



I.4 Quantenmechanische Eigenschaften des Atomkerns

Nuklide besitzen noch weitere Charakteristika, die nur nicht-triviale Werte annehmen, wenn der Kern nicht kugelsymmetrisch ist. Teilweise haben diese Eigenschaften kein klassisches Pendant, weshalb sie hier etwas missbräuchlich als „quantenmechanisch“ gekennzeichnet werden.

I.4.1 Spin

Als *Spin* bezeichnet man im engeren Sinn den Drehimpuls eines Körpers in seinem eigenen Ruhesystem — d.h. in einem Bezugssystem, wo der Bahndrehimpuls $\vec{r} \times \vec{p}$ verschwindet.⁽¹⁷⁾

Die Bausteine des Kerns — Protonen und Neutronen — sind Teilchen mit dem Spin $\frac{1}{2}$, entsprechend Drehimpulsen $\vec{S}_i$. Dazu bewegt sich jedes Nukleon im Inneren des Nuklids und besitzt

⁽¹⁷⁾Die quantenmechanische Behandlung des Drehimpulses wird kurz im Anhang A dargestellt.

daher einen Bahndrehimpuls $\vec{L}_i$ um das Kernzentrum, auch im Ruhesystem des Korns. Die Kopp-
lung aller individuellen Nukleonenspins und -bahndrehimpulse führt zu einem gesamten Drehimpuls
 $\vec{J}_{\text{Kern}}$ (oder oft $\vec{I}$) im Ruhesystem des Korns, der auch als *Kernspin* oder Spin des Korns bezeichnet
wird. Insbesondere besitzen Atomkerne mit einer ungeraden Nukleonenzahl A automatisch einen
halbzahligen Spin.

Die Existenz eines nicht-verschwindenden Kernspins signalisiert eine Abweichung von der Kugel-
symmetrie des Atomkorns, so dass die (Ladungs)Dichteverteilung nicht durch die einfache Woods-
Saxon-Verteilung (I.20)–(I.21) gegeben sein kann.

Der Kernspin trägt zum gesamten Drehimpuls eines Systems bei, der in jedem Typ von Prozess
eine erhaltene Größe ist.

Experimentell kann der Kernspin durch die Hyperfeinausspaltung der Spektrallinien der Atom-
hülle in einem Magnetfeld ermittelt werden, vgl. Experimente 54–56 in Ref. [8].

I.4.2 Parität

Eine andere wichtige Eigenschaft von Atomkernen ist ihre Parität P (oder manchmal Π). Dabei
handelt es sich um die multiplikative Quantenzahl, die das Verhalten der Wellenfunktion — bzw.
des quantenmechanischen Zustands — unter der Raumspiegelungstransformation $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ charakte-
risiert. Kerne sind Eigenzustände des entsprechenden Operators und besitzen somit eine bestimmte
Parität, entweder positiv (Eigenwert $+1$) oder negativ (-1).

Eine übliche Notation fasst Spin und Parität zusammen: J_{Kern}^P , wobei die Parität mit $+$ oder $-$
bezeichnet wird.

Die Parität eines Systems ist in den meisten Elementarprozessen eine erhaltene Größe, mit der
einzigen doch wichtigen Ausnahme der durch die schwache Wechselwirkung vermittelten Prozesse
(vgl. § ??).

I.4.3 Elektrische und magnetische (Multipol-)Momente

I.4.3a Elektrische Momente

Bei Kernen mit einem nicht-verschwindenden Kernspin definiert dieser eine bevorzugte Richtung
und verletzt daher automatisch die Kugelsymmetrie.

Um die Abweichung der elektrischen Ladungsdichteverteilung $\rho_{\text{el.}}$ von der Kugelgestalt werden
ihre *elektrische Multipolmomente* eingeführt (vgl. z.B. Ref. [27], Kap. 4). Die Verteilung erzeugt an
einem Aufpunkt M im Abstand $|\vec{X}|$ von ihrem Schwerpunkt ein elektrostatisches Potential $\Phi(\vec{X})$,
das mithilfe dieser Momente als Summe verschiedener Terme geschrieben werden kann (damit die
höheren Terme der Entwicklung vernachlässigbar sind, muss $|\vec{X}|$ viel größer als die Ausdehnung der
Verteilung sein):

$$\Phi(\vec{X}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{|\vec{X}|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{D} \cdot \vec{X}}{|\vec{X}|^3} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{Q_{ij} X_i X_j}{|\vec{X}|^5} + \dots, \quad (\text{I.28})$$

wobei die X_i mit $i \in \{1, 2, 3\}$ die kartesischen Koordinaten des Punkts M bezüglich eines Systems
mit dem Verteilungsschwerpunkt als Ursprungspunkt bezeichnen. In Gl. (I.28) ist Q die gesamte
elektrische Ladung der Verteilung, während der Vektor $\vec{D}$ bzw. der (spurlose) Tensor zweiter Stufe
 Q_{ij} das elektrische Dipol- bzw. Quadrupolmoment ist. Diese werden jeweils gegeben durch

$$\vec{D} = \int \vec{r} \rho_{\text{el.}}(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (\text{I.29})$$

und

$$Q_{ij} = \int (3x_i x_j - \vec{r}^2 \delta_{ij}) \rho_{\text{el.}}(\vec{r}) d^3\vec{r}, \quad (\text{I.30})$$

wobei δ_{ij} das Kronecker^(aa)-Symbol ist: $\delta_{ij} = 1$ wenn $i = j$, 0 sonst.

^(aa)L. KRONECKER, 1823–1891

Der Ausdruck (I.28) des Potentials ergibt sich sofort aus dem Integral der Taylor-Entwicklung der Funktion $f(x_1, x_2, x_3) \equiv [(X_1 - x_1)^2 + (X_2 - x_2)^2 + (X_3 - x_3)^2]^{-1/2} = 1/|\vec{X} - \vec{x}|$ in der Nähe des Ursprungspunkts $\vec{x} = \vec{0}$:

$$\begin{aligned} f(\vec{x}) &= f(\vec{0}) + \sum_{i=1}^3 x_i \frac{\partial f(\vec{0})}{\partial x_i} + \sum_{i,j=1}^3 \frac{x_i x_j}{2} \frac{\partial^2 f(\vec{0})}{\partial x_i \partial x_j} + \dots \\ &= \frac{1}{|\vec{X}|} + \frac{1}{|\vec{X}|^3} \sum_{i=1}^3 x_i X_i + \frac{1}{|\vec{X}|^5} \sum_{i,j=1}^3 \frac{x_i x_j}{2} [3X_i X_j - \vec{X}^2 \delta_{ij}] + \dots, \end{aligned}$$

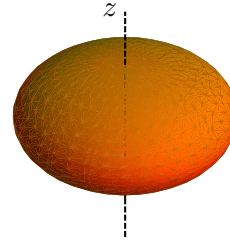
zusammen mit der Beziehung $\sum_{i,j} x_i x_j \vec{X}^2 \delta_{ij} = \sum_{i,j} X_i X_j \vec{x}^2 \delta_{ij}$.

Auf den Ausdrücken (I.29)–(I.30) kann man leicht prüfen, dass das elektrische Dipol- und das elektrische Quadrupolmoment von sphärischen Kernen verschwinden. In §II.4.5c wird allgemeiner gezeigt, dass Kerne wegen ihrer wohldefinierten Parität kein elektrisches Dipolmoment besitzen. Sie können aber noch ein Quadrupolmoment haben, so dass das Letztere die einfachste Abweichung von der Kugelgestalt der Dichteverteilung parametrisiert.

Es sei jetzt ein Kern mit einem nicht-verschwindenden Spin $\vec{J}_{\text{Kern}}$; die Richtung dieses Spins definiert die z -Achse. Die zz -Komponente des elektrischen Quadrupolmoments Q_{zz} bestimmt die Deformation des Kerns entlang dieser Achse⁽¹⁸⁾. Dabei gibt es zwei Möglichkeiten, je nach dem Vorzeichen von Q_{zz} :

$Q_{zz} > 0$: prolater Kern (= zigarrenförmig)

$Q_{zz} < 0$: oblater Kern (= linsenförmig)



I.4.3b Magnetisches Dipolmoment

In der klassischen Elektrodynamik erzeugt eine rotierende elektrische Ladung — z.B. in einer Stromschleife — ein magnetisches Feld gleich dem eines magnetischen Dipols $\vec{\mu}$. Ähnlich wird in der Quantenmechanik mit der Rotation einer Ladung — genauer, mit dem zugehörigen Bahndrehimpulsoperator $\hat{L}$ — ein magnetisches Dipolmoment $\hat{\mu}_L$ assoziiert, das proportional zu $\hat{L}$ ist.

Neben dem Bahndrehimpuls existiert in der Quantenmechanik ein weiterer Drehimpuls, und zwar der Spin $\hat{S}$, zu dem ebenfalls ein magnetisches Dipolmoment $\hat{\mu}_S$ zugeordnet wird. Das gesamte magnetische Dipolmoment wird dann durch die Kopplung von $\hat{\mu}_L$ und $\hat{\mu}_S$ gegeben:

$$\hat{\mu} \equiv \hat{\mu}_L + \hat{\mu}_S. \quad (\text{I.31})$$

Die typische Größenordnung eines Drehimpulses bzw. eines magnetischen Dipolmoments in der Kernphysik ist $\hbar$ bzw. das sog. *Kernmagneton*^(xxviii)

$$\mu_N \equiv \frac{e\hbar}{2m_p} = 3,15 \cdot 10^{-14} \text{ MeV T}^{-1}, \quad (\text{I.32})$$

⁽¹⁸⁾ Wenn die Gestalt des Kerns durch ein Umdrehungsellipsoid dargestellt wird, ist diese z -Achse eine der Hauptachsen des Ellipsoids. Im Hauptachsensystem verschwinden dann die nicht-diagonalen Komponenten des elektrischen Quadrupolmoments, während $Q_{xx} = Q_{yy} = -Q_{zz}/2$.

^(xxviii) nuclear magneton

wobei e bzw. m_p die Elementarladung bzw. die Masse des Protons bezeichnet. μ_N ist gleich dem Wert des magnetischen Dipolmoments für ein mit dem Drehimpuls $\hbar$ rotierendes Proton bei klassischer Rechnung.

Mithilfe des Kernmagnetons lassen sich die mit dem Bahndrehimpuls und dem Spin assoziierten magnetischen Dipolmomente als

$$\hat{\mu}_L \equiv g_L \mu_N \frac{\hat{L}}{\hbar}, \quad \hat{\mu}_S \equiv g_S \mu_N \frac{\hat{S}}{\hbar} \quad (\text{I.33})$$

schreiben, wobei die Landé^(ab)-Faktoren g_L und g_S Zahlen von der Größenordnung 1 sind. Im allgemeinen Fall ist $g_L \neq g_S$, sodass das magnetische Dipolmoment $\hat{\mu}$ nicht parallel zum Gesamtdrehimpuls $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ ist. Wichtig ist aber nur die Komponente des Dipolmoments entlang der Richtung von $\hat{J}$. Im Fall eines Atomkerns ist somit der (messbare) Wert μ_{Kern} des magnetischen Dipolmoments durch die Gleichung

$$\langle \hat{\mu} \cdot \hat{J}_{\text{Kern}} \rangle \equiv \mu_{\text{Kern}} \frac{\langle \hat{J}_{\text{Kern}}^2 \rangle}{j\hbar} = \mu_{\text{Kern}}(j+1)\hbar. \quad (\text{I.34})$$

definiert. Dabei ist j die mit dem Betragsquadrat $\hat{J}_{\text{Kern}}^2$ des Gesamtdrehimpulses assoziierte Quantenzahl (vgl. Anhang A), während $\langle \cdot \rangle$ den Erwartungswert von Operatoren bezeichnet.

Die Begründung der auf erster Sicht überraschenden Definition (I.34) ist, dass nur die Projektion von $\hat{\mu}$ auf $\hat{J}_{\text{Kern}}$ beobachtbar ist.

In der Tat bleibt der Erwartungswert von $\hat{\mu}$ nicht konstant in der Bewegung, sondern nur der von $\hat{J}_{\text{Kern}}$. Genauer sind das Betragsquadrat $\hat{J}_{\text{Kern}}^2$ und die Komponente $\hat{J}_{\text{Kern},z}$ entlang einer Richtung — konventionell der z -Achse — Operatoren, die mit dem Hamilton-Operator des Kerns kommutieren, so dass die zugehörigen Erwartungswerte Erhaltungsgrößen sind. Daher kann nur die z -Komponente $\hat{\mu}_z$ von Relevanz sein.

Manchmal wird anstatt Gl. (I.34) einfacher

$$\langle \hat{\mu}_z \rangle \equiv \mu_{\text{Kern}} \frac{\langle \hat{J}_{\text{Kern},z} \rangle}{j\hbar}, \quad (\text{I.35})$$

geschrieben, wobei j wieder die mit $\hat{J}_{\text{Kern}}^2$ assoziierte Quantenzahl ist, woraus sich in Analogie mit Gl. (I.33) $\mu_{\text{Kern}} = g_{\text{Kern}} \mu_N j$ ergibt. Eigentlich muss aber der Erwartungswert im Zähler von Gl. (I.35) für den Zustand mit maximaler „magnetischer“ Quantenzahl $m_j = j$ betrachtet werden, damit die Gleichung wirklich äquivalent zur Definition (I.34) sei.

Kernspinresonanz

In Anwesenheit eines Magnetfeldes $\vec{\mathcal{B}}_0$ liegt der Kernspin $\vec{J}_{\text{Kern}}$ längs der Richtung des Feldes. Die magnetische potentielle Energie des Kerns ist dann durch den Erwartungswert von $-\hat{\mu} \cdot \vec{\mathcal{B}}_0$ gegeben, d.h. laut Gl. (I.34) für einen Zustand mit der magnetischen Quantenzahl m_j , wobei $-j \leq m_j \leq j$, durch

$$E_{\text{mag.}} = -\langle \hat{\mu} \cdot \vec{\mathcal{B}}_0 \rangle = -\mu_{\text{Kern}} \frac{m_j}{j} |\vec{\mathcal{B}}_0|.$$

Im Magnetfeld gibt es somit $2j+1$ äquidistante Energieniveaus, zwischen denen ein senkrechtes zu $\vec{\mathcal{B}}_0$ oszillierendes Magnetfeld $\vec{B}_1$ periodische Übergänge induzieren kann, vorausgesetzt dessen Frequenz ω genau abgestimmt ist, und zwar für den Übergang zwischen zwei Nachbarniveaus, auf der Larmor^(ac)-Frequenz $\nu_L = \omega_L/(2\pi)$ mit

$$\omega_L = \frac{\mu_{\text{Kern}} |\vec{\mathcal{B}}_0|}{j\hbar}. \quad (\text{I.36})$$

^(ab)A. LANDÉ, 1888–1976 ^(ac)J. LARMOR, 1857–1952

Bei dieser (Kreis)Frequenz findet in der Übergangswahrscheinlichkeit eine Resonanz statt,⁽¹⁹⁾ die sog. *Kernspinresonanz*^(xxix) die viele Anwendungen in der Physik, der Chemie und der Biologie hat, wie z.B.:

- präzise Bestimmungen des Werts des magnetischen Dipolmoments in einem bekannten Magnetfeld $\vec{\mathcal{B}}_0$ (I. Rabi^(ad) 1938; F. Bloch^(ae) und E. M. Purcell^(af) 1946);
- bei bekanntem μ_{Kern} , präzise Messungen des Magnetfelds $|\vec{\mathcal{B}}_0|$, um welches der Kern präzediert, und dadurch Ermittlung der Umgebung (chemische Bindungen und Zusammensetzung) dieses Kernels: dabei handelt es sich um das Grundprinzip der *Magnetresonanztomographie* (MRT)^(xxx) bzw. *Kernspintomographie* als zerstörungsfreies bildgebendes Verfahren in der Medizin (P. Lauterbur^(ag) 1971; P. Mansfield^(ah)).



⁽¹⁹⁾ Im klassischen Bild ist dies die Frequenz der Präzession des magnetischen Dipolmoments $\vec{\mu}$ um die Richtung des Magnetfelds $\vec{\mathcal{B}}_0$.

^(xxix) nuclear magnetic resonance (NMR) ^(xxx) magnetic resonance imaging (MRI)

^(ad) I. I. RABI, 1898–1988 ^(ae) F. BLOCH 1905–1983 ^(af) E. M. PURCELL, 1912–1997 ^(ag) P. LAUTERBUR, 1929–2007

^(ah) P. MANSFIELD, 1933–2017