

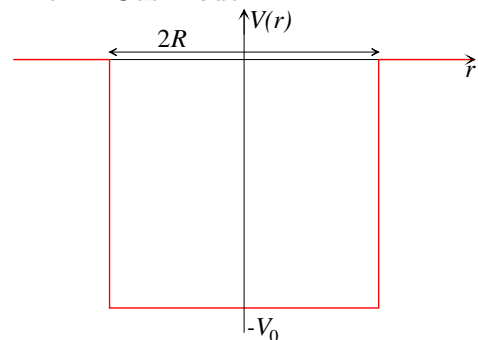
II.4.2 b Wahl des effektiven Potentials

Ein wichtiger Punkt im oben beschriebenen Verfahren ist die Wahl des Ein-Teilchen-Potentials, in dem die Nukleonen eingeschlossen werden. Im Folgenden werden drei mögliche Modelle untersucht, die kugelsymmetrische Kerne beschreiben: dabei ist immer $r \equiv |\vec{r}|$ der Abstand vom Kernzentrum. Diese Potentiale werden mindestens durch eine den Kernradius spiegelnde Reichweite R und eine Tiefe $-V_0$ charakterisiert, wobei $V_0 \approx 50 \text{ MeV}$ wie im Fermi-Gas-Modell.

- Kastenpotential (II.22)

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } r \leq R \\ 0 & \text{für } r > R \end{cases}$$

Unrealistisch kann auch das Potential unendlich für $r > R$ angenommen werden.



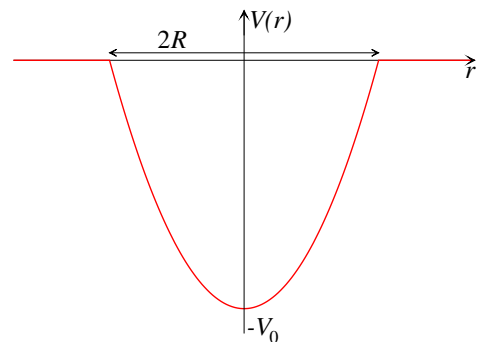
- harmonischer Oszillator (II.23)

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] & \text{für } r \leq R \\ 0 & \text{für } r > R \end{cases}$$

Berechnungen sind einfacher wenn die Form

$$V(r) = -V_0 \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right]$$

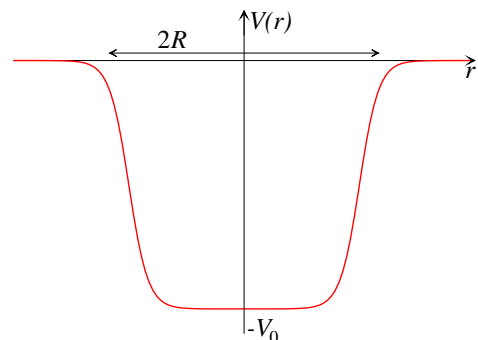
für einen beliebigen Abstand r gilt.



- Woods-Saxon Potential (II.24)

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-R}{\delta}}}$$

$\delta \approx 0,5 \text{ fm}$ bestimmt die Breite des Kernrands.



Das Woods–Saxon Potential ist realistischer — es spiegelt offensichtlich die gemessene Dichteverteilung (I.21) der Nukleonen in Kernen mit $A \geq 20$ wider —, es erfordert aber die Nutzung eines numerischen Lösungsverfahrens. Umgekehrt sind das Kasten- bzw. das Oszillatorpotential zwar vereinfachte Näherungen, jedoch existieren analytische Lösungen der Schrödinger-Gleichung für die Bewegung eines Nukleons in solchen Potentialen, was einen besseren Einblick in den Ursprung der verschiedenen Eigenschaften des Modells erlaubt, insbesondere in die nötigen Bestandteile, um beobachtete Kerneigenschaften wiederzugeben.

Um den Unterschied zwischen Protonen und Neutronen in Betracht zu ziehen werden unterschiedliche Potentialtöpfe angenommen: in erster Näherung, dieselben Potentiale mit unterschiedlichen Tiefen $V_0^{(p)} \neq V_0^{(n)}$.

II.4.2c Einfachstes Beispiel: Kastenpotential

In diesem Paragraph werden die möglichen stabilen Ein-Teilchen-Zustände eines Teilchens im dreidimensionalen Kastenpotential (II.22) bestimmt, insbesondere deren Eigenenergien, welche die „Schalen“ der entsprechenden A -Teilchen-Zustände bestimmt. Dafür soll man die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung in Anwesenheit des Potentials lösen.

Da das Potential kugelsymmetrisch ist und nur vom Ort abhängt, kommutiert der Hamilton-Operator $\hat{h}$ mit den quadrierten Bahndrehimpuls $\vec{L}^2$ und Spin $\vec{S}^2$ des Nukleons, sowie mit deren Projektionen $\hat{L}_z$ bzw. $\hat{S}_z$ auf eine feste Achse. Daher ist $\{\hat{h}, \vec{L}^2, \hat{L}_z, \vec{S}^2, \hat{S}_z\}$ ein vollständiger Satz kommutierender Observablen, deren Erwartungswerte die Ein-Teilchen-Eigenzustände völlig charakterisieren werden.⁽³⁷⁾ Dabei werden, wie üblich, die Eigenwerte des Hamilton-Operators $\hat{h}$ — d.h. die Ein-Teilchen-Eigenenergien — durch eine Hauptquantenzahl $n \in \mathbb{N}^*$ gekennzeichnet, und die Eigenwerte von $\vec{L}^2$ bzw. $\hat{L}_z$ durch ganzzahlige Quantenzahlen $\ell \in \mathbb{N}$ bzw. $m_\ell \in \{-\ell, -\ell+1, \dots, \ell\}$, vgl. Anhang A.2.

Bemerkung: In der Kernphysik wird, wie in der Atomphysik, die spektroskopische Bezeichnungsweise benutzt, so dass ein s-, p-, d-, f-, g-, h-Zustand einen Zustand mit jeweils $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ andeutet. Im Gegensatz zur Atomphysik ist die azimutale Quantenzahl ℓ in der Kernphysik nicht auf Werte kleiner als n beschränkt, sondern kann größer sein, wie unten zu sehen sein wird.

In Ortsdarstellung lautet der kinetische Energieoperator $\hat{T}_i = -(\hbar^2/2m_i)\hat{\Delta}$ mit dem Laplace^(aq)-Operator Δ . Somit lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für ein im Potential (II.22) eingeschlossenes Proton bzw. Neutron, beschrieben durch die Wellenfunktion $\psi^{(p)}(\vec{r})$ bzw. $\psi^{(n)}(\vec{r})$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_j}\Delta\psi^{(j)}(\vec{r}) - V_0^{(j)}\psi^{(j)}(\vec{r}) = \varepsilon^{(j)}\psi^{(j)}(\vec{r}) \quad \text{für } |\vec{r}| \leq R, \quad (\text{II.25})$$

wobei $j = p$ oder n , während $\varepsilon^{(j)}$ die Energie des Ein-Teilchen-Zustands $\psi^{(j)}(\vec{r})$ darstellt.

Hiernach werden nur gebundene Nukleonen ins Betracht gezogen, sodass außer des Potentialtopfs $\psi^{(j)}(\vec{r}) = 0$, entsprechend einer verschwindenden Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Streng genommen ist diese Bedingung wenn $V^{(j)}(|\vec{r}| > R) = 0$ nicht erfüllt, sondern nur wenn $V^{(j)}(|\vec{r}| > R) = +\infty$, was von jetzt an angenommen wird.⁽³⁸⁾

Wegen der Kugelsymmetrie des Problems ist es günstig, Kugelkoordinaten (r, θ, φ) zu benutzen. Dazu ist es möglich, die Radial- und Winkelabhängigkeiten der Wellenfunktion eines Nukleons zu trennen („Separationsansatz“). Somit kann die letztere als

$$\psi^{(j)}(\vec{r}) = R_{n\ell}^{(j)}(r) Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi) \quad (\text{II.26})$$

⁽³⁷⁾ Der Erwartungswert von $\vec{S}^2$ ist für alle Eigenzuständen derselbe, und zwar $\frac{3}{4}\hbar^2$, da alle Protonen und Neutronen denselben Spin $s = \frac{1}{2}$ haben. Deshalb erlaubt dieser Erwartungswert keine Unterscheidung zwischen den Zuständen und wird im Folgenden von deren Kennzeichnung ausgelassen.

⁽³⁸⁾ Die Herleitung der Eigenenergien und -zustände in diesem vereinfachten Fall befindet sich in manchem Lehrbuch der Quantenmechanik, z.B. in Fließbach [44, Kap. 25].

^(aq) P.-S. LAPLACE, 1749–1827

geschrieben werden, wobei n , ℓ und m_ℓ ganze Zahlen sind (s. oben) und der Winkelanteil $Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)$ eine Kugelflächenfunktion bezeichnet (Anhang A.2.2). Mit diesem Ansatz führt der Ausdruck des Laplace-Operators in Kugelkoordinaten

$$\hat{\Delta}f(\vec{r}) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [\hat{r}f(\vec{r})] - \frac{1}{r^2} \frac{1}{\hbar^2} \hat{L}^2 f(\vec{r})$$

unter Verwendung der Eigenwertgleichung (A.1a) für jeden Wert von ℓ zu den m_ℓ -unabhängigen linearen Differentialgleichungen

$$-\frac{\hbar^2}{2m_j} \left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r R_{n\ell}^{(j)}(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R_{n\ell}^{(j)}(r) \right] = (\varepsilon^{(j)} + V_0^{(j)}) R_{n\ell}^{(j)}(r), \quad (\text{II.27a})$$

wobei ein globaler Faktor $Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)$ schon ausfaktorisiert wurde: somit wird das Problem auf ein eindimensionales Problem reduziert. Außerdem gelten die Randbedingungen

$$R_{n\ell}^{(j)}(0) < \infty : \quad \text{die Lösung soll in } r=0 \text{ regulär sein;} \quad (\text{II.27b})$$

$$R_{n\ell}^{(j)}(R) = 0 : \quad \text{die Lösung soll bei } r=R \text{ kontinuierlich sein.} \quad (\text{II.27c})$$

Die erste dieser Bedingungen entspricht der nötigen Endlichkeit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi^{(j)}|^2 \propto (R_{n\ell}^{(j)})^2$, insbesondere im Ursprungspunkt $\vec{r} = \vec{0}$, während die zweite Bedingung aus der Forderung $\psi^{(j)}(\vec{r}) = 0$ außerhalb des Bereichs $r \leq R$ folgt.

Der Einfachheit halber kann man zuerst die s-Zustände betrachten, d.h. den Fall $\ell = 0$: die Differentialgleichung (II.27a) lautet dann (von jetzt an wird der Index j der Kürze halber ausgelassen)

$$\frac{d^2}{dr^2} (r R_{n0}(r)) + \frac{2m\tilde{\varepsilon}}{\hbar^2} (r R_{n0}(r)) = 0$$

mit $\tilde{\varepsilon} \equiv \varepsilon + V_0$. Eine bei $r=0$ reguläre Lösung [Bedingung (II.27b)] ist

$$R_{n0}(r) = C \frac{\sin k_{n0}r}{k_{n0}r} \quad \text{mit} \quad k_{n0}^2 = \frac{2m\tilde{\varepsilon}_{n0}}{\hbar^2}$$

und einer Normierungskonstante C , deren Ausdruck in der späteren Diskussion nicht benötigt wird. Damit die Lösung bei $r=R$ eine Nullstelle hat [Randbedingung (II.27c)] soll k_{n0} nur die diskreten Werte $k_{n0} = n\pi/R$ annehmen, wobei n die *Hauptquantenzahl* ist, sodass die möglichen Energien der Zustände quantisiert sind:

$$\tilde{\varepsilon}_{n0} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{R^2} n^2, \quad n \in \mathbb{N}^*. \quad (\text{II.28})$$

$\tilde{\varepsilon}_{n0}$ ist daher die Energie (im Bezug auf die Tiefe $-V_0$ des Potentialtopfs) des auf dem ns -Zustand stehenden Nukleons.

Bemerkung: Der Wellenvektor k_{00} mit $n=0$ führt zu $\psi(\vec{r}) = 0$ überall und entspricht daher keiner physikalisch relevanten Lösung.

Für eine beliebige *azimutale Quantenzahl* ℓ lautet eine reguläre Lösung der Gleichung (II.27a)

$$R_{n\ell}(r) = j_\ell(k_{n\ell}r) = \sqrt{\frac{\pi}{2k_{n\ell}r}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(k_{n\ell}r),$$

wobei $j_\ell(x)$ bzw. $J_{\ell+1/2}(x)$ eine *sphärische Bessel-^(ar)Funktion erster Art* bzw. eine *Bessel-Funktion erster Art halbzahlgiger Ordnung* bezeichnet.⁽³⁹⁾ Wie im Fall $\ell=0$ oben ist $k_{n\ell}$ durch die Randbedingung (II.27c) festgelegt: die Wellenfunktion verschwindet bei $r=R$ nur wenn $k_{n\ell}R$ eine Nullstelle

⁽³⁹⁾Die ersten sphärischen Besselfunktionen sind

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \quad j_2(x) = \left(\frac{3}{x^2} - \frac{1}{x} \right) \sin x - \frac{3 \cos x}{x^2}.$$

Ihre ersten Nullstellen werden in der Tabelle II.1 gegeben, vgl. auch Refs. [45, Kap. 10] oder [46, Kap. 10].

^(ar)F. W. BESSEL, 1784–1846

n	$X_{0,n}$	$X_{1,n}$	$X_{2,n}$	$X_{3,n}$	$X_{4,n}$	$X_{5,n}$	$X_{6,n}$
1	3,1416	4,4934	5,7635	6,9879	8,1826	9,3558	10,5128
2	6,2832	7,7253	9,0950	10,4171	11,7049	12,9665	14,2074
3	9,4248	10,9041	12,3229	13,6980	15,0397	16,3547	17,6480
4	12,5664	14,0662	15,5146	16,9236	18,3013	19,6532	20,9835

Tabelle II.1 – Erste Nullstellen der sphärischen Besselfunktionen j_0 bis j_6 .

der sphärischen Besselfunktion j_ℓ ist, d.h. nur für $k_{n\ell} = X_{\ell,n}/R$, wobei $X_{\ell,n}$ die n -te (positive) Nullstelle von j_ℓ bezeichnet (s. Tabelle II.1). Die entsprechende Energie des im Potentialtopf eingeschlossenen Nukleons ist

$$\tilde{\varepsilon}_{n\ell} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{X_{\ell,n}}{R} \right)^2. \quad (\text{II.29})$$

Wie oben gesagt sind die Zustände durch die Erwartungswerte der Observablen $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z\}$ charakterisiert, d.h. äquivalent durch die zugehörigen Quantenzahlen $\{n, \ell, m_\ell, m_s\}$: die möglichen Energiewerte (II.29) hängen nur von n und ℓ ab. Für feste ℓ kann dann die *magnetische Quantenzahl* die $2\ell + 1$ Werte $m_\ell \in \{-\ell, \dots, \ell\}$ annehmen. Schließlich kann der Erwartungswert der Projektion $\hat{S}_z$ des Nukleonspins auf die z -Achse die Werte $\pm \frac{1}{2}\hbar$ annehmen, entsprechend $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Insgesamt gibt es also $2(2\ell + 1)$ entartete Ein-Teilchen-Zustände auf dem (n, ℓ) -Energieniveau.

Die Anordnung der möglichen Zustände nach wachsender Energie $\tilde{\varepsilon}_{n\ell}$ bzw. wachsendem Wert der Nullstelle $X_{\ell,n}$ wird in der Tabelle II.2 mit dem zugehörigen Entartungsgrad des Niveaus gegeben, sowie die Summe der Anzahlen von Ein-Teilchen-Zuständen mit Energie kleiner gleich $\tilde{\varepsilon}_{n\ell}$. Die entsprechenden Energieniveaus im Potentialtopf sind in Abb. II.10 dargestellt.

(n, ℓ)	$X_{\ell,n}$	Anzahl der Zustände auf dem Niveau	$\sum_{n,\ell} 2(2\ell + 1)$
1s	3,14	2	2
1p	4,49	6	8
1d	5,76	10	18
2s	6,28	2	20
1f	6,99	14	34
2p	7,73	6	40
1g	8,18	18	58
2d	9,10	10	68
1h	9,36	22	90
3s	9,42	2	92
2f	10,42	14	106
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

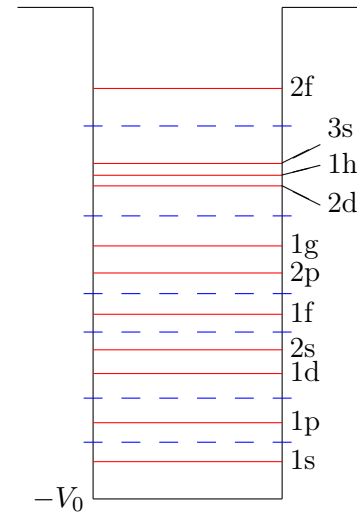


Abbildung II.10 – Energieniveaus der Nukleonen in einem Kastenpotential.

Tabelle II.2 – Termschema im Kastenpotential (II.22).

In diesem Termschema kommt manchmal eine größere Energielücke zwischen zwei aufeinanderfolgenden Niveaus vor, sodass die nötige Energie, um ein Nukleon vom niedrigeren auf das höher liegende Niveau anzuregen, ebenfalls groß ist. Umgekehrt liegen mehrere Niveaus nah voneinander, z.B. 1d und 2s, 2p und 1g, oder 2d, 1h und 3s: in solchen Fällen ist die Anregungsenergie relativ gering. Dies führt zur Idee, dass diese dicht liegenden Niveaus eine Schale zusammen bilden. Die magischen Zahlen treten dann nur beim Abschluss entweder einer solchen „Composite-Schale“ oder eines isolierten Niveaus auf: so findet man 2, 8, 20, 34, 58, 92, 138...

Die ersten drei experimentell beobachteten magischen Zahlen 2, 8, 20 werden offensichtlich gut erklärt! Es fehlen aber 28, 50, 82 und 126.

II.4.2 d Oszillator- und Woods–Saxon-Potential

Das Problem bei den höheren magischen Zahlen könnte vermutlich mithilfe eines besseren Ansatzes für den Ein-Teilchen-Potentialtopf gelöst werden.

Im Fall des dreidimensionalen Oszillatorpotentials (II.23) findet man äquidistante Ein-Teilchen-Niveaus mit der Energie $\tilde{\varepsilon}_{n\ell} = [2(n-1) + \ell + \frac{3}{2}]\hbar\omega$, wobei $\omega^2 \equiv 2V_0/mR^2$. Der Entartungsgrad der Niveaus wächst schnell: auf dem N -ten Niveau ($N \in \mathbb{N}$) sitzen alle mögliche (n, ℓ) -Zustände mit $2(n-1) + \ell = N$ und jeder (n, ℓ) -Zustand ist wie oben $2(2\ell+1)$ -mal entartet. Die daraus folgenden magischen Zahlen sind dann 2, 8, 20, 40, 70, 112, 168... Die Reihenfolge der Energieniveaus des dreidimensionalen harmonischen Oszillators ist in der Tabelle II.3 bzw. in Abb. II.11 dargestellt. Dabei kann man merken, dass alle Zustände auf einem gegebenen Niveau dieselbe Parität besitzen, und zwar abwechselnd positiv und negativ.

(n, ℓ)	$\tilde{\varepsilon}_{n\ell}$	Entartungsgrad des Niveaus	$\sum_{n,\ell} 2(2\ell+1)$
1s	$\frac{3}{2}\hbar\omega$	2	2
1p	$\frac{5}{2}\hbar\omega$	6	8
2s, 1d	$\frac{7}{2}\hbar\omega$	12	20
2p, 1f	$\frac{9}{2}\hbar\omega$	20	40
3s, 2d, 1g	$\frac{11}{2}\hbar\omega$	30	70
3p, 2f, 1h	$\frac{13}{2}\hbar\omega$	42	112
4s, 3d, 2g, 1i	$\frac{15}{2}\hbar\omega$	56	168
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

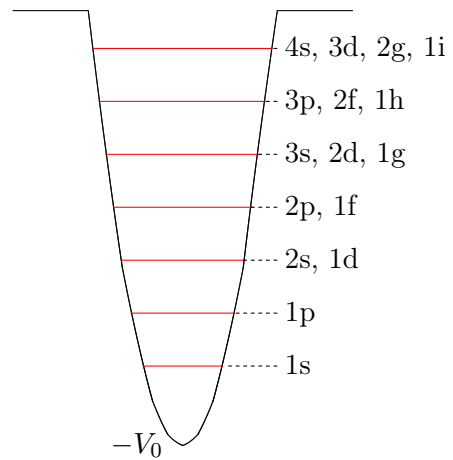


Abbildung II.11 – Energieniveaus im Oszillatorpotential.

Tabelle II.3 – Termschema im Oszillatorpotential (II.23).

Die übliche Herleitung der Energieniveaus des eindimensionalen harmonischen Oszillators beruht auf der Nutzung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\hat{a}^\dagger$ und $\hat{a}$.⁽⁴⁰⁾ Die Umschreibung des Potentials (II.23) in kartesischen Koordinaten als Summe dreier unabhängigen eindimensionalen Oszillatoren liefert dann sofort die Eigenzustände und Eigenenergien des dreidimensionalen Oszillators.

Eine direkte Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten in demselben Sinne als die oben dargestellte Lösung des Kastenpotentials ist auch möglich, vgl. z.B. Fließbach [44, Kap. 28].

Im Woods–Saxon Potential (II.24) ist die Anordnung der Ein-Teilchen-Zustände 1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 3s, 1h, 2f, 3p, 1i, 2g... mit den magischen Zahlen 2, 8, 20, 40 (oberhalb der 2p-Schale), 58 (oberhalb der 1g-Schale), 92, 138... Die ersten drei Zahlen werden abermals gut wiedergegeben, dennoch fehlen wieder die nächsten.

Die erfolgreiche Erklärung von 2, 8 und 20 mit allen drei Potentialen bestätigt die Gültigkeit des dem Einteilchen-Schalenmodell zugrunde liegenden Prinzips, dass die magischen Zahlen den Abschluss von Schalen unabhängiger Nukleonen in einem Potentialtopf widerspiegeln.

Der Grund des Scheiterns bei den höheren Zahlen lässt sich aus der Analysis der drei einfachen Potentiale (II.22)–(II.24) ahnen. Somit wird das Problem wahrscheinlich durch den großen Entartungsgrad $2(2\ell+1)$ der (n, ℓ) -Niveaus verursacht. Zum Beispiel kommt in allen drei Modellen

⁽⁴⁰⁾Diese Herleitung ist in jedem Lehrbuch der Quantenmechanik zu finden, z.B. in Cohen-Tannoudji [47, Kap. V], Fließbach [44, Kap. 34] oder Messiah [48, Kap. 12].

nach dem 2s-Niveau das 14-mal entartete 1f-Niveau vor, was das Auftauchen der magischen Zahl 28 verhindert. Andere „natürliche“ Potentialforme könnten hierbei nicht weiter helfen, solange die Entartung der Zustände mit denselben Quantenzahlen (n, ℓ) nicht aufgehoben wird.