} C^{c_2^D\,\dagger}_{\tilde{L}'} \widetilde{W}^{c_2^D}_{k;\tilde{L}',L}(\hat{E}_D,k,p)\, p^L.
\end{aligned}
\tag{A.58}
$$

Damit ergibt sich für das Residuum der vollen Off-Shell-$\hat{T}$-Matrix

$$
\begin{aligned}
&res(\hat{T})(\hat{E}_D;p',p) = \\
&\qquad \sum_{\tilde{L}'\tilde{L}} p'^{L'}\, \widetilde{W}^{c_2^D}_{k;L',\tilde{L}'}(\hat{E}_D,p',k)\, C^{c_2^D}_{\tilde{L}'} C^{c_2^D\,\dagger}_{\tilde{L}'} \widetilde{W}^{c_2^D}_{k;\tilde{L}',L}(\hat{E}_D,k,p)\, p^L
\end{aligned}
\tag{A.59}
$$

Ein Vergleich mit (4.47) zeigt, daß

$$
\widetilde{\Delta}^{c_2}_{L',L}(E+i0) = \frac{C^{c_2^D}_{L'} C^{c_2^D}_{L}}{z-\hat{E}_D},
\tag{A.60}
$$

folglich ist (4.59)

$$
res\left(\widetilde{\Delta}^{c_2^D}(E_D)\right) = 1.
\tag{A.61}
$$

A.7 Die W-Matrix-Gleichungen in „natürlichen“ Einheiten

Die W-Matrix-Gleichungen lauten nach Gleichung (4.33):

$$
\begin{aligned}
&W^{c_2}_{L',L}(\hat{E};p,k) = \hat{U}^{c_2}_{L',L}(\hat{E};p,k) + \\
&\qquad \sum_{L''} \int dq\, q^2\, \frac{\hat{U}^{c_2}_{L',L''}(\hat{E};p,q) - \hat{U}^{c_2}_{L',L''}(\hat{E};p,k)}{\hat{E}-h_0(q)}\, q^{2L''}\, W^{c_2}_{L'',L}(\hat{E};q,k),
\end{aligned}
\tag{A.62}
$$

hier sind die Impulse in den üblichen Einheiten [Masse·Geschwindigkeit] gewählt. Die Transformation auf sogenannte natürliche Einheiten -d.h. insbesondere Impulse in Einheiten von [Länge^{-1}]- läßt sich für ein nicht-relativistisches Potential, also $h_0(q) = \frac{q^2}{m}$ im CM-System, am einfachsten durchführen mittels der Substitution $q = \hbar\,\bar{q}$, $[\bar{q}]$ =Länge^{-1}, und unter Berücksichtigung von $U_{L',L}(p,q) = \frac{V_{L',L}(p,q)}{p^{L'}q^{L}}$, so daß

$$W^{c2}_{L',L}(\hat{E};\bar{p},\bar{k}) = \frac{\hat{U}^{c2}_{L',L}(\hat{E};\bar{p},\bar{k})}{\hbar^{L'+L}} + \sum_{L''}\int d\bar{q}\,\bar{q}^2\,\hbar\,m\,\hbar^{-L'}\frac{\hat{U}^{c2}_{L',L''}(\hat{E};\bar{p},\bar{q}) - \hat{U}^{c2}_{L',L''}(\hat{E};\bar{p},\bar{k})}{\frac{m}{\hbar^2}\hat{E} - \bar{q}^2}\,\bar{q}^{2L''}\,\hbar^{L''}W^{c2}_{L'',L}(\hat{E};\bar{q},\bar{k}), \tag{A.63}$$

woraus mit den Definitionen

$$\begin{aligned} \bar{W}_{L',L}(\bar{E};\bar{p}',\bar{k}) &= \hbar\,m\,\hbar^{L'}\,W_{L',L}(E;\bar{p}',\bar{k})\,\hbar^{L} \\ \bar{U}^{c2}_{L',L}(\bar{E};\bar{p},\bar{k}) &= \hbar\,m\,\hat{U}^{c2}_{L',L}(\hat{E};\bar{p},\bar{k}) \\ \bar{E} &= \frac{m}{\hbar^2}\,\hat{E} \end{aligned} \tag{A.64}$$

sofort

$$\bar{W}^{c2}_{L',L}(\bar{E};\bar{p},\bar{k}) = \bar{U}_{L',L}(\bar{E};\bar{p},\bar{k}) + \sum_{L''}\int d\bar{q}\,\bar{q}^2\,\frac{\bar{U}^{c2}_{L',L''}(\bar{E};\bar{p},\bar{q}) - \bar{U}^{c2}_{L',L''}(\bar{E};\bar{p},\bar{k})}{\bar{E} - \bar{q}^2}\,\bar{q}^{2L''}\,\bar{W}^{c2}_{L'',L}(\bar{E};\bar{q},\bar{k}), \tag{A.65}$$

folgt. Falls, wie im Falle der verschiedenen Bonn-Potentiale, im Impulsraum die Impulse stete in Einheiten von MeV gegeben sind, also $q = \hbar c\bar{q}$ ist, gilt mit den Definitionen

$$\begin{aligned} \bar{W}_{L',L}(\bar{E};\bar{p}',\bar{k}) &= \hbar c\,mc^2\,(\hbar c)^{L'}\,W_{L',L}(\hat{E};\bar{p}',\bar{k})\,(\hbar c)^{L} \\ \bar{U}^{c2}_{L',L}(\bar{E};\bar{p},\bar{k}) &= \hbar c\,mc^2\,\hat{U}^{c2}_{L',L}(\hat{E};\bar{p},\bar{k}) \\ \bar{E} &= \frac{mc^2}{\hbar^2 c^2}\,\hat{E} \end{aligned} \tag{A.66}$$

ganz analog

$$\bar{W}^{c2}_{L',L}(\hat{\bar{E}};\bar{p},\bar{k}) = \bar{U}^{c2}_{L',L}(\bar{E};\bar{p},\bar{k}) + \sum_{L''}\int d\bar{q}\,\bar{q}^2\,\frac{\bar{U}^{c2}_{L',L''}(\bar{E};\bar{p},\bar{q}) - \bar{U}^{c2}_{L',L''}(\bar{E};\bar{p},\bar{k})}{\bar{E} - \bar{q}^2}\,\bar{q}^{2L''}\,\bar{W}^{c2}_{L'',L}(\bar{E};\bar{q},\bar{k}). \tag{A.67}$$

Die Berechnung der W-Matrix füe eine relativistische Greenfunktion ergibt sich nach dem gleichen Muster, allerdings vereinfachen sich hier die Matrixelemente des Green-Operators nicht, sondern alles wird deutlich unübersichtlicher. Da die Energien wieder die Dimension $[E] = Länge^{-2}$ haben sollen, erhält man offenbar nach Erweiterung des Kerns mit $\frac{m}{\hbar^2}$ mit denselben Definitionen wie in (A.66)

$$\bar{W}^{c2}_{L',L}(\hat{\bar{E}}; p, k) = \bar{U}^{c2}_{L',L}(\bar{E}; \bar{p}, \bar{k}) + \\ \sum_{L''} \int dq\, q^2 \frac{\bar{U}^{c2}_{L',L''}(\bar{E}; \bar{p}, \bar{q}) - \bar{U}^{c2}_{L',L''}(\bar{E}; \bar{p}, \bar{k})}{\bar{E} - 2\sqrt{\frac{m^2c^4}{\hbar^4} + \frac{m^2c^2\bar{q}^2}{\hbar^2}}} q^{L''} \bar{W}^{c2}_{L'',L}(\bar{E}; \bar{q}, \bar{k}). \tag{A.68}$$

Es sei betont, daß in der vorliegenden gesamten Arbeit aus Notationsgründen alle in natürlichen Einheiten berechneten W-Matrizen mit $W_{L',L}(E; p', p)$ bezeichnet werden, also ohne den in diesem Abschnitt eingeführten Querstrich.

A.8 Berechnung eines Cauchy-Hauptwertintegrals mittels des Subtraktionsverfahrens

$$\begin{aligned} P\int_{-1}^{1} dx\, \frac{f(x)}{y-x} &= \int_{-1}^{1} dx\, \frac{f(x)-f(y)}{y-x} + f(y)\, P\int_{-1}^{1} dx\, \frac{1}{y-x} \\ &= \int_{-1}^{1} dx\, \frac{f(x)-f(y)}{y-x} + f(y) \int_{-1}^{y-\epsilon} \frac{dx}{y-x} + f(y) \int_{y+\epsilon}^{1} \frac{dx}{y-x} \\ &= \int_{-1}^{1} dx\, \frac{f(x)-f(y)}{y-x} + f(y) \int_{\epsilon}^{y+1} \frac{dz}{z} + f(y) \int_{y-1}^{\epsilon} \frac{dz}{z} \\ &= \int_{-1}^{1} dx\, \frac{f(x)-f(y)}{y-x} + f(y) \log\frac{1+y}{1-y} \end{aligned} \tag{A.69}$$

denn

$$\begin{aligned} &\left| \int_{y-\epsilon}^{y+\epsilon} dx\, \frac{f(x)-f(y)}{y-x} \right| \\ &\leq \quad \int_{\epsilon}^{-\epsilon} dz\, \frac{|f(y-z)-f(y)|}{|z|} \\ &\leq \quad \int_{\epsilon}^{-\epsilon} dz\, |f'(y) + k(y)(z-y)| \\ &\leq \quad k(y)\epsilon, \end{aligned} \tag{A.70}$$

falls f differenzierbar.

A.9 Konstruktion einer Basis des Raums aller hermiteschen 3×3-Matrizen, in der die dreidimensionale Darstellung der Generatoren der SU(2) enthalten ist

Die vier hermiteschen 3x3-Matrizen

$$
\begin{aligned}
S_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & S_y &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \\
S_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \mathbf{1}_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{A.71}
$$

sollen zu einer Basis des Raums aller hermiteschen 3x3-Matrizen erweitert werden; in Analogie zu den hermiteschen 2x2-Matrizen sollen die Basismatrizen, mit Ausnahme der $\mathbf{1}_3$, spurlos sein. Um sich geeignete Matrizen zu konstruieren, wird das äußere Produkt

$$
\begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix} \otimes (S_x \; S_y \; S_z) = \begin{pmatrix} S_xS_x & S_xS_y & S_xS_z \\ S_yS_x & S_yS_y & S_yS_z \\ S_zS_x & S_zS_y & S_zS_z \end{pmatrix} \tag{A.72}
$$

gebildet. Diese Größen haben zumindest schon ein wohl-definiertes Verhalten gegenüber Rotationen. Zerlegt man die S_iS_j in symmetrische und antisymmetrische Anteile gemäß

$$
S_iS_j = \frac{1}{2}\left(S_iS_j + S_jS_i\right) + \frac{1}{2}\left(S_iS_j - S_jS_i\right), \tag{A.73}
$$

vernachlässigt die antisymmetrischen Anteile, weil diese wegen der bekannten Drehimpuls-Kommutator-Relation

$$
S_iS_j - S_jS_i = i\epsilon_{ijk}\, S_k \tag{A.74}
$$

nichts Neues liefern, und macht diese symmetrischen Anteile spurlos, so erhält man folgende sechs Matrizen

$$
\begin{aligned}
&\frac{3}{2}\left(S_xS_y + S_yS_x\right) \\
&\frac{3}{2}\left(S_yS_z + S_zS_y\right) \\
&\frac{3}{2}\left(S_zS_x + S_xS_z\right) \\
&3\, S_xS_x - 2\,\mathbf{1}_3 \\
&3\, S_yS_y - 2\,\mathbf{1}_3 \\
&3\, S_zS_z - 2\,\mathbf{1}_3.
\end{aligned} \tag{A.75}
$$

Es läßt sich ganz elementar zeigen, daß diese sechs Matrizen, zuammen mit den S_x, S_y, S_z und $\mathbf{1}_3$ den Vektorraum aller hermiteschen 3x3-Matrizen aufspannen und das folgende lineare Abhängigkeit

$$3\, S_x S_x - 2\, \mathbf{1}_3 + 3\, S_y S_y - 2\, \mathbf{1}_3 + 3\, S_z S_z - 2\, \mathbf{1}_3 = 0 \tag{A.76}$$

existiert.

Verzeichnis der Abbildungen

Verzeichnis der Tabellen

Literaturverzeichnis

[1] O.A. Yakubovsky: Sov. J. Nucl. Phys . **5**, 937 (1967).

[2] P. Grassberger, and W. Sandhas: Nucl. Phys. **B2**, 181 (1967).

[3] P. Grassberger, and W. Sandhas: In *Few Particle Problems in the Nuclear Interaction*, ed. by I. Slaus, S.A. Moszkowski, R.P. Haddock, and W.T.H. van Oers (North-Holland, Amsterdam 1972) p299**5**.

[4] W. Sandhas: In *Progress in Particle Physics*, ed. by P.Urban, Acta Physica Austriaca, Suppl. **13**, 679 (1974).

[5] S. Weinberg: Phys.Rev. **130**, 776 (1963), Phys. Rev. **131**, 440 (1963.)

[6] E.O. Alt, P. Grassberger, and W. Sandhas: Nucl. Phys. **B2**, 167 (1967).

[7] W. Sandhas: Acta Physica Austriaca, Suppl. **IX**, 57 (1972).

[8] L.D. Faddeev: *Mathematical Aspects of the Three-Body Problem in the Quantum Scattering Theory*, Publications of the Steklov Mathematical Institute, Vol.69 (Leningrad 1963) (English transl.: Israel Program for Scientific Translation, Jerusalem, 1965).

[9] W. Glöckle: *The Quantum Mechanical Few-Body Problem*, Springer Verlag, Berlin (1983).

[10] E.W. Schmid, and H. Ziegelmann: *The Quantum Mechanical Three-Body Problem*, Pergamon Press, Oxford (1974).

[11] B.H. Bransden: *Atomic Collision Theory*, The Benjamin/Cummings Publishing Company Inc., Reading, Massachusetts (1983).

[12] M. Lacombe, B. Loiseau, J.M. Richard, R. Vinh Mau, J. Côte′, P. Piràe, and R. de Toureil: Phys. Rev. **C 21**, 861 (1980).

[13] W.N. Cottingham et al.: Phys. Rev. **D 8**, 800 (1973).

[14] R. Machleidt: Adv. Nucl. Phys. **19**, 189 (1989).

[15] K. Erkelenz: Phys. Rep. **13 C**, No. 5 (1974).

[16] H. Witala, W. Glöckle, and H. Kamada: Phys. Rev. **C 43**, 1619 (1991).

[17] R. Machleidt, K. Holinde, and Ch. Elster: Phys. Rep. **149**, No. 1, 1 (1987).

[18] Ch. Elster: Ph.D. Thesis, TK 86 06, Institit für theoretische Kernphysik, Universität Bonn (1986)

[19] R.A. Brandenburg, G.S. Chulik, R. Machleidt, A. Pickelsimer, and R.M. Thaler: Phys. Rev. **C 38**, 1397 (1988).

[20] H. Witala, and W. Glöckle: Nucl.Phys. **A528**, 48 (1991).

[21] E.A. Bartnik, H. Haberzettl, and W. Sandhas: Phys. Rev. **C 34**, 1520 (1986).

[22] D.J. Ernst, C.M. Shakin, and R.M. Thaler: Phys. Rev. **C8**, 46 (1973).

[23] J. Kupsch, and W. Sandhas: Commun. math. Phys. **2**, 147 (1966)

[24] J.R. Taylor: *Scattering Theory*, Wiley , New York(1972)

[25] C.B. Kuhl: Diploma-Thesis, BONN-IR-90.08, Universität Bonn (1990).

[26] A. Casel, H. Haberzettl, and W. Sandhas: Phys. Rev. bf C 25, 1738, (1982).

[27] Th. Januschke: Ph.D. Thesis, BONN-IR-90-52, Universität Bonn (1990).

[28] T.N. Frank: Ph.D. Thesis, BONN-IR-92-06, Universität Bonn (1990).

[29] H.H. Barschall and W. Haeberli: Proc. 3rd Int. Symp. on Polarisation Phaenomena in Nuclear Reactions, University of Wisconsin Press, Madison (1971).

[30] G.G. Ohlsen: Rep. Prog. Phys. **35**, 717 (1972).

[31] U. Neugebauer: Diploma Thesis, TK 87 17, Institut für Theoretische Kernphysik, Universität Bonn (1987).

[32] L.J.B. Goldfarb: Nucl. Phys. **7**, 622 (1958)

[33] A. Messiah: *Quantum Mechanics*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam (1962).

[34] A.R. Edmonds: *Drehimpulse in der Quantenmechanik*, BI, Mannheim(1964).

[35] H. Goldstein: *Klassische Mechanik*, Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt am Main (1963).

[36] W. Schadow: priv. comm.

[37] F. Everling et al.: Nuclear Data Tables, Part 1 (1960).

[38] J. Haidenbauer: priv. comm.

[39] F. Sperisen, W. Grüebler, V. König, P. A. Schmelzbach, K. Elsener, B. Jenny, C. Schweizer, and J. Ulbricht: Nucl. Phys. **A422**, 81 (1984).

[40] W.Grüebler: priv. comm.

[41] P. Schwarz et al.: Nucl. Phys **A398**, 1 (1983).

[42] Th. Januschke, T.N. Frank, W. Sandhas and H. Haberzettl: Phys. Rev. C**47**, No. 4, 47 (1993)

[43] W. Tornow et al.: Phys. Lett. **B257**, No. 3,4, 273 (1991).

[44] M. Clajus et al.: Nucl. Phys. **A508**, 261c (1990).

[45] M. Clajus et. al.: Phys. Lett. B, **245, No. 3, 4**, 333 (1990)

[46] W. Grüebler et al.: Nucl. Phys **A398**,445 (1983).

[47] H. Witala and W. Glöckle: Nucl. Phys. **A528**, 48 (1991)

[48] R. Blankenblecler and R. Sugar: Phys. Rev. **142**, 1051 (1961)

[49] E.E. Salpeter and H.A. Bethe: Phys. Rev. **84**, 1232 (1951)

[50] R.M. Woloshyn and A.D. Jackdon: Nucl. Phys. **B64**, 269 (1973)

[51] Th. von Witsch, H. Witala and W. Glöckle: priv. comm.

[52] P.J. Dortmans and K. Amos: Phys. Rev. C **43**, 1050 (1991).

[53] G. Pisent, K. Amos and P.J. Dortmans: Phys. Rev. C **48**, 66 (1993).

[54] L. Canton, G. Pisent and G.H. Rawitscher: Phys. Rev. C **41**, 427 (1990).

[55] H. Haberzettl: Phys. Rev. C **40**, 1147 (1989).

[56] L. Canton, W. Schadow: priv. comm.