

II.4.2 Erste Versuche eines Schalenmodells des Atomkerns

Wie in der Einleitung zum Abschnitt erläutert wurde, beruht die theoretische Beschreibung des Atomkerns als Reihenfolge von Protonen- und Neutronenschalen auf dem Begriff eines mittleren Ein-Teilchen-Potentials für die Nukleonen. Das unterliegende Prinzip wird erstens in § II.4.2 a dargelegt und einfache Ansätze für das mittlere Potential werden in § II.4.2 b vorgeschlagen. Die Entstehung magischer Zahlen wird am Beispiel des dreidimensionalen Kastenpotentials erläutert (§ II.4.2 c), indem das entsprechende quantenmechanische Problem ausführlich gelöst wird. Dann werden zwei andere Potentiale diskutiert (§ II.4.2 d), die die empirisch gefundenen magischen Zahlen aber noch nicht liefern.

II.4.2 a Mittleres Potential

Der Atomkern ist ein System aus A miteinander wechselwirkenden Nukleonen: Z Protonen und N Neutronen. Somit besteht die Gesamtenergie des Systems aus der Summe der einzelnen kinetischen Energien der Bestandteile und der potentiellen Energie für alle möglichen Wechselwirkungen zwischen den Nukleonen. Dies entspricht quantenmechanisch einem Hamilton^(am)-Operator

$$\hat{H}_{\text{Kern}} = \sum_{i=1}^A \hat{T}_i + \sum_{1 \leq i < j \leq A} \hat{V}_{ij} + \sum_{1 \leq i < j < k \leq A} \hat{V}_{ijk} + \cdots \quad (\text{II.19})$$

Dabei bezeichnet $\hat{T}_i$ den kinetische Energieoperator für Teilchen i : unter der Annahme, dass die Nukleonen nicht-relativistisch sind — was mit dem in Abschn. II.3 gefundenen Wert der Fermi-Energie plausibel aussieht —, gilt $\hat{T}_i = \hat{p}_i^2/2m_i$, wobei $\hat{p}_i$ bzw. m_i der Impulsoperator bzw. die Masse des Teilchens ist. Die Terme $\hat{V}_{ij}$, $\hat{V}_{ijk}$ entsprechen Zwei- bzw. Drei-Teilchen-Wechselwirkungen zwischen den Nukleonen, summiert über alle möglichen Paare bzw. Triplets.

Bemerkung: $\hat{V}_{ij}$ beschreibt die Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen, und enthält somit das starke Nukleon–Nukleon Potential, das sich prinzipiell aus Streuexperimenten oder aus der Untersuchung des Deuterons gewinnen lässt, und einen elektromagnetischen Anteil: Coulomb-Abstoßung wenn i und j Protonen sind, sowie die Kopplung zwischen den magnetischen Dipolmomenten der zwei Nukleonen. $\hat{V}_{ijk}$ entspricht echten Drei-Nukleonen-Kräften,⁽³⁴⁾ die in erster Näherung viel kleiner als die Zwei-Körper-Kräfte sind, für die Beschreibung bestimmter Kerne nötig sind — insbesondere, für sehr neutronenreiche Kerne wie ^{24}O [41] oder ^{48}Ca [42].

Bei Gl. (II.19) handelt es sich um den Hamilton-Operator eines *Vielteilchenproblems*, dessen exakte Lösung eine sehr komplizierte Aufgabe darstellt. In der Tat ist das Problem nur für sehr

⁽³⁴⁾ Dabei handelt es sich um Kräfte, die sich nicht auf die Zwei-Körper-Kräfte zwischen allen Paaren reduzieren lassen. Solche Kräfte sind in den heute bekannten Wechselwirkungen zwischen Elementarteilchen nicht vorhanden — insbesondere nicht in der Quantenchromodynamik (QCD) zwischen Quarks und Gluonen. Sie können aber in effektiven Theorien für nicht-elementare Freiheitsgrade — wie die Nukleonen — entstehen [40].

^(am) W. R. HAMILTON, 1805–1865

besondere Wahlen der Wechselwirkungsterme möglich. Stattdessen löst man in erster Näherung ein vereinfachtes Problem, das sich wie folgt erhalten lässt. Erstens wird $\hat{H}_{\text{Kern}}$ umschrieben als

$$\hat{H}_{\text{Kern}} = \sum_{i=1}^A [\hat{T}_i + V(\hat{\vec{r}}_i)] + \left[\sum_{i<j} \hat{V}_{ij} + \sum_{i<j<k} \hat{V}_{ijk} - \sum_i V(\hat{\vec{r}}_i) \right] \equiv \sum_{i=1}^A \hat{h}_i + \hat{V}_{\text{Rest}}, \quad (\text{II.20})$$

wobei $\hat{h}_i \equiv \hat{T}_i + V(\hat{\vec{r}}_i)$ jetzt ein Einteilchen-Hamilton-Operator ist. Diese Umschreibung ist nur dann nützlich, wenn die zwei folgenden Bedingungen erfüllt sind:

- $V(\hat{\vec{r}}_i)$ ist ein ortsabhängiges mittleres Potential, das für alle Nukleonen des Kerns identisch sein muss. Somit haben alle $\hat{h}_i$ denselben Ausdruck.
- die Restwechselwirkung V_{Rest} ist „klein“ und kann vernachlässigt werden.

Unter letzterer Bedingung wird das ursprüngliche A -Teilchenproblem zu A *unabhängigen* Einteilchenproblemen, d.h. der Atomkern wird jetzt durch ein *Einzelteilchenmodell* beschrieben.

Das Prinzip der Berechnung ist dann jenes des auch in der Atomphysik benutzten selbstkonsistenten Hartree^(an)–Fock^(ao)-Verfahrens:⁽³⁵⁾

– Erstens soll man ein gutes Potential finden, z.B. schrittweise: $V(\vec{r})$ wird zuerst geraten, dann wird das zugehörige $\hat{V}_{\text{rest}}$ numerisch berechnet und $V(\vec{r})$ modifiziert, bis $\hat{V}_{\text{rest}}$ „klein“ ist (s. zweite Bemerkung unten).

– Zweitens löst man die Schrödinger^(ap)-Gleichung mit Hamilton-Operator $\hat{h} \equiv \hat{h}_i$, um die Wellenfunktion eines im durch $V(\vec{r})$ erzeugten Potentialtopf eingeschlossenen Nukleons zu finden.

– Drittens wird der Kern gebildet: die Protonen bzw. Neutronen besetzen die gefundenen Einteilchen-Zustände unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips, denn Protonen und Neutronen sind ununterscheidbare Fermionen. Beispielsweise sind im Grundzustand des Atomkerns nur die tiefstmöglichen Ein-Teilchen-Energiezustände besetzt.

Hier sollte der Vollständigkeit halber ein bisschen mehr über A -Teilchen-Wellenfunktionen kommen.

Z.B.: die Wellenfunktion des gesamten Kerns ist durch das antisymmetrisierte Produkt der Nukleonenwellenfunktionen gegeben.

Hiernach werden wir den ersten Schritt nicht explizit machen, sondern werden wir einfache mittlere Potentiale postulieren, um den zweiten und den dritten Schritt zu illustrieren. Insbesondere werden wir im Rest des § II.4.2 und im § II.4.3 nur (näherungsweise) sphärische Atomkerne betrachten, entsprechend kugelsymmetrischen mittleren Potentialen. Dagegen erfordert die Beschreibung (stark) deformierter Kerne nicht-kugelsymmetrische Potentiale, die natürlich viel schwieriger zu behandeln sind.

Bemerkungen:

* Anstatt eines mittleren Potentials für alle Nukleonen ist es sinnvoller, unterschiedliche mittlere Potentiale für Protonen und Neutronen anzunehmen. Das Proton und das Neutron haben nämlich leicht unterschiedliche Massen, so dass ihre kinetische Energien schon unterschiedlich sind. Dazu unterliegen Protonen und Neutronen nicht denselben Wechselwirkungen, wie kurz nach Gl. (II.19) bemerkt wurde. Somit soll der rechte Glied von Gl. (II.20) durch

$$\hat{H}_{\text{Kern}} = \sum_{i=1}^Z \hat{h}_i^{(p)} + \sum_{j=1}^N \hat{h}_j^{(n)} + \hat{V}_{\text{Rest}} \quad \text{mit} \quad \hat{h}_i^{(p)} \equiv \frac{\hat{p}_i^2}{2m_p} + V^{(p)}(\hat{\vec{r}}_i), \quad \hat{h}_j^{(n)} \equiv \frac{\hat{p}_j^2}{2m_n} + V^{(n)}(\hat{\vec{r}}_j). \quad (\text{II.21})$$

ersetzt werden, wobei $V^{(p)}$ bzw. $V^{(n)}$ das gleiche für alle Protonen bzw. Neutronen ist, $V^{(p)}$ und $V^{(n)}$ aber unterschiedlich sind.

⁽³⁵⁾ Eine Einführung in die Grundlagen der Methode ist z.B. in Ref. [43] zu finden.

^(an) D. HARTREE, 1897–1958 ^(ao) V. A. FOCK (oder FOK), 1898–1974 ^(ap) E. SCHRÖDINGER, 1887–1961

* Eigentlich ist $\hat{V}_{\text{rest}}$ ein Operator auf dem Hilbert-Raum des A -Teilchen-Problems und kann somit nicht als „klein“ betrachtet werden. Was klein sein kann, sind die Matrixelemente von $\hat{V}_{\text{rest}}$ zwischen bestimmten A -Teilchen-Zuständen, insbesondere zwischen den Energie-Eigenzuständen für das Problem ohne $\hat{V}_{\text{rest}}$. Diese Matrixelemente sollen klein gegenüber jene von $\sum_i \hat{h}_i$ sein, was möglicherweise nur in einem begrenzten Energiebereich gelten kann.⁽³⁶⁾

Damit lässt sich ein bestimmtes mittleres Potential nur akzeptieren bzw. verwerfen, nachdem die zweite und dritte Schritte durchgelaufen sind, nicht schon im ersten Schritt.

* In praktischen numerischen Berechnungen wird die Restwechselwirkung nicht ganz vernachlässigt, sondern in einem vierten Schritt — also nachdem das mittlere Potential optimiert wurde — als eine Störung behandelt. Dieser Term spielt nämlich eine wichtige Rolle, indem er die Entartung zwischen Zuständen mit unterschiedlichem Spin aufhebt und die experimentell beobachtete paarweise Kopplung der Protonen bzw. Neutronen einer Schale erklärt.

⁽³⁶⁾ Es kann auch passieren, dass die Eigenzustände von $\sum_i \hat{h}_i$ für gewisse Observablen schlechte Erwartungswerte liefern, die mit experimentellen Ergebnissen nicht passen.