

Theoretische Kernphysik

Prof. Dr. Herbert Müther

INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
Auf der Morgenstelle 14
72076 Tübingen

herbert.muether@uni-tuebingen.de

Sommersemester 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Kollektive Modelle	1
1.1	Massenzahl und Bindungsenergie	1
1.1.1	Das Tröpfchenmodell der Kernphysik	4
1.2	Kollektive Parameter	11
1.3	Hamiltonoperator für Kollektive Anregungen	18
1.3.1	Vibrationen um das sphärische Gleichgewicht	20
1.4	Bohr - Mottelson Modell	24
2	Das Schalenmodell der Atomkerne	29
2.1	Magische Zahlen	29
2.2	Valenznukleonen, Isospin	37
2.2.1	Magnetische Momente	41
2.3	Zwei Nukleonen in der Valenzschale	44
2.4	Systeme mit vielen Valenznukleonen	49
2.4.1	Schalenmodell ohne Rumpfkern	51
2.4.2	Diagonalisation von Matrizen	54
3	Hartree - Fock und mehr	59
3.1	Hartree - Fock in der Kernphysik	59
3.2	Kernmaterie und Neutronensterne	66
3.2.1	Neutronensterne	69
3.3	Skyrme Ansatz der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung	77
3.4	Walecka Modell der Kernmaterie	85
3.4.1	Feldtheorie für "Dummies"	85
3.4.2	Diracteilchen	88

3.5	Relativistische Feldtheorie für endliche Kerne	95
3.5.1	Greensche Funktion für Mesonenfelder	95
3.5.2	Dirac Gleichung für endliche Systeme	97
3.6	TDA und RPA	104
3.6.1	Random Phase Approximation	110
3.7	Quasiteilchen und BCS Theorie	115
3.7.1	Teilchenzahlprojektion	123
3.8	Generator Koordinaten Methode	125
3.8.1	Deformierte Kerne	125
3.8.2	Vibrationen	128
3.8.3	Drehimpulsprojektion	132
4	Realistische NN Wechselwirkungen	137
4.1	Realistische Kernkräfte	137
4.2	Kernstruktur mit realistischen Wechselwirkungen	146

Kapitel 1

Kollektive Modelle

1.1 Massenzahl und Bindungsenergie

Ein Atomkern besteht aus Nukleonen, den positiv geladenen Protonen und den elektrisch neutralen Neutronen. Er ist also eindeutig gekennzeichnet durch die Angabe der

- Zahl der Protonen, die auch häufig Kernladungszahl genannt wird. Wir werden diese Kernladungszahl in der Regel mit Z bezeichnen.
- Zahl der Neutronen, die wir in der Regel mit N bezeichnen werden.
- Alternativ kann man natürlich die Gesamtzahl der Nukleonen

$$A = Z + N, \quad (1.1.1)$$

introduzieren und den Atomkern durch die Angabe von A und Z bzw. durch die Angabe von A und N charakterisieren.

Damit das Atom insgesamt elektrisch neutral ist, muss es bei einem Atomkern mit Z Protonen auch Z Elektronen besitzen. Die chemischen Eigenschaften eines Atoms sind durch die Elektronenhülle definiert. Deshalb unterscheidet man auch die verschiedenen Elemente nach der Zahl Z der Protonen beziehungsweise Elektronen.

So besitzt z.B. das Element Sauerstoff (chemische Bezeichnung O) jeweils 8 Elektronen und hat damit auch die Kernladungszahl $Z = 8$. Zum Element Sauerstoff gibt es aber Atomkerne mit ganz unterschiedlicher Anzahl von Neutronen. Man unterscheidet diese unterschiedlichen Atomkerne des gleichen Elementes häufig dadurch, dass man die Nukleonenzahl A als einen oberen Index zur Elementbezeichnung hinzufügt. So bezeichnen etwa

$${}^{16}O, \quad {}^{17}O \quad \text{und} \quad {}^{18}O \quad (1.1.2)$$

die Atomkerne des Sauerstoffs mit einer Nukleonenzahl A von 16, 17 und 18, beziehungsweise einer Neutronenzahl von 8, 9 und 10.

Atomkerne des gleichen chemischen Elementes, also mit gleichem Z aber unterschiedlicher Neutronenzahl bezeichnet man als **Isotope**. Die Beispiele von (1.1.2) bezeichnen also unterschiedliche Isotope des Elementes Sauerstoff mit $Z = 8$.

Analog bezeichnet man verschiedene Atomkerne mit gleicher Zahl von Neutronen als **Isotone**. So sind z.B. die Atomkerne von

$${}^{16}\text{O}, \quad {}^{17}\text{F} \quad \text{und} \quad {}^{18}\text{Ne} \quad (1.1.3)$$

Isotone mit der gemeinsamen Neutronenzahl $N = 8$, die sich durch die jeweiligen Kernladungszahlen unterscheiden: $Z = 8$ für Sauerstoff (O), $Z = 9$ für Fluor (F) und $Z = 10$ für Neon (Ne).

Schließlich gibt es auch den Begriff der **Isobare**. Damit bezeichnet man verschiedene Atomkerne mit identischer Gesamtnukleonenzahl. So sind also in unseren Beispielen ${}^{17}\text{O}$ und ${}^{17}\text{F}$ Isobare zu $A = 17$ und ${}^{18}\text{O}$ und ${}^{18}\text{Ne}$ Isobare zu $A = 18$.

Es gibt verschiedene Methoden für die experimentelle Bestimmung der Masse eines Atoms. Nach der Relativitätstheorie ist diese Masse $M(A, Z)$ verknüpft mit der Ruheenergie dieses Atoms über die Beziehung

$$\begin{aligned} E_{\text{Ruhe}}(A, Z) &= M(A, Z)c^2 \\ &= [Z(M_p + m_e) + (A - Z)M_n]c^2 + \Delta E(A, Z). \end{aligned} \quad (1.1.4)$$

In der zweiten Zeile dieser Gleichung haben wir die Gesamtenergie aufgeteilt in die Beiträge durch die Ruheenergien der Konstituenten, also der Protonen, Elektronen und Neutronen und einer Restenergie $\Delta E(A, Z)$.

Die Massen der Protonen M_p , der Neutronen M_n und der Elektronen m_e sind experimentell sehr genau bekannt und gegeben durch

$$\begin{aligned} M_p &= 938.272 \text{ MeV}/c^2 = 1.67262 \cdot 10^{-27} \text{ kg}, \\ M_n &= 939.565 \text{ MeV}/c^2 = 1.67492 \cdot 10^{-27} \text{ kg}, \\ m_e &= 0.511 \text{ MeV}/c^2 = 0.911 \cdot 10^{-30} \text{ kg}. \end{aligned} \quad (1.1.5)$$

Die Masse eines Atoms ist geringer als die Masse der Konstituenten, die Natur gewinnt Energie dadurch, dass sich die Nukleonen zu einem Atomkern verbinden. Dieser Energiegewinn wird in (1.1.4) durch die negative Energie $\Delta E(A, Z)$ dargestellt.¹ Den Betrag dieses Energiegewinns bezeichnet man als **Bindungsenergie** des Atomkerns mit A Nukleonen und Z Protonen.

¹Genau genommen enthält dieses $\Delta E(A, Z)$ auch den Energiegewinn durch die Bindung der Elektronen an den Atomkern. Wir werden aber sehen, dass dieser Beitrag aus der Atomphysik, der ja in der Größenordnung von einigen eV liegt, im Vergleich zu den Energiegewinnen aus der Bindungsenergie des Kerns von mehreren MeV vernachlässigbar ist.

Alternativ zur Darstellung in (1.1.4) gibt man die Ruheenergie eines Atoms auch häufig mit Bezug auf die **atomare Masseneinheit** u an in der Form

$$E_{\text{Ruhe}}(A, Z) = A u c^2 + \delta E(A, Z), \quad (1.1.6)$$

an. Die atomare Masseneinheit ist ein zwölftel der Atommasse des Kohlenstoffisotops ^{12}C

$$u = \frac{1}{12} E_{\text{Ruhe}}(A = 12, Z = 6) = 931.481 \text{ MeV}/c^2 = 1.66043 \cdot 10^{-27} \text{ kg}. \quad (1.1.7)$$

Die Größe $\delta E(A, Z)$ in (1.1.6) bezeichnet man als Massenüberschuss oder “Mass Excess”.

Ein weitere Grundinformation über den Atomkern ist seine Ausdehnung, also der Radius der Dichteverteilung der Nukleonen. Diese Information ist unter anderem durch die elastische Streuung von Elektronen zu erhalten. Die Elektronen wechselwirken, wenn man von der magnetischen Wechselwirkung absieht, mit der Ladungsverteilung der Protonen im Atomkern. In der Bornschen Näherung für die Streutheorie ergibt sich der differentielle Wirkungsquerschnitt an einer Ladungsverteilung aus dem Produkt des Wirkungsquerschnitts an einer Punktladung mit der entsprechenden Gesamtladung Ze , das ist im Fall der Elektronenstreuung der Mott'sche Wirkungsquerschnitt, und dem Quadrat des Formfaktors $F(q)$ (siehe z.B. Quantenmechanik II)

$$\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| = \left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{Mott}} F^2(\vec{q}). \quad (1.1.8)$$

Der Formfaktor $F(q)$ hängt ab von dem Impulstransfer \vec{q} , das ist die Differenz zwischen Impuls des einlaufenden Elektrons \vec{p}_i und dem Impuls des gestreuten Elektrons \vec{p}_f

$$\vec{q} = \vec{p}_i - \vec{p}_f.$$

Im Fall der elastischen Streuung gilt für den Betrag der Impulse $|\vec{p}_i| = |\vec{p}_f| = p$ und der Betrag des Impulstransfers ergibt sich zu

$$\begin{aligned} q^2 &= (\vec{p}_i - \vec{p}_f)^2 \\ &= p_i^2 + p_f^2 - 2p_i p_f \cos \theta \\ &= 2p^2 (1 - \cos \theta) \\ &= 2p^2 \left(2 \sin^2(\theta/2) \right), \end{aligned} \quad (1.1.9)$$

wobei θ den Streuwinkel bezeichnet.

Beschreiben wir die Ladungsverteilung $\rho(\vec{r})$ in der Form

$$\rho(\vec{r}) = Z e f(\vec{r}),$$

so ergibt sich der Formfaktor dieser Ladungsverteilung mit der Fourierttransformation dieser Funktion $f(\vec{r})$, also

$$F(\vec{q}) = \int d^3r e^{i\vec{k}\vec{r}} f(\vec{r}), \quad \text{mit } \vec{q} = \hbar\vec{k}. \quad (1.1.10)$$

Speziell für eine Punktladung ist die Funktion $f(\vec{r})$ die Diracsche Deltafunktion und es gilt

$$f(\vec{r}) = \delta(\vec{r}) \quad \rightarrow \quad F(\vec{q}) = 1, \quad (1.1.11)$$

dass der zugehörige Formfaktor unabhängig vom Impulstransfer gerade gleich eins ist. Die Analysen der Elektronenstreudaten an den verschiedenen Atomkernen liefern eine Faustformel für die Radien mit

$$R = 1.21 A^{1/3} \text{ fm} \quad (1.1.12)$$

Die Tatsache, dass der Radius proportional zu $A^{1/3}$ (mit A der Nukleonenzahl des Kerns) ist, besagt also, dass das Volumen linear mit A ansteigt. Das Volumen pro Nukleon ist eine Konstante, so dass die Nukleonendichte also unabhängig von der Nukleonenzahl ist.

Streng genommen erhalten wir natürlich aus der Elektronenstreuung nur die Information über die Ladungsverteilung. Da die Protonen selbst eine endliche Ausdehnung haben muss das Ergebnis für die Nukleonverteilung entsprechend modifiziert werden.

1.1.1 Das Tröpfchenmodell der Kernphysik

Aus diesen Überlegungen sehen wir, dass man durch die Messung der atomaren Massen die Bindungsenergien oder Massenüberschüsse der Atomkerne bestimmen kann. Diese Bindungsenergien sind daher wohl bekannt. Es gibt verschiedene Versuche, diese vielen experimentellen Werte für die Bindungsenergie der Atomkerne durch eine einfache Parametrisierung darzustellen.

Eine sehr erfolgreiche Parametrisierung dieser Bindungsenergien ist durch die sogenannte **Bethe-Weizsäcker'sche** Massenformel, benannt nach den Physikern Carl Friedrich von Weizsäcker und Hanns Bethe, gegeben. Diese Formel wurde zunächst von Weizsäcker 1935 vorgeschlagen (siehe C.F.v.Weizsäcker, Zeitschrift für Physik 96 (1935) 431) und dann ein Jahr später von Bethe aufgegriffen (H.A.Bethe und R.F.Bacher, Rev. Mod. Phys. 8 (1936) 82) und leicht modifiziert in die Form

$$\Delta E(A, Z) = -a_V A + a_O A^{2/3} + a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} + a_S \frac{(A - 2Z)^2}{4A} + \delta_P \frac{1}{A^{1/2}}. \quad (1.1.13)$$

Diese Parametrisierung enthält 5 Parameter ($a_V, a_O, a_C, a_S, \delta_P$), die an die experimentellen Daten angepasst wurden. Diese Parameter haben sich mit der zunehmenden

Zahl experimenteller Daten immer wieder ein wenig verändert. Wir geben weiter unten Werte an, die aus dem Buch P.Ring und P.Schuck *The Nuclear Many-Body Problem* Springer Verlag (1980) entnommen wurden.

Der Ansatz für diese Parametrisierung ist natürlich nicht willkürlich gewählt sondern basiert auf einer Modellvorstellung, dem **Tröpfchenmodell** der Kernphysik. Wir werden im folgenden dieses Tröpfchenmodell und die Parameter der Bethe-Weizsäcker Formel diskutieren.

- **Der Volumenterm:** Im Tröpfchenmodell geht man davon aus, dass die Wechselwirkung zwischen den Nukleonen eine kurze Reichweite besitzen, ganz analog zur attraktiven van der Waals Wechselwirkung, die die Moleküle einer Flüssigkeit zu einem Tropfen zusammenbindet. Hätte die Wechselwirkung eine Reichweite, die groß ist im Vergleich zur Größe des Atomkerns, so würde die Bindungsenergie proportional zu der Anzahl der wechselwirkenden Nukleonenpaare anwachsen, wäre also proportional zu A^2 . Wegen der kurzen Reichweite ist aber der dominante Beitrag zur Bindungsenergie, der einzige in dieser Entwicklung mit einem negativen Vorzeichen, nur proportional zur Nukleonenzahl A . Man geht also davon aus, dass jedes der Nukleonen nur mit seinen nächsten Nachbarn wechselwirken kann. Der Fit an die experimentellen Daten liefert einen Wert von

$$a_V = 15.67 \text{ MeV} . \quad (1.1.14)$$

- **Der Oberflächenterm:** Die volle Bindung durch die Wechselwirkung mit den Nachbarn erfahren aber nur die Nukleonen, die in der Mitte des Atomkerns ringsherum von Nachbarnukleonen umgeben sind. Die Nukleonen an der Oberfläche haben eine reduzierte Zahl von Nachbarn und deshalb muss die Attraktion des Volumenterms reduziert werden um eine Größe die proportional zur Oberfläche und damit proportional zu R^2 ist. Wegen (1.1.12) ist aber R proportional zu $A^{1/3}$ womit dieser Oberflächenterm die Form

$$a_O A^{2/3} \quad \text{mit} \quad a_O = 17.23 \text{ MeV} , \quad (1.1.15)$$

annimmt. Der Wert für a_O ergibt sich natürlich wieder rein empirisch durch den Fit an die experimentellen Daten.

- **Der Coulombterm:** berücksichtigt die abstoßende Coulombwechselwirkung zwischen den Protonen. Im Rahmen des Tröpfchenmodells sollte diese Abstoßung der Energie einer homogen geladenen Kugel mit der Ladung Ze und dem Radius R entsprechen. Wiederum gilt wegen (1.1.12), dass $R \sim A^{1/3}$ womit der Coulombterm die Form

$$a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} \quad \text{mit} \quad a_C = 0.714 \text{ MeV} , \quad (1.1.16)$$

erfährt.

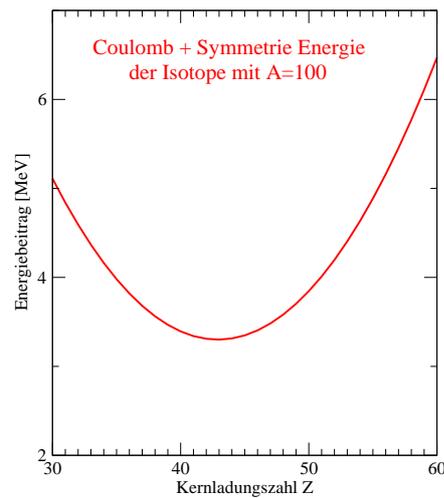


Abbildung 1.1: Beitrag des Coulomb- und des Symmetrieterms in der Bethe-Weizsäcker Formel (1.1.13) zur Energie der Isobare mit $A = 100$.

- **Der Symmetrieterm:** Wie wir noch im Laufe dieses Abschnittes sehen werden, ist es energetisch günstiger, wenn die Zahl der Protonen gleich der Zahl der Neutronen ist. Daraus ergibt sich der Symmetrieterm, der repulsiv ist für $Z \neq N$ und proportional zu $(N - Z)^2$, beziehungsweise wegen (1.1.1) proportional zu $(2A - Z)^2$. Daraus ergibt sich der Symmetrieterm zu

$$a_S \frac{(2A - Z)^2}{4A} \quad \text{mit} \quad a_S = 93.15 \text{ MeV}. \quad (1.1.17)$$

- **Der Paarenergieterm:** Auch auf die Ursachen dieses Paarenergieterms werden wir zu einem späteren Zeitpunkt eingehen. Er liefert eine kleine Korrektur zur Bindungsenergie, die zum Ausdruck bringt, dass es energetisch günstiger ist, wenn alle Protonen zu Paaren gekoppelt werden und wenn ebenso alle Neutronen zu Paaren gekoppelt werden. In diesem Sinne ergibt sich also eine optimale Energie, wenn Z und N gerade Zahlen sind, man spricht dann von einem *gg* Kern. In einem *ug* Kern oder *gu* Kern gibt es jeweils ein ungepaartes Nukleon, was zu einer Reduktion der Bindungsenergie führt. In einem *uu* Kern sind je ein Proton und ein Neutron ungepaart, was zu einer weiteren Reduktion der Bindungsenergie, also dem Betrag von $\Delta E(A, Z)$ führt. Dies wird zum Ausdruck gebracht durch

$$\delta_P = \begin{cases} -11.2 \text{ MeV} & \text{für } gg \text{ Kerne} \\ 0 & \text{für } ug \text{ oder } gu \text{ Kerne} \\ 11.2 \text{ MeV} & \text{für } uu \text{ Kerne.} \end{cases} \quad (1.1.18)$$

Für ein vorgegebenes A ist die Energie der Bethe-Weizsäcker Formel als Funktion von Z durch das Wechselspiel zwischen Coulombterm und Symmetrieterm definiert. Der

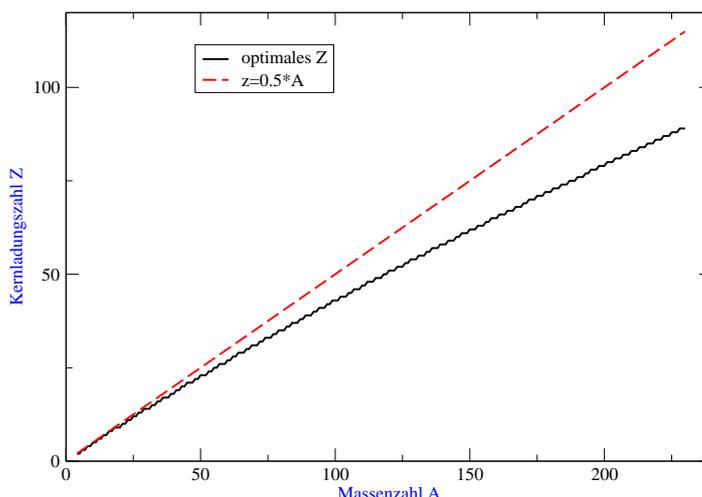


Abbildung 1.2: Die Darstellung der Kernladungszahl Z , bei der die Bethe-Weizsäcker Formel (1.1.13) für gegebenes A maximale Bindungsenergie ergibt.

Coulombterm bringt zum Ausdruck, dass es wegen der Coulombrepulsion energetisch ungünstig ist eine große Protonenzahl Z zu haben. Andererseits sorgt der Symmetrieterm dafür, dass das Verhältnis zwischen Protonen und Neutronen nicht zu sehr aus dem Gleichgewicht gebracht wird.

In Abb. 1.1 sind die Beiträge des Coulomb- und des Symmetrieterms zur Bethe-Weizsäcker Formel für verschiedene Isobare mit $A = 100$ dargestellt. Für diese Nukleonenzahl ergibt sich also ein Minimum in der Energie bei $Z = 43$ (das wäre das Technetium Isotop ^{100}Tc). Die Protonenzahl ist also wegen des Coulombterms deutlich kleiner als die Neutronenzahl. Wiederholt man diese Untersuchung für die verschiedenen Nukleonenzahlen, so ergibt sich eine jeweils optimale Bindungsenergie aus der Bethe-Weizsäcker Formel (unter Vernachlässigung des Paarterms) für ein Z . Dieser Wert ist in Abb. 1.2 dargestellt.

Im einem weiteren Schritt berechnen wir die Bindungsenergie pro Nukleon nach (1.1.13), also den Betrag von ΔE dividiert durch die Nukleonenzahl A als Funktion von A . Dabei wird zu jeder Nukleonenzahl A die Kernladungszahl Z gewählt, für die die Energie minimal also die Bindungsenergie maximal wird. Die Ergebnisse dieser Rechnung und die Beiträge der einzelnen Terme des Tröpfchenmodells sind in Abb. 1.3 dargestellt.

Der Volumenterm würde in dieser Abbildung eine Konstante bei $a_V = 15.67$ MeV liefern, die aber nicht aufgetragen ist. Durch den Oberflächenterm wird die Bindungsenergie vor allen Dingen bei kleinen Werten von A abgesenkt. Der Coulombterm und, da die Coulomb Repulsion dafür sorgt, dass N größer als Z wird, auch der Symmetrieterm liefern eine weitere Reduktion der Bindungsenergie, die insbesondere für große Massenzahlen wichtig wird. Als Folge davon erhält man ein Maximum der Bindungs-

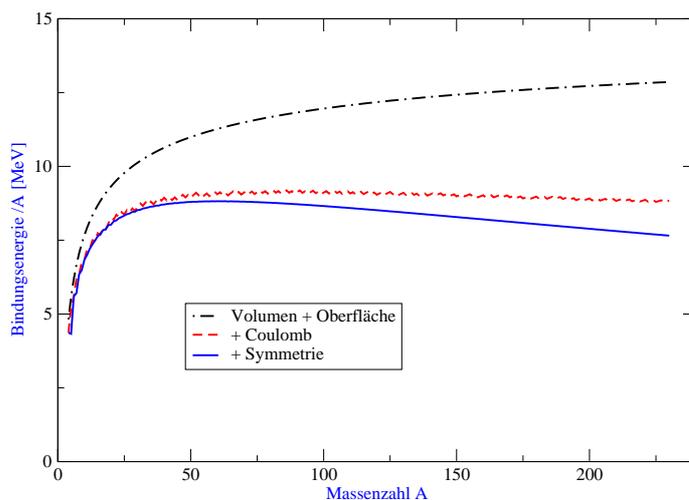


Abbildung 1.3: Bindungsenergie pro Nukleon aus der Bethe-Weizsäcker Formel (1.1.13) als Funktion der Nukleonenzahl A

energie pro Nukleon zwischen $A = 50$ und $A = 60$. In diesem Bereich ergibt sich eine Bindungsenergie von etwa 8.7 MeV pro Nukleon, also ein Wert der deutlich größer ist als die typischen Bindungsenergien der Elektronen in der Hülle.

Wir sehen an diesem Ergebnis aber auch, dass man offensichtlich Energie dadurch gewinnen kann, dass man leichte Atomkerne zu den mittelschweren Kernen im Bereich $A = 60$ fusioniert. Andererseits ergibt sich auch ein Energiegewinn dadurch, dass man schwere Atomkerne in leichte Fragmente spaltet. Wir werden auf diese Aspekte der Kernfusion und Kernspaltung zurückkommen.

Atomkerne mit Massenzahlen von A oberhalb von 240 werden in der Natur nicht beobachtet; sie sind offensichtlich instabil gegenüber einem Zerfall in leichtere Fragmente.

Die in der Natur existierenden Atomkerne und solche, die man inzwischen künstlich erzeugt hat, sind in der Übersicht einer Nuklidkarte in Abb. 1.4 dargestellt. In dieser Nuklidkarte sind Atomkerne aufgetragen mit anwachsender Neutronenzahl N in horizontaler und anwachsender Protonenzahl Z in vertikaler Richtung. Jedes Isotop ist durch ein Kästchen dargestellt, wobei die Farbe des Kästchens ein Maß für die Stabilität beziehungsweise die mittlere Lebensdauer des Isotops darstellt. Dabei bezeichnen schwarze Kästchen Isotope mit einer Lebensdauer, die größer ist als etwa 30 Millionen Jahre, das sind also stabile Isotope. Über die Farben dunkelblau, hellblau zu dunkelgrün verringert sich diese Lebensdauer auf etwa 1 Sekunde. Isotope, die in hellgrün, gelb oder rosa Farben dargestellt sind haben eine kürzere Lebensdauer bis hinunter auf 10^{-15} Sekunden².

²Diese Nuklidkarte und ihre Farbkodierung findet sich im Internet unter der Adresse www.nndc.bnl.gov/nudat2/index.jsp. Sie kann interaktiv vergrößert werden und liefert auch Zahlenwerte zu den Eigenschaften der Isotope. Dies ist ein Service des "National Nuclear Data Centers" des

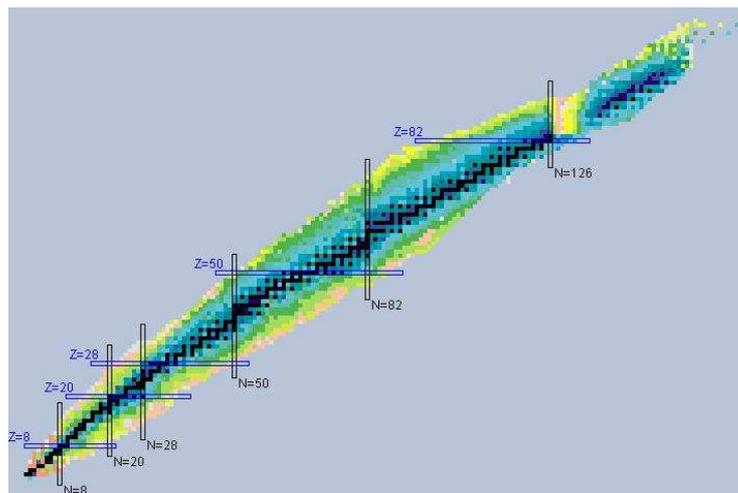


Abbildung 1.4: Nuklidkarte in der Übersicht. Die Isotope sind in einem Farbcode dargestellt, der sich an der Lebensdauer der Isotope orientiert (siehe Text)

Man sieht an dieser Darstellung, dass die stabilen Isotope ein Verhältnis von Z zu N besitzen, das dem der Isotope mit maximaler Bindungsenergie bei vorgegebener Nucleonenzahl entspricht, wie wir es aus der Analyse der Bethe-Weizsäcker Formel in Abb. 1.2 extrahiert haben. Man spricht vom Tal der stabilen Isotope.

Die Nuklidkarte enthält für jedes Isotop neben der Information über die Lebensdauer auch die Angabe des “Mass Excess” (siehe $\delta E(A, Z)$ in (1.1.6)) und die Häufigkeit mit der ein stabiles Isotop aufgefunden wird (“**Abundance**”). Diese Häufigkeit bezeichnet den prozentualen Anteil des spezifischen Isotops an dem gesamten Vorkommen von den verschiedenen Isotopen eines chemischen Elementes. Auf weitere Angaben, die sich in dieser Nuklidkarte finden, werden wir später eingehen.

Zur Klärung der Begriffe wollen wir an dieser Stelle einige Bemerkungen zum radioaktiven Zerfallsgesetz und zu Lebensdauern, Halbwertszeiten etc. machen. Wenn man eine Zahl von Atomkernen vorliegen hat, die mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit ihre Eigenschaften ändern, so spricht man vom radioaktiven Zerfall dieser Isotope. Wir werden die verschiedenen Formen des radioaktiven Zerfalls noch besprechen. Es werden dabei mit der Zeit immer weniger Atomkerne von diesem Typ übrigbleiben. Bezeichnen wir die Zahl der Atomkerne, die zur Zeit t vorliegen, mit $\mathcal{N}(t)$, so ergibt sich für die Änderung dieser Zahl mit der Zeit t der folgende Ausdruck

$$\frac{d\mathcal{N}}{dt} = -\lambda\mathcal{N}(t); \quad (1.1.19)$$

die Zahl der Atomkerne, die in einem Zeitintervall zerfallen ist proportional zu der

Zahl der vorhandene Atomkerne multipliziert mit einer Konstanten λ , die charakteristisch ist für diesen spezifischen Zerfall. Man nennt diese Konstante deshalb auch **Zerfallskonstante**. Die Lösung der Differenzialgleichung (1.1.19) ist sehr einfach und liefert

$$\mathcal{N}(t) = \mathcal{N}_0 e^{-\lambda t} \quad \text{mit} \quad \mathcal{N}_0 = \mathcal{N}(t = 0). \quad (1.1.20)$$

Die Inverse dieser Zerfallskonstante bezeichnet man als Lebensdauer des Isotopes bezüglich des entsprechenden Zerfallprozesses

$$\tau = \frac{1}{\lambda}. \quad (1.1.21)$$

Betrachtet man also zur Zeit $t = 0$ eine Anfangszahl von Atomkernen eines bestimmten Isotopes und wartet dann die Lebensdauer dieses Isotopes ab, so sind zu diesem Zeitpunkt im statistischen Mittel nur noch

$$\mathcal{N}(\tau) = \mathcal{N}_0 e^{-\lambda \tau} = \mathcal{N}_0 e^{-1} = \frac{\mathcal{N}_0}{2.71828...},$$

dieser Kerne intakt. Als **Halbwertszeit** dieses Zerfalls bezeichnet man die Zeit $T_{1/2}$, nach der nur noch die Hälfte der ursprünglichen Atomkerne intakt sind. Es gilt also

$$\frac{\mathcal{N}(T_{1/2})}{\mathcal{N}_0} = e^{-\lambda T_{1/2}} = \frac{1}{2}, \quad (1.1.22)$$

was wiederum bedeutet, dass

$$\ln \frac{1}{2} = -\ln 2 = -\lambda T_{1/2} \quad \rightarrow \quad T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = 0.693... \times \tau. \quad (1.1.23)$$

Durch eine wiederholte Messung der Anzahl der vorhandenen Isotope oder durch eine Bestimmung der **Aktivität der Probe**, also der Zahl der Zerfälle pro Zeiteinheit

$$\mathcal{A} = -\frac{d\mathcal{N}}{dt} = -\lambda \mathcal{N}(t), \quad (1.1.24)$$

kann man die Zerfallskonstante λ und daraus dann die Lebensdauer τ und die Halbwertszeit $T_{1/2}$ experimentell bestimmen.

1.2 Kollektive Parameter

Im kollektiven Model oder Tröpfchenmodell des Atomkerns werden die möglichen Anregungen des Systems durch eine Änderung der Form der Oberfläche beschrieben. Wenn man also davon ausgeht, dass der Atomkern im Grundzustand seine Energie dadurch minimiert, dass die Oberfläche möglichst klein ist³, kann man erwarten, dass der Atomkern im Grundzustand eine kugelförmige Gestalt annimmt. Eine Anregung des Atomkerns ergibt sich also dadurch, dass die Oberfläche um die sphärische Gestalt oszilliert. Damit erhebt sich die Frage, wie man eine solche Änderung der Oberfläche beschreibt. Die Parameter dieser Beschreibung würden dann zu den generalisierten Koordinaten zur Beschreibung der entsprechenden Anregungsmoden.

Die Oberfläche eines konkaven Objekts kann man dadurch beschreiben, dass man in einem Koordinatensystem, dessen Ursprung im Inneren (Zentrum) des Systems liegt, für jede Richtung angibt, bei welchem Abstand vom Koordinatenursprung sich die Oberfläche befindet. Bezeichnet man diesen Abstand mit R , so ist durch die Funktion

$$R(\vartheta, \varphi),$$

diese Oberfläche definiert. Dabei stehen die Variablen ϑ und φ für die entsprechenden Kugelkoordinaten, mit der die Richtung angegeben wird, für die man die Oberfläche berechnet. Mit dieser Darstellung sind kompliziertere Oberflächen, bei denen z.B. ein Strahl aus dem Koordinatenursprung für bestimmte Richtungen die Oberfläche mehr als einmal schneiden würde (etwa eine Oberfläche mit Falten), nicht zu erfassen. Solche Oberflächen würden aber wegen der sehr repulsiven Oberflächenenergie in der Kernphysik erst bei sehr hohen Anregungsenergien zu erwarten sein.

Da die Kugelflächenfunktionen $Y_{\lambda,\mu}$ ein vollständiges Funktionensystem darstellen, kann man eine solche Funktion $R(\vartheta, \varphi)$ in diesem System entwickeln und schreiben:

$$R(\vartheta, \varphi) = R_0 \left[1 + \sum_{\lambda,\mu} \alpha_{\lambda,\mu}^* Y_{\lambda,\mu}(\vartheta, \varphi) \right]. \quad (1.2.25)$$

Dabei nehmen die Summationsindices λ und μ entsprechend den Drehimpulsquantenzahlen die Werte $\lambda = 0, 1, 2, \dots$ und bei gegebenem λ : $\mu = -\lambda, -\lambda + 1, \dots, \lambda$ an. Für jeden Wert von λ , wir sagen für jede **Multipolarität** λ erhält man also in (1.2.25) $(2\lambda + 1)$ komplexe Entwicklungskoeffizienten $\alpha_{\lambda,\mu}^*$.

Zur Erinnerung sollen hier einige Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen aufgelistet werden. Die Kugelflächenfunktionen sind eine Darstellung der Eigenfunktionen der Drehimpulsoperatoren \hat{L}^2 und \hat{L}_z

$$\hat{L}^2|\lambda\mu\rangle = \hbar^2\lambda(\lambda+1)|\lambda\mu\rangle \quad \text{und} \quad \hat{L}_z|\lambda\mu\rangle = \hbar\mu|\lambda\mu\rangle$$

³Dies ist plausibel, da ja der Oberflächenterm in der Massenformel repulsiv ist

	$\mu = 0$	$\mu = \pm 1$	$\mu = \pm 2$	$\mu = \pm 3$
$\lambda = 0$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$			
$\lambda = 1$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$	$\mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta$		
$\lambda = 2$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$	$\mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta$	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin^2 \vartheta$	
$\lambda = 3$	$\sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$	$\mp \sqrt{\frac{21}{64\pi}} (4 \cos^2 \vartheta \sin \vartheta - \sin^3 \vartheta)$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \cos \vartheta \sin^2 \vartheta$	$\mp \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \vartheta$

Tabelle 1.1: Explizite Darstellung der Legendrefunktion $P_{\lambda\mu}(\vartheta)$

mit ganzzahligen Eigenwerten $\lambda = 0, 1, \dots$ und für jedes λ , $\mu = -\lambda, -\lambda + 1, \dots, \lambda$, in der Ortsdarstellung, gegeben durch die Winkel ϑ und φ in den Kugelkoordinaten des betrachteten Teilchens. Es gilt also:

$$Y_{\lambda\mu}(\vartheta, \varphi) = \langle \hat{e}_r | \lambda\mu \rangle .$$

Die explizite Darstellung dieser Kugelflächenfunktionen ergibt sich als Produkt

$$Y_{\lambda\mu}(\vartheta, \varphi) = P_{\lambda\mu}(\vartheta) e^{i\mu\varphi}$$

mit den Legendrefunktionen $P_{\lambda\mu}(\vartheta)$. Für den Fall $\mu = 0$ sind die Legendrefunktionen bis auf einen Normierungsfaktor identisch mit den sogenannten Legendrepolyomen \tilde{P}_λ

$$P_{\lambda\mu}(\vartheta) = \frac{1}{2\pi} \tilde{P}_\lambda(\cos \vartheta)$$

die als Polynome vom Grad λ des $\cos \vartheta$ geschrieben werden können. Beispiele für die explizite Darstellung der Legendrefunktionen für $\lambda \leq 3$ sind in der Tabelle 1.1 aufgelistet.

Welche Eigenschaften müssen diese Entwicklungskoeffizienten besitzen? Als erstes ist klar, dass die Darstellung (1.2.25) das Ergebnis $R(\vartheta, \varphi) = R_0$ liefert, wenn alle Koeffizienten $\alpha_{\lambda,\mu}^*$ den Wert null annehmen. In diesem Fall gleicht die Oberfläche des Atomkerns dem einer Kugel mit dem Radius R_0 .

Weiter kann man sich leicht davon überzeugen, dass die Parameter $\alpha_{\lambda,\mu}$ für ein vorgegebenes λ sich verhalten wie die Komponenten eines sphärischen Tensors vom Rang λ . Was bedeutet diese Aussage?

Aus der Quantenmechanik wissen wir, wie sich ein Eigenzustand zu den Drehimpulsoperatoren \hat{L}^2 und \hat{L}_z unter einer Drehung verhält. Die Drehung eines solchen Zustandes

um die Eulerwinkel α, β, γ wird beschrieben durch den Rotationsoperator

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) = \hat{R}_z(\gamma)\hat{R}_y(\beta)\hat{R}_z(\alpha) \quad (1.2.26)$$

wobei z.B. $\hat{R}_z(\gamma)$ eine Drehung des Systems um die z -Achse mit dem Winkel γ beschreibt durch

$$\hat{R}_z(\gamma) = \exp\left(-\gamma\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\right). \quad (1.2.27)$$

Entsprechendes gilt für die anderen Operatoren in (1.2.26)⁴. Eine solche Drehung eines Systems entspricht einer Drehung des Koordinatensystems (bei festgehaltenem Zustand) um die konjugierten Eulerwinkel. Betrachten wir jetzt einen Eigenzustand zu \hat{L}^2 und \hat{L}_z mit den Eigenwerten l und m , $|lm\rangle$, so ergibt sich für den gedrehten Zustand

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)|lm\rangle = \sum_{l',m'} |l'm'\rangle \underbrace{\langle l'm'|\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)|lm\rangle}_{=\delta_{l'l}D_{m'm}^l(\alpha, \beta, \gamma)}. \quad (1.2.28)$$

Auf der rechten Seite dieser Gleichung wurde eine Eins eingefügt in der Form $1 = \sum_{l',m'} |l'm'\rangle \langle l'm'|$. Da der Rotationsoperator definiert ist durch die generierenden Operatoren \hat{L}_z und \hat{L}_y , die beide mit \hat{L}^2 kommutieren, kommutiert auch \hat{R} mit \hat{L}^2 . Dies bedeutet aber, dass \hat{R} angewandt auf $|lm\rangle$ einen Zustand mit dem gleichen Eigenwert zu \hat{L}^2 liefert, also \hat{R} nur dann nicht verschwindende Matrixelemente vom Typ der Gleichung (1.2.28) besitzt mit $l' = l$, was durch das Kronecker Symbol $\delta_{l'l}$ in dieser Gleichung zum Ausdruck gebracht wird.

Damit können wir für die allgemeinen Matrixelemente des Rotationsoperators schreiben

$$\begin{aligned} D_{m'm}^l(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle lm' | e^{-i\gamma\hat{L}_z/\hbar} e^{-i\beta\hat{L}_y/\hbar} e^{-i\alpha\hat{L}_z/\hbar} | lm \rangle \\ &= e^{i\gamma m'} \langle lm' | e^{-i\beta\hat{L}_y/\hbar} | lm \rangle e^{-i\alpha m} \\ &= e^{i(\gamma m' - \alpha m)} d_{m'm}^l(\beta). \end{aligned} \quad (1.2.29)$$

In dieser letzten Gleichung wurden die sogenannten **Wigner d-Funktionen** eingeführt, die den nichttrivialen Anteil der Matrixelemente für den allgemeinen Drehoperator liefern.

Ein sphärischer Tensor vom Rang l ist nun dadurch definiert, dass er $(2l + 1)$ Komponenten enthält, die sich bei Anwendung des Rotationsoperators genau so transformieren wie die Drehimpulseigenfunktionen in (1.2.28), also

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)|lm\rangle = \sum_{m'} D_{m'm}^l(\alpha, \beta, \gamma)|lm'\rangle. \quad (1.2.30)$$

In der Nomenklatur der Quantenmechanik kann man die Entwicklung für die Abweichung von R_0 in (1.2.25) darstellen in der Form

$$|\Psi\rangle = \sum_{\lambda, \mu} |\lambda\mu\rangle \langle \lambda\mu | \Psi \rangle.$$

⁴siehe z.B. H. Mütter: Skriptum zur Vorlesung Quantenmechanik I

Der Wert der Funktion in einer bestimmten Richtung ergibt sich dann durch Multiplikation dieser Gleichung mit einem Eigenzustand $\hat{e}_r >$ für die radiale Richtung, die im gewählten Koordinatensystem durch die Winkel ϑ und φ gegeben ist und man erhält

$$\begin{aligned} R(\vartheta, \varphi) &= \langle \hat{e}_r | \Psi \rangle \\ &= \sum_{\lambda, \mu} \langle \hat{e}_r | \lambda \mu \rangle \langle \lambda \mu | \Psi \rangle \\ &= \sum_{\lambda, \mu} Y_{\lambda, \mu}(\vartheta, \varphi) \alpha_{\lambda, \mu}^* . \end{aligned}$$

Die komplex konjugierten Entwicklungskoeffizienten

$$\alpha_{\lambda, \mu} = \langle \Psi | \lambda \mu \rangle$$

transformieren sich bei einer entsprechenden Drehung des Koordinatensystems wie die Zustände $|\lambda \mu \rangle$ und bilden daher definitionsgemäß die Komponenten eines sphärischen Tensors vom Rang λ . Wir werden diese Eigenschaft noch ausnutzen.

Die Werte für die Funktion $R(\vartheta, \varphi)$ müssen natürlich reell sein. Dies bedeutet, dass

$$\begin{aligned} \sum_{\mu} \alpha_{\lambda, \mu}^* Y_{\lambda, \mu}(\vartheta, \varphi) &= \left(\sum_{\mu} \alpha_{\lambda, \mu}^* Y_{\lambda, \mu}(\vartheta, \varphi) \right)^* \\ &= \sum_{\mu} \alpha_{\lambda, \mu} (-)^{\mu} Y_{\lambda, -\mu}(\vartheta, \varphi) \\ &= \sum_{\mu} \alpha_{\lambda, -\mu} (-)^{-\mu} Y_{\lambda, \mu}(\vartheta, \varphi) . \end{aligned} \quad (1.2.31)$$

Der Schritt von der ersten zur zweiten Zeile erklärt sich durch die Eigenschaft der Kugelflächenfunktion

$$Y_{\lambda, \mu}^*(\vartheta, \varphi) = (-)^{\mu} Y_{\lambda, -\mu}(\vartheta, \varphi) . \quad (1.2.32)$$

Aus dem Vergleich der linken Seite von (1.2.31) mit der letzten Zeile erhält man

$$\alpha_{\lambda, \mu}^* = (-)^{-\mu} \alpha_{\lambda, -\mu} . \quad (1.2.33)$$

Dies impliziert z.B. dass

$$\alpha_{\lambda 0}^* = \alpha_{\lambda 0}$$

also reell sein muss, und die Koeffizienten mit negativem Wert für μ über (1.2.33) aus den entsprechenden Koeffizienten mit positivem μ bestimmt werden können. Die Anzahl der freien Parameter $\alpha_{\lambda, \mu}^*$ reduziert sich also auf $(2\lambda + 1)$ reelle Zahlen.

Betrachten wir im folgenden verschiedene Multipolaritäten λ in der Entwicklung von (1.2.25). Die niedrigste Multipolarität $\lambda = 0$ führt wegen $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$ auf

$$R = R_0 \left[1 + \alpha_{00} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \right] ,$$

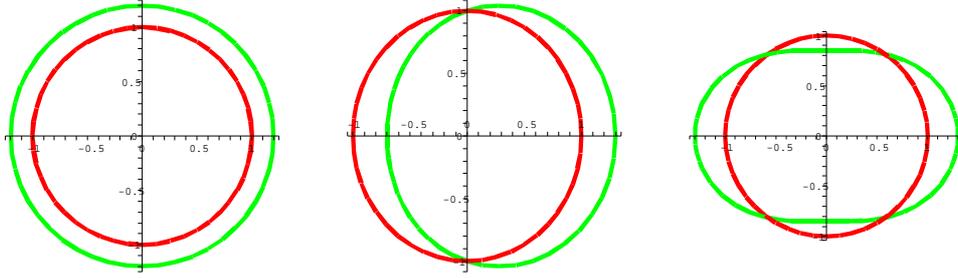


Abbildung 1.5: *Multipolanregungen der Dichteverteilung, Monopol- (links), Dipol- (Mitte) und Quadrupolanregungen (rechts).*

auf eine, je nach Vorzeichen des reellen Parameters α_{00} , Vergrößerung bzw. Verkleinerung des Radius der kugelförmigen Dichteverteilung (siehe linkes Teilbild in Figur 1.5). Die entsprechende Schwingung mit einem zeitlich oszillierenden Wert von $\alpha_{00}(t)$ entspricht also einer Dichteverteilung deren Radius um den Mittelwert R_0 schwingt mit einer entsprechend oszillierenden mittleren Dichte $\rho_0(t)$. In der Literatur trägt diese Monopolschwingung ($\lambda = 0$) den Namen *breathing mode*. Es zeigt sich aber, dass die Kernmaterie sehr steif im Bezug auf eine solche Dichteoszillation ist und die Anregungsenergien solcher breathing mode Zustände in der Größenordnung von etwa 20 MeV, also sehr hoch liegen. Deshalb bezeichnet man die Kernmaterie auch als eine *inkompressible Quantenflüssigkeit*.

Für die Dipolmoden mit $\lambda = 1$ betrachten wir zunächst einmal den Fall $\mu = 0$

$$R = R_0 \left[1 + \alpha_{10} \underbrace{\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta}_{=Y_{10}} \right].$$

Bei einem positiven Wert von α_{10} entspricht diese Änderung der Dichteverteilung also weitgehend einer Verschiebung des Kerns in die Richtung der z -Achse (siehe mittleres Bild in Figur 1.5).⁵ Parametrisiert man den komplexen Parameter α_{11} in der Form

$$\alpha_{11} = ae^{i\chi},$$

so ist wegen (1.2.33)

$$\alpha_{1-1} = -ae^{-i\chi},$$

⁵Dabei vergrößert sich auch das Gesamtvolumen sodass man wegen der Inkompressibilität der Kernmaterie den Parameter R_0 anpassen müsste, um die mittlere Dichte zu erhalten.

und es gilt entsprechend

$$\begin{aligned}
 R &= R_0 \left[1 + \underbrace{ae^{-i\chi}}_{\alpha_{11}^*} \underbrace{\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(-\sin\vartheta)e^{i\varphi}}_{=Y_{11}} + \underbrace{-ae^{i\chi}}_{\alpha_{1-1}^*} \underbrace{\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta e^{-i\varphi}}_{=Y_{1-1}} \right] \\
 &= R_0 \left[1 - 2a\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\cos(\varphi - \chi) \right].
 \end{aligned}$$

Man sieht also, dass es sich hier um eine Verschiebung der Dichteverteilung in eine Richtung der xy Ebene handelt. Insgesamt entsprechen also die 3 Dipolkorrekturen des Radius für $l = 1$ der Dichteverteilung einer Verschiebung des Kerns in eine Raumrichtung. Da es für den Atomkern keinen bevorzugten Platz gibt, man sagt: der Hamiltonoperator, der die Kernstruktur beschreibt ist invariant gegenüber einer Translation also einer Verschiebung des Kerns im Raum, gibt es zu einer solchen Verschiebung auch keine Rückstellkraft, die versucht, den Kern wieder an seinen Ausgangspunkt zurückzuziehen. Dementsprechend gibt es auch keine Anregungsmoden für diese Dipoländerungen in der gesamten Dichteverteilung.

Die Situation ist anders, wenn wir für die Protonen und Neutronen unabhängige Dichteverteilungen annehmen, das Tröpfchenmodell des Atomkerns also erweitern auf eine Proton- und eine Neutronenflüssigkeit. Im Grundzustand des Atomkerns werden beide Dichteverteilungen eine kugelförmige Gestalt mit etwa gleichem Radius annehmen. Man kann sich aber vorstellen, dass ein angeregter Zustand dadurch entsteht, dass die Protonenverteilung sich relativ zu der Verteilung der Neutronen bewegt. Die Protonen könnten also eine Dipolanregung bzw. Verschiebung in die z Richtung erfahren, während die Neutronen entsprechend in die entgegengesetzte Richtung verschoben werden, so dass der Schwerpunkt des gesamten Kernes unverändert bleibt. Da die Protonen und Neutronen sich gegenseitig anziehen, gibt es hier auch eine Rückstellkraft, die dieser Auslenkung entgegenwirkt. Wir werden sehen, dass solche Dipolanregungen, bei denen Protonen und Neutronen in Gegenphase schwingen, in der Natur vorkommen. Allerdings liegen die Anregungsenergien solcher Dipolanregungen wegen der starken Rückstellkraft, die ja auch in der Bedeutung des Symmetrieterms der Bethe-Weizsäcker Massenformel zum Ausdruck kommt, sehr hoch.

Als erste nichttriviale Formänderung der gesamten Kerndichte betrachten wir die $l = 2$ Quadrupolanregungen. Als ein Beispiel ist im rechten Teilbild der Figur 1.5 der Radius für einen reellen und positiven Wert von α_{20} angedeutet. Dabei entspricht die horizontale Achse der z -Achse und die Dichteverteilung ist rotationssymmetrisch um diese z -Achse. Die Dichteverteilung entspricht also ungefähr einem Ellipsoid mit einer Elongation in z -Richtung. Man bezeichnet eine solche Dichteverteilung auch als prolate Deformation, rotationssymmetrisch um die z -Achse.

Insgesamt sind aber die Quadrupoldeformationen der Kernoberfläche durch 5 generalisierte Koordinaten charakterisiert (siehe die Diskussion im Zusammenhang mit

Gl.(1.2.33) für $\lambda = 2$). Dabei benötigen wir 3 Koordinaten, um die Orientierung des deformierten Atomkerns im Raum eindeutig zu definieren. Diese 3 Koordinaten sind z.B. durch die 3 Eulerwinkel gegeben, die die Orientierung des intrinsischen (d.h. bezogen auf den Atomkern körperfesten) Hauptachsensystems eines deformierten Atomkerns relativ zum körperunabhängigen Laborsystem beschreiben. Es verbleiben noch 2 Parameter, die die Deformation des Kerns im Koordinatensystem seiner Hauptträgheitsachsen beschreiben. Es ist üblich, diese Parameter durch 2 dimensionslose Zahlen β und γ zu bezeichnen. Diese Parameter sind mit den Entwicklungskoeffizienten $\alpha_{2\mu}$ aus (1.2.25) verknüpft durch

$$\begin{aligned}\alpha_{20} &= \beta \cos \gamma, \\ \alpha_{21} &= \alpha_{2-1} = 0 \\ \alpha_{22} &= \alpha_{2-2} = \frac{\beta}{\sqrt{2}} \sin \gamma.\end{aligned}\quad (1.2.34)$$

Dabei beziehen sich die $\alpha_{2\mu}$ auf das Hauptachsensystem des Kerns. Eingesetzt in (1.2.25) erhält man eine Kernform definiert durch

$$R(\vartheta, \varphi) = R_0 \left[1 + \beta \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left\{ \cos \gamma (3 \cos^2 \vartheta - 1) + \sqrt{3} \sin \gamma \sin^2 \vartheta \cos(2\varphi) \right\} \right]. \quad (1.2.35)$$

Im Grenzfall $\gamma = 0$ und einem positiven Wert für β entspricht die Deformation also der bereits diskutierten prolaten Deformation mit der z -Achse als Symmetrieachse. Mit zunehmendem Wert von γ wird dieser Ellipsoid in Richtung der Y -Achse gestaucht. Bei dem Grenzwert $\gamma = \pi/3$, was also einem Winkel von 60 Grad entspricht, wird

$$\sin \gamma = \frac{\sqrt{3}}{2} \quad \text{und} \quad \cos \gamma = \frac{1}{2}$$

so dass die Dichteverteilung rotationssymmetrisch um die y -Achse wird und eine leicht diskusförmige oblate Gestalt annimmt.

1.3 Hamiltonoperator für Kollektive Anregungen

Die Physik eines Atomkerns ist natürlich unabhängig von seinem Aufenthaltsort, was bedeutet, dass der zugehörige Hamiltonoperator bei einer Verschiebung des Kerns das gleiche Ergebnis liefert: der Hamiltonoperator ist invariant unter einer Translation. Es gibt aber auch keine bevorzugte Raumrichtung, d.h. der Hamiltonoperator muss auch invariant gegenüber Rotationen sein. Das bedeutet einerseits, dass der Hamiltonoperator ein Skalar, also ein sphärischer Tensor vom Rang $\lambda = 0$ sein muss.

Im letzten Abschnitt wurde bereits diskutiert, dass sich die generalisierten Koordinaten für die Beschreibung der Oberfläche, die Entwicklungskoeffizienten $\alpha_{\lambda\mu}$ in (1.2.25) transformieren wie die Komponenten eines sphärischen Tensors vom Rang λ . Der Hamiltonoperator muss also Kombinationen dieser Tensoren enthalten, die insgesamt einen Skalar bilden.

Sind aber $A_{\lambda\mu}$ und $B_{\lambda'\mu'}$ Komponenten eines sphärischen Tensors vom Rang λ bzw. λ' , so kann man daraus ⁶ die Komponenten eines sphärischen Tensors vom Rang L , C_{LM} , generieren mit

$$C_{LM} = \sum_{\mu, \mu', \mu + \mu' = M} C(\lambda\mu, \lambda'\mu' | LM) A_{\lambda\mu} B_{\lambda'\mu'}. \quad (1.3.36)$$

Dabei stehen $C(\lambda\mu, \lambda'\mu' | LM)$ für die Clebsch Gordan Koeffizienten mit denen 2 Zustände mit Drehimpulsquantenzahlen $\lambda\mu$, bzw. $\lambda'\mu'$ zu einem Gesamtdrehimpuls L mit Projektionsquantenzahl M gekoppelt werden. Diese Konstruktion wird häufig abgekürzt durch die Schreibweise

$$C^{[L]} = [A^{[\lambda]} \times B^{[\lambda']}]^{[L]}. \quad (1.3.37)$$

Will man also aus den Entwicklungskoeffizienten für Quadrupolanregungen $\alpha_{2\mu}$ einen Skalar bilden, so ergibt sich als einfachste Möglichkeit

$$\begin{aligned} [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} &= \sum_{\mu} C(2\mu, 2 - \mu | 00) \alpha_{2\mu} \alpha_{2-\mu} \\ &= \sum_{\mu} \underbrace{(-1)^{\mu} \frac{1}{\sqrt{5}}}_{=C(2\mu, 2-\mu|00)} \alpha_{2\mu} \alpha_{2-\mu} \\ &= \sum_{\mu} (-1)^{\mu} \frac{1}{\sqrt{5}} \alpha_{2\mu} (-1)^{\mu} \alpha_{2\mu}^* \\ &= \frac{1}{\sqrt{5}} \sum_{\mu} |\alpha_{2\mu}|^2. \end{aligned} \quad (1.3.38)$$

Bei dem Übergang zur zweiten Zeile wurden die Werte für die Clebsch Gordan Koeff-

⁶siehe z.B. Skriptum zur Vorlesung Quantenmechanik I

fizienten explizit eingesetzt⁷ und bei dem Übergang von der zweiten zur dritten Zeile, die Bedingung (1.2.33) benutzt.

Der einfachste Ausdruck für die potentielle Energie als Funktion der generalisierten Koordinaten hätte also die Form

$$V = \frac{\sqrt{5}}{2} C \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]} = \frac{C}{2} \sum_{\mu} \alpha_{2\mu}^* \alpha_{2\mu}. \quad (1.3.39)$$

Natürlich kann man auch Terme höherer Ordnung in den Entwicklungskoeffizienten zu einem Skalar zusammenfügen. Das Beispiel dritter Ordnung ist gegeben durch

$$\left[\left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]}.$$

Aber im Grenzfall kleiner Abweichungen von der sphärischen Konfiguration für den Grundzustand ist (1.3.39) der führende Beitrag.

Als nächstes betrachten wir die Operatoren für die zugehörigen Impulsoperatoren $\Pi_{2\mu}$. Wegen der kanonischen Kommutatorrelationen gilt für den Kommutator

$$[\Pi_{2\mu}, \alpha_{2\mu'}] = \frac{\hbar}{i} \delta_{\mu\mu'}. \quad (1.3.40)$$

Dies muss natürlich genau so gelten für Koordinaten $\tilde{\alpha}_{2\mu'}$ und Impulse $\tilde{\Pi}_{2\mu}$, die sich auf ein rotiertes Koordinatensystem beziehen. Dazu nehmen wir jetzt an, dass für die Impulsoperatoren im gedrehten System gilt

$$\tilde{\Pi}_{2\mu} = \sum_{\nu} X_{\mu\nu} \Pi_{2\nu}, \quad (1.3.41)$$

mit Entwicklungskoeffizienten, die noch bestimmt werden müssen. Wir wissen, dass die generalisierten Koordinaten einen sphärischen Tensor bilden, also

$$\tilde{\alpha}_{2\mu} = \sum_{\nu} D_{\mu\nu}^{(2)} \alpha_{2\nu},$$

womit also

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \delta_{\nu\nu'} &= [\tilde{\Pi}_{2\nu}, \tilde{\alpha}_{2\nu'}] \\ &= \sum_{\mu\mu'} X_{\nu\mu} D_{\nu'\mu'}^{(2)} \underbrace{[\Pi_{2\mu}, \alpha_{2\mu'}]}_{=\frac{\hbar}{i} \delta_{\mu\mu'}} \\ &= \frac{\hbar}{i} \sum_{\mu} X_{\nu\mu} D_{\nu'\mu}^{(2)}. \end{aligned}$$

⁷siehe z.B. Igal Talmi: Simple Model of Complex Nuclei, Anhang oder auch die Maple Prozedur, die die explizite Berechnung von Clebsch Gordan Koeffizienten ermöglicht

Dies bedeutet aber, dass

$$X_{\nu\mu} = \left(D_{\nu\mu}^{(2)}\right)^{-1} = \left(D_{\mu\nu}^{(2)}\right)^*,$$

und eingesetzt in (1.3.41)

$$\tilde{\Pi}_{2\mu} = \sum_{\nu} D_{\nu\mu}^{(2)*} \Pi_{2\nu}, \quad (1.3.42)$$

so dass sich die Impulse “fast” wie die Komponenten eines sphärischen Tensors vom Rang 2 verhalten, aber mit kleinen Modifikationen. Außerdem gilt

$$-\frac{\hbar}{i} = [\Pi_{2\nu}, \alpha_{2\nu}]^* = (-1)^\nu [\Pi_{2\nu}^*, \alpha_{2-\nu}] = -[\Pi_{2-\nu}, \alpha_{2-\nu}].$$

Also gilt in Abwandlung von (1.2.33)

$$\Pi_{\lambda,\mu}^* = (-)^{\mu+1} \Pi_{\lambda,-\mu}. \quad (1.3.43)$$

Aber auch hier kann man zeigen, dass

$$\sum_{\mu} \Pi_{2\nu}^* \Pi_{2\nu} \quad (1.3.44)$$

ein skalarer Operator ist.

1.3.1 Vibrationen um das sphärische Gleichgewicht

In diesem Abschnitt wollen wir Atomkerne betrachten, die im Grundzustand ein kugelförmige Gestalt haben und dieser Grundzustand die Drehimpulsquantenzahlen $J = J_z = 0$ besitzt, also nicht entartet ist. Als Anregungsmoden dieser Systeme wollen wir kleine Quadrupolvibrationen der Oberfläche um dieses sphärische Minimum betrachten. Bei kleinen Schwingungen werden die Terme niedrigster Ordnung in den generalisierten Koordinaten und Impulsen dominieren, so dass nach den Vorüberlegungen im vorherigen Abschnitt der Hamiltonoperator für dieses Modell die Gestalt

$$H = \frac{1}{2B} \sum_{\mu} \Pi_{2\mu}^* \Pi_{2\mu} + \frac{C}{2} \sum_{\mu} \alpha_{2\mu}^* \alpha_{2\mu} \quad (1.3.45)$$

annimmt. Dabei sind B und C frei zu wählende Koeffizienten. Dabei wurde die Darstellung so gewählt, um eine Analogie zum Modell des Harmonischen Oszillators aufzubauen, so dass C dem Koeffizienten für die Rückstellkraft entspricht und B in Analogie zur Masse des Oszillators zu sehen ist. Die Eigenwerte und Eigenzustände dieses Hamiltonoperators für das Modell eines *Harmonischen Vibrators* gewinnt man am einfachsten, wenn man die Operatoren für die generalisierten Koordinaten und Impulse durch neue Operatoren b_{μ} und b_{μ}^{\dagger} darstellt in der Form

$$\alpha_{2\mu} = \sqrt{\frac{\hbar}{2B\omega}} \left(b_{\mu}^{\dagger} + (-)^{\mu} b_{-\mu} \right)$$

$$\begin{aligned}\Pi_{2\mu} &= i\sqrt{\frac{\hbar B\omega}{2}} \left((-)^{\mu} b_{-\mu}^{\dagger} - b_{\mu} \right) \\ \text{mit } \omega &= \sqrt{\frac{C}{B}}.\end{aligned}\quad (1.3.46)$$

Die Operatoren b_{μ}^{\dagger} bilden die Komponenten eines sphärischen Tensors vom Rang 2, was dann auch für die Operatoren $(-)^{\mu}b_{-\mu}$ gilt. Dies erkennt man auch daran, dass in der Darstellung (1.3.46) die Summe von b_{μ}^{\dagger} und $(-)^{\mu}b_{-\mu}$ den sphärischen Tensor $\alpha_{2\mu}$ ergeben. Deshalb benutzen wir auch die Notation

$$c_{\mu} = (-)^{\mu}b_{-\mu}. \quad (1.3.47)$$

Außerdem gelten die Kommutatorrelationen

$$\begin{aligned}[b_{\mu}, b_{\nu}] &= [b_{\mu}^{\dagger}, b_{\nu}^{\dagger}] = 0 \\ [b_{\mu}, b_{\nu}^{\dagger}] &= \delta_{\mu\nu}.\end{aligned}\quad (1.3.48)$$

Das sind die Kommutatorrelationen für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren von Bosonen.

Außerdem kann man mit der Definition (1.3.46) und den im ersten Teil dieses Paragraphen hergeleiteten Eigenschaften der $a_{2\mu}$ und $\Pi_{2\mu}$ zeigen, dass der Hamiltonoperator (1.3.45) umgeschrieben werden kann in die Form

$$H = \sum_{\mu} \hbar\omega \left(b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu} + \frac{1}{2} \right). \quad (1.3.49)$$

Als Konsistenztest berechnen wir

$$\begin{aligned}\sum_{\mu} b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu} &\stackrel{(1.3.47)}{=} \sum_{\mu} (-)^{\mu} b_{\mu}^{\dagger} c_{-\mu} \\ &\stackrel{(1.3.38)}{=} \sqrt{5} \sum_{\mu} C(2\mu, 2-\mu|00) b_{\mu}^{\dagger} c_{-\mu} \\ &= \sqrt{5} [b^{\dagger(2)} \times c^{(2)}]^{(0)},\end{aligned}$$

was belegt, dass der Operator in (1.3.49) in der Tat ein sphärischer Tensor vom Rang 0, also ein Skalar ist.

Der Operator (1.3.49) entspricht aber auch dem Hamiltonoperator eines harmonischen Oszillators in 5 Dimensionen μ . Die Eigenzustände sind durch die 5 Quantenzahlen n_{μ} für $\mu = -2, -1, 0, 1, 2$ gekennzeichnet, wobei $n_{\mu} = 0, 1, \dots$ jeweils die Zahl der Oszillatorquanten angibt und die zugehörigen Eigenwerte sind

$$\begin{aligned}E &= \sum_{\mu} \hbar\omega \left(n_{\mu} + \frac{1}{2} \right) \\ &= \hbar\omega \left(N + \frac{5}{2} \right) \quad \text{mit} \quad N = \sum_{\mu} n_{\mu}.\end{aligned}\quad (1.3.50)$$

Der Grundzustand $|0\rangle$ besitzt also den Energieeigenwert $E_0 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ und es gibt 5 Zustände mit der Energie $E_1 = \hbar\omega(1 + \frac{5}{2})$. Der Zustand mit der Anregungsenergie $\Delta E = E_1 - E_0 = \hbar\omega$ ist also 5 fach entartet. Diese Zustände lassen sich darstellen in der Form

$$|\mu\rangle = b_\mu^\dagger |0\rangle. \quad (1.3.51)$$

Da der Grundzustand entsprechend unserer Annahme ein Zustand mit Drehimpuls $J = 0$ sein soll, sich also bei einer Rotation wie ein Skalar transformiert und die b_μ^\dagger die Komponenten eines sphärischen Tensors vom Rang 2 bilden, entsprechen die $|\mu\rangle$ den Zuständen mit einem Drehimpuls $J = 2$ und die Quantenzahl für J_z entspricht μ .

Der nächst höhere Energieeigenwert liegt bei einer Anregungsenergie von $\Delta E = 2\hbar\omega$ und die Zustände können in der Form

$$b_\mu^\dagger b_\nu^\dagger |0\rangle,$$

dargestellt werden. Auf den ersten Blick könnte man meinen, dass es 5 mal 5 also 25 Kombinationen dieser Zustände gibt und deshalb der Entartungsgrad der $2\hbar\omega$ Zustände 25 sei. Wegen der Kommutatorrelationen von (1.3.48) ist aber

$$b_\mu^\dagger b_\nu^\dagger |0\rangle = b_\nu^\dagger b_\mu^\dagger |0\rangle,$$

und es gibt nur 15 unabhängige Zustände bei der Anregungsenergie $2\hbar\omega$. Diese Zustände sind Eigenzustände des Hamiltonoperators, haben aber kein definiertes Transformationsverhalten unter Rotationen, sind also keine Eigenzustände zu den Drehimpulsoperatoren. Dazu bilden wir mit Hilfe der Clebsch Gordan Koeffizienten geeignete Linearkombinationen aus den entarteten Zuständen in der Form

$$\begin{aligned} |JM\rangle &= \sum_{\mu\nu} C(2\mu, 2\nu|JM) b_\mu^\dagger b_\nu^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_{\mu>\nu} C(2\mu, 2\nu|JM) \left(1 + (-)^{2+2-J}\right) b_\mu^\dagger b_\nu^\dagger |0\rangle + \\ &\quad \frac{1}{2} \sum_{\mu} C(2\mu, 2\mu|JM) \left(1 + (-)^{2+2-J}\right) b_\mu^\dagger b_\mu^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (1.3.52)$$

wobei wir bei dem Übergang zur zweiten Zeile die Symmetrieeigenschaft der Clebsch Gordan Koeffizienten

$$C(j_2 m_2, j_1 m_1|JM) = (-)^{j_1+j_2-J} C(j_1 m_1, j_2 m_2|JM) \quad (1.3.53)$$

bei Vertauschung der zu koppelnden Drehimpulse ausgenutzt haben. Man sieht also aus (1.3.52), dass nur von null verschiedene $2\hbar\omega$ (man sagt auch 2-Phononenzustände) existieren mit den geradzahigen Drehimpulsen $J = 0, 2, 4$. Zählt man die Entartungsgerade die Zustände mit verschiedenen J ($J=0:1, J=2:5, J=4:9$), so ergibt sich wieder der Gesamtentartungsgrad 15 der 2-Phononenzustände.

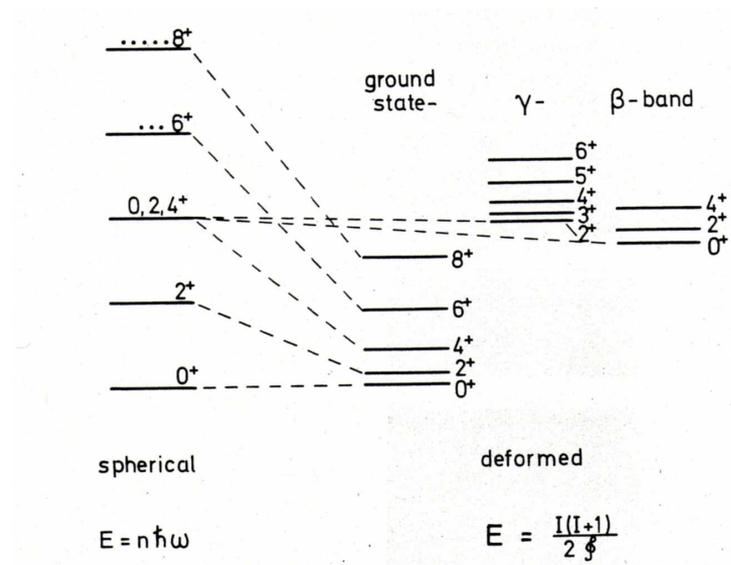


Abbildung 1.6: Schematische Spektren eines "sphärischen Vibrators" (linke Seite) und eines deformierten Kerns mit Rotations und Vibrationsmoden

Mit etwas mehr Aufwand, aber entsprechend kann man auch zeigen, dass es 3 Phononenzustände mit $J = 0, 2, 3, 4$ und $J = 6$ gibt. Das Spektrum eines solchen sphärischen Kerns mit Quadrupolvibrationen sollte also nach diesem Modell die Gestalt, wie sie auf der linken Seite der Figur 1.6 dargestellt ist⁸, annehmen.

⁸Die Abbildung wurde dem Lehrbuch P. Ring, P. Schuck "The Nuclear Many-Body Problem" entnommen

1.4 Bohr - Mottelson Modell

Im letzten Abschnitt haben wir Anregungen eines Atomkerns als kleine Schwingungen der Oberfläche um die sphärische Konfiguration des Grundzustandes beschrieben. Man kann sich aber natürlich auch vorstellen, dass es für bestimmte Atomkerne energetisch günstiger ist, eine deformierte Gestalt anzunehmen⁹ und Anregungen als Vibrationen um diesen deformierten Grundzustand zu beschreiben. Im Prinzip ist es natürlich auch hier möglich, den Hamiltonoperator wie in (1.3.45) in der Form

$$H_{Lab} = \frac{1}{2B} \sum_{\mu} \Pi_{2\mu}^* \Pi_{2\mu} + V(\alpha_{2\mu}) \quad (1.4.54)$$

also als Funktion der generalisierten Koordinaten $\alpha_{2\mu}$ und der entsprechenden Impulse $\Pi_{2\mu}$ zu definieren. Das Problem ist nur, dass die Funktion des Potentials $V(\alpha_{2\mu})$ sich nicht mehr auf den Grenzfall kleiner Schwingungen reduzieren lässt und deshalb eine sehr komplizierte Form annehmen kann. Dies gilt umso mehr, da ja einerseits gewährleistet sein muss, dass der Hamiltonoperator in den Koordinaten des Laborsystems ein Skalar ist, also keine Raumrichtung auszeichnet und ausserdem die generalisierten Koordinaten die Randbedingungen (1.2.33) für reelle Werte der Radiusfunktion erfüllen müssen.

Wir haben aber bereits am Ende des Abschnittes 1.2 diskutiert, dass man die 5 reellen Parameter für beliebige Quadrupoldeformationen darstellen kann durch 2 Deformationsparameter im Hauptachsensystem, nämlich β und γ (siehe (1.2.34)) sowie 3 Eulerwinkel, ϑ_1 , ϑ_2 und ϑ_3 , die die Orientierung des körperfesten Hauptachsensystem, relativ zum Laborsystem beschreiben.

In diesen Koordinaten hätte also der Hamiltonoperator die Form

$$H = T_{rot}(\vartheta_i) + T_{Vib}(\beta, \gamma) + V(\beta, \gamma) \quad (1.4.55)$$

enthält also einen kinetischen Beitrag für die Rotation des deformierten Kerns im Raum, sowie kinetische und potentielle Energie für die intrinsischen Vibrationsfreiheitsgrade β und γ .

Die Wignerschen D-Funktionen, die ja beliebige orthogonale Transformationen von einem körperfesten Systemzustand mit den Drehimpulsquantenzahlen $|IK\rangle$ in das entsprechende Laborsystem $|IM\rangle$ beschreiben

$$D_{MK}^I(\vartheta_i) = \langle IM | \hat{R}(\vartheta_i) | IK \rangle$$

bilden ein vollständiges Funktionensystem für die Variablen der Eulerwinkel und wir schreiben deshalb

$$D_{MK}^I(\vartheta_i) = \langle \vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3 | IMK \rangle$$

⁹Wir werden auf die möglichen Ursachen für die Begünstigung solcher deformierter Atomkerne noch im Rahmen des Schalenmodells des Atomkerns zurückkommen

und entwickeln deshalb den Anteil des Zustandes, der von den Eulerwinkeln abhängt in diesem vollständigen Funktionensystem. Die Zustände $|IMK\rangle$ sind dabei Eigenzustände zum Drehimpulsoperator J^2 , zum Operator J_z , wobei sich die z -Achse auf das Laborsystem bezieht und zum entsprechenden Operator für die z -Achse im körperfesten Hauptachsensystem J_3 mit den Eigenwerten

$$\begin{aligned} J^2|IMK\rangle &= \hbar^2 I(I+1)|IMK\rangle \\ J_z|IMK\rangle &= \hbar M|IMK\rangle \\ J_3|IMK\rangle &= \hbar K|IMK\rangle \end{aligned} \quad (1.4.56)$$

Im Labor können natürlich gleichzeitig nur gemessen werden die Eigenwerte von J^2 und J_z , so dass wir für die Lösung der stationären Schrödingergleichung zum Hamiltonoperator (1.4.55) ansetzen können

$$\langle \vartheta_i \beta \gamma | \Psi_{IM} \rangle = \sum_K g_K(\beta, \gamma) \langle \vartheta_i | IMK \rangle \quad (1.4.57)$$

Zu bestimmen bleiben also nur noch die unbekannt Funktionen $g_K(\beta, \gamma)$. Für den Fall, dass der Kern spiegelsymmetrisch in Bezug auf die körperfeste xy Ebene ist, was bei den hier diskutierten Quadrupoldeformationen der Fall ist, kann man zeigen, dass

$$g_K = (-)^I g_{-K} = (-)^{I+K} g_{-K} \quad (1.4.58)$$

Die Summe in (1.4.57) für gerade Werte von K , insbesondere $K=0$ und $K=2$, was ja auch bereits aus (1.2.34) deutlich wurde.

Die Energie der Eigenzustände für den Hamiltonoperator (1.4.55) mit einem Anteil der Rotationsenergie und einem Anteil für die Vibrationen hat damit die Form

$$\begin{aligned} E_I &= \frac{J^2}{2\Theta} + E_{vib} \\ &= \frac{\hbar^2 I(I+1)}{2\Theta} + E_{vib} \end{aligned} \quad (1.4.59)$$

Dabei wird das Trägheitsmoment natürlich von der intrinsischen Deformation des Kerns abhängen.

Die Situation vereinfacht sich, wenn der Kern axialsymmetrisch deformiert ist, also z.B. in dem Fall, dass $\gamma=0$ und eine prolate Deformation in Richtung der körperfesten z -Achse vorliegt. In diesem Fall liefert eine Drehung um die körperfeste z -Achse keine messbare Änderung des Systems, der Zustand geht in sich selbst über. Dementsprechend kann man sich also in diesem Fall auf die $K=0$ Komponenten in (1.4.57) beschränken. Wegen (1.4.58) gibt es nur für gerade Werte von I von Null verschiedene Lösungen. Man erhält also für die entsprechenden Rotationszustände eine Form, wie sie im rechten Teil der Abbildung 1.6 als Grundzustandsrotationsbande (groundstate) dargestellt ist.

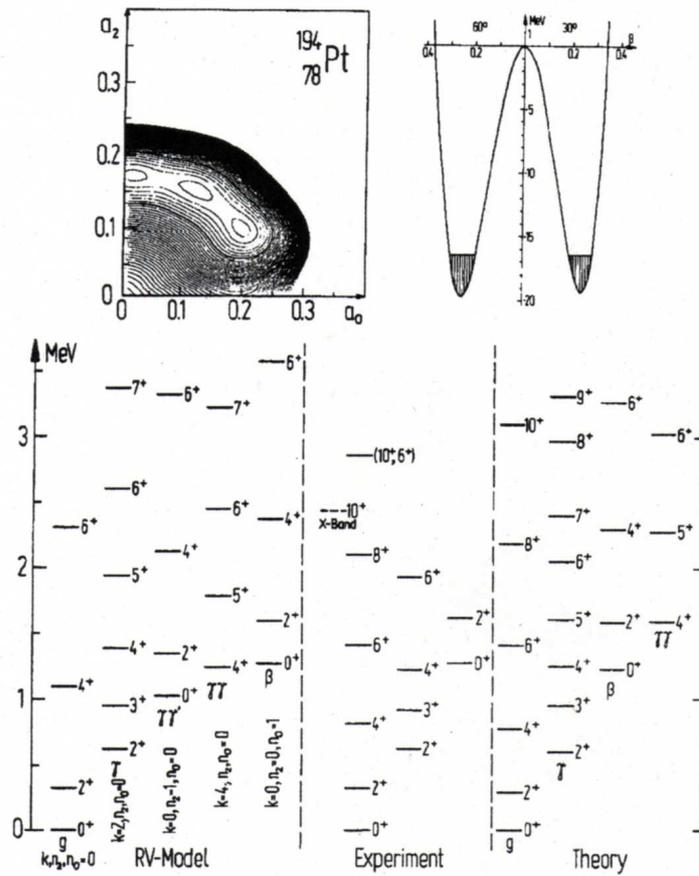


Abbildung 1.7: Darstellung des gemessenen Anregungsspektrums von ^{194}Pt im Vergleich mit theoretischen Modellen

Betrachten wir als nächstes eine Vibrationsanregung des Kerns, bei der die Axialsymmetrie gewahrt bleibt, der Kern, also nur eine β Schwingung vornimmt. In diesem kann man auch aufbauend auf diese β -Schwingung wieder eine $K = 0$ Bande aufbauen mit ausschliesslich geraden Werten für I . Diese Bande, bezeichnet man in der Literatur wie auch in Abb.1.6 als β -Bande.

Erst wenn man auch Vibrationen des γ Freiheitsgrades zulässt, erhält man Rotationsbanden mit $K = 2$, so dass $I \geq K$ ist, aber auch ungerade Werte für I möglich werden. In der schematischen Figur 1.6 sind auch einige Zustände des sphärischen Vibratormodells mit entsprechenden dieses Rotation Vibrationsmodells verknüpft. Anschaulich ist klar, dass mit wachsender Deformation auch das Trägheitsmoment des Kerns ansteigt, sodass die Zustände der Rotationsbanden niedrigere Anregungsenergien aufweisen.

Viele Kernspektren zeigen die Strukturen des Rotations - Vibrationsmodells. Durch An-

passung des Potentials $V(\beta\gamma)$ kann man auch komplizierte Kernspektren sehr genau reproduzieren. Als Beispiel ist in Abbildung 1.7 das experimentell gemessene Spektrum des Atomkerns ^{194}Pt (Mitte), sowie theoretische Rechnungen rechts und links davon dargestellt. Im oberen Teil dieser Abbildung, die einer Arbeit Hess, Seiwert, Maruhn und Greiner¹⁰ entnommen ist, ist auch das Potential $V(\alpha_{20}, \alpha_{22})$ als Funktion der intransischen Deformationsparameter α_{20} und α_{22} , die ja über (1.2.34) mit den Parametern β und γ verbunden sind, dargestellt.

Die Entwicklung dieses kollektiven Modells der Kernanregungen geht vor allen Dingen auf Arbeiten der beiden dänischen Physiker Aage Bohr und Ben Mottelson zurück, die dafür im Jahre 1975 den Nobelpreis erhielten. Deshalb trägt diese Beschreibung auch häufig den Namen Bohr - Mottelson Modell.

Besonders ausgeprägte Rotationsspektren zeigen die Atomkerne im Bereich der Seltenen Erden. Als Beispiel ist in Abb. 1.8 die sogenannte Yrast Bande, das ist für jeden Drehimpuls J der jeweils energetisch niedrigste Zustand, am Beispiel ^{160}Yb dargestellt¹¹. Man findet Zustände bis zu einem Drehimpuls $I = 34$, deren Energien mehr oder weniger dem $I(I + 1)$ Gesetz folgen. Für eine genauere Analyse berechnet man für jedes I eine Winkelgeschwindigkeit nach

$$\begin{aligned}\omega &= \frac{dE}{dJ} = \frac{d}{dJ} \frac{J^2}{2\Theta} = \frac{J}{\Theta} \\ &\approx \frac{\Delta E}{\Delta J} \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{E_I - E_{I-2}}{\sqrt{I(I+1)} - \sqrt{(I-1)(I-2)}}\end{aligned}$$

Mit dieser Bestimmung einer Winkelgeschwindigkeit ω_I für jeden Drehimpuls kann man dann auch zu jedem Drehimpuls ein dazugehöriges Trägheitsmoment Θ_I definieren mit

$$E_I = \frac{1}{2} \Theta_I \omega_I^2.$$

Die so hergeleiteten Werte für Θ_I als Funktion von ω_I^2 sind im oberen Teilbild von Abb. 1.8 eingetragen. Man findet für kleine Drehimpulse das zu erwartende Verhalten, dass Θ_I mit wachsendem I und damit verbundenem wachsender Winkelgeschwindigkeit ω anwächst: Durch die Rotation deformiert sich der Kern weiter. Dann aber, bei diesem Kern für $I = 10 \rightarrow I = 12$, wächst das Trägheitsmoment so rasch an, dass damit eine Reduktion der Winkelgeschwindigkeit verbunden ist. In dem Plot zeigt sich dieses Phänomen als eine "rückwärtslaufende Kurve". Deshalb hat dieses Verhalten in der Diskussion auch den Namen *backbending phenomenon* erhalten.

¹⁰P.O. Hess, M. Seiwert, J. Maruhn und W. Greiner, Zeit. Physik A 296, 147 (1980)

¹¹Abbildung ist dem Lehrbuch von C.A. Bertulani *Nuclear Physics in a Nutschell* entnommen

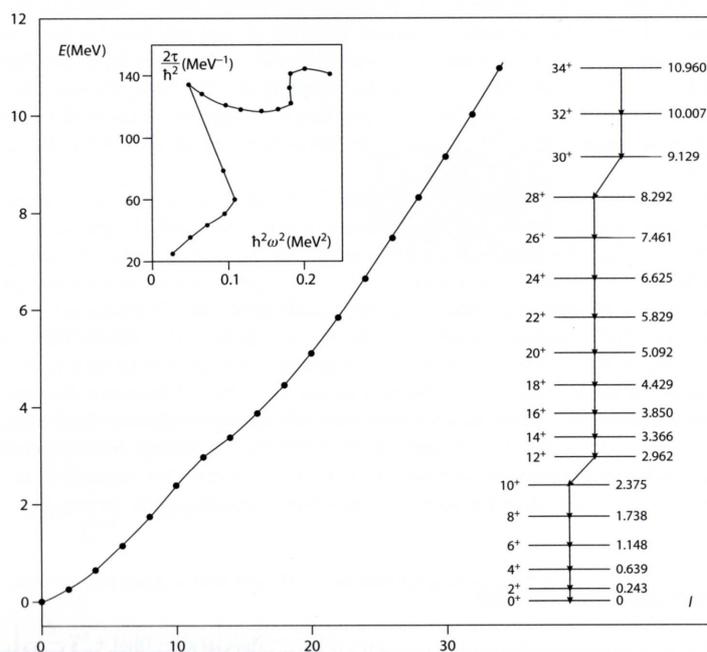


Abbildung 1.8: Darstellung des Yrastspektrums von ^{160}Yb und zugehöriger “Backbending” Plot

Rein klassisch kann man dieses Phänomen verstehen wie einen Phasenübergang bei dem der Kern mit zunehmender Rotation plötzlich seine Deformation vergrößert und dadurch eine geringere Winkelgeschwindigkeit erhält. Mikroskopische Kernstrukturrechnungen haben jedoch gezeigt, dass diese backbending Phänomen auf ein Wechselspiel von kollektiven Anregungsmoden und speziellen nukleonischen Anregungen basiert¹². Wir werden darauf noch zurück kommen.

¹²K.W. Schmid, H. Müther, K. Goeke, A. Faessler, F. Grümmer, Phys. Lett. 63B, 399 (1976)

Kapitel 2

Das Schalenmodell der Atomkerne

2.1 Magische Zahlen

Die Massenformel von Bethe und Weizsäcker reproduziert die experimentellen Daten für die Bindungsenergien der Atomkerne recht gut und liefert einen ersten Überblick über die Abhängigkeit dieser Bindungsenergien von der Zahl der Protonen und der Neutronen. Eine genauere Analyse zeigt aber doch im Detail signifikante Unterschiede. So gibt es bestimmte Werte für die Protonen- und Neutronenzahlen, bei denen die Energien signifikant unter dem Ergebnis der Bethe-Weizsäcker Formel liegen. Dies wird in der Abb. /reffig:schalen1 deutlich in der die Abweichungen der experimentell bestimmten Energien von den Vorhersagen der Bethe-Weizsäcker Formel als Funktion der Protonenzahl (oberer Teil) bzw. als Funktion der Neutronenzahl im unteren Teil dargestellt sind. Diese **Magischen Zahlen** sind

$$2, \quad 8, \quad 20, \quad 28, \quad 50, \quad 82 \quad \text{und} \quad 126. \quad (2.1.1)$$

Sie sind auch in der Nuklidkarte der Abb. 1.4 besonders gekennzeichnet. Als Folge dieser besonders starken Bindungsenergie etwa bei $Z = 50$ findet man relativ viele stabile Isotope des Elementes der Kernladungszahl 50, dem Zinn, und zwar von ^{112}Sn bis ^{124}Sn . Besonders stark gebunden sind natürlich die doppelt magischen Kerne, bei denen sowohl die Kernladungszahl als auch die Neutronenzahl magisch sind, wie z.B.

$$\begin{aligned} &^4\text{He} \quad \text{mit } Z = 2 \quad \text{und } N = 2 \\ &^{16}\text{O} \quad \text{mit } Z = 8 \quad \text{und } N = 8 \\ &^{40}\text{Ca} \quad \text{mit } Z = 20 \quad \text{und } N = 20 \\ &^{48}\text{Ca} \quad \text{mit } Z = 20 \quad \text{und } N = 28 \\ &^{208}\text{Pb} \quad \text{mit } Z = 82 \quad \text{und } N = 126. \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

Diese ausgeprägte Bindung bei speziellen Zahlen erinnert natürlich an die Schalenstruktur der Atomphysik, die ja zu besonders starker Bindung bei den Edelgasen führt. Die

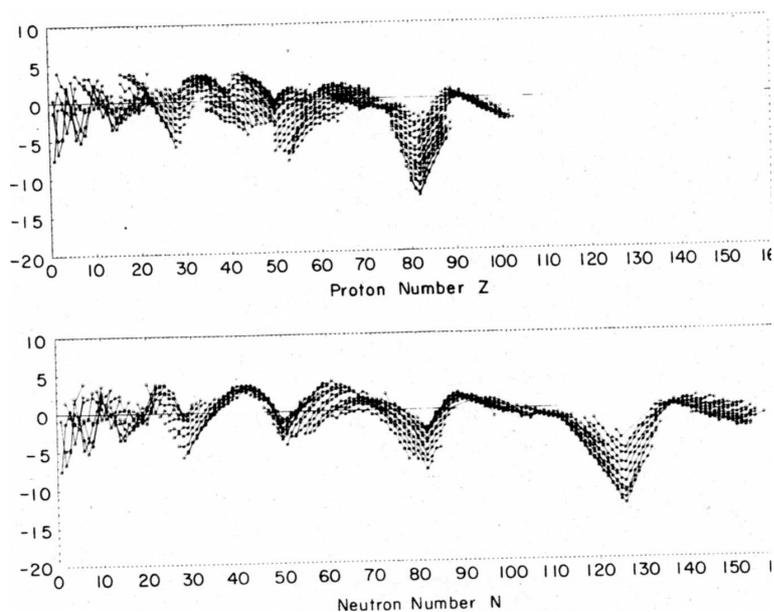


Abbildung 2.1: Differenz zwischen experimentell bestimmten Energien von Atomkernen und der Vorhersage der Bethe-Weizsäcker Formel für verschiedene Protonenzahlen (obere Hälfte), bzw. verschiedene Neutronenzahlen. Diese Bild wurde dem Lehrbuch von P. Ring und P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* entnommen

Kerne mit magischer Nukleonenzahl sollten danach den Edelgasen in der Atomphysik entsprechen.

In der Atomphysik entsteht die Schalenstruktur durch die quantenmechanische Beschreibung der Bewegung der Elektronen im Zentralfeld des Atomkerns. In der Kernphysik ist ein solches Zentralfeld nicht vorgegeben. Es muss vielmehr durch die Wechselwirkung eines einzelnen Nukleons mit allen anderen erzeugt werden. Insgesamt erfährt also ein Nukleon an der Stelle \vec{r} ein Potential der Form

$$U(\vec{r}) = \sum_j \langle \vec{r} \Phi_j | V_{NN} | \vec{r} \Phi_j \rangle, \quad (2.1.3)$$

wobei $\langle \vec{r} \Phi_j | V_{NN} | \vec{r} \Phi_j \rangle$ das Matrixelement der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung eines Nukleons am Ort \vec{r} mit dem Nukleon, das durch die Einteilchenwellenfunktion Φ_j beschrieben wird, bezeichnet. Summiert wird über alle Nukleonen j . Wir werden auf diese mikroskopische Bestimmung des mittleren Potentials durch die Hartree-Fock Theorie noch zurückkommen.

Da die Nukleon-Nukleon Wechselwirkung eine kurze Reichweite hat und nicht dieses $1/r$ Verhalten des Coulomb Potentials, hat das resultierende Potential $U(\vec{r})$ auch eine andere Form als in der Atomphysik. Als einen ersten Ansatz nehmen wir die Form eines sphärischen harmonischen Oszillators in 3 Raumdimensionen an

$$\begin{aligned} U_{HO}(\vec{r}) &= \frac{M\omega^2}{2} r^2 \\ &= \frac{M\omega^2}{2} (x^2 + y^2 + z^2), \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

wobei x, y, z die kartesischen Koordinaten des Nukleons an der Stelle \vec{r} bezeichnen und die Oszillatorfrequenz ω ein Parameter ist, der anzupassen wäre. Mit diesem Potential ergibt sich der Hamiltonoperator für ein Nukleon mit der Masse M

$$\begin{aligned} H &= \frac{\vec{p}^2}{2M} + U_{HO}(\vec{r}) \\ &= \underbrace{\frac{p_x^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2} x^2}_{=H_x} + \underbrace{\frac{p_y^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2} y^2}_{=H_y} + \underbrace{\frac{p_z^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2} z^2}_{=H_z}. \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

Der Hamiltonoperator ist also eine Summe aus 3 Termen H_x , H_y und H_z wobei jeder dieser Operatoren nur auf die entsprechende kartesische Koordinate wirkt. In diesem Fall wissen wir, dass die Lösungen der stationären Schrödinger Gleichung Wellenfunktionen liefern, die das Produkt der Wellenfunktionen für den Harmonischen Oszillator in den kartesischen Richtungen ist

$$\Phi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \varphi_{n_x}(x) \varphi_{n_y}(y) \varphi_{n_z}(z),$$

ν	n_x	n_y	n_z	Entartung
1	1	0	0	3
	0	1	0	
	0	0	1	
2	2	0	0	6
	0	2	0	
	0	0	2	
	1	1	0	
	1	0	1	
	0	1	1	
3	3	0	0	10
	0	3	0	
	0	0	3	
	2	1	0	
	1	2	0	
	2	0	1	
	1	0	2	
	0	2	1	
	0	1	2	
	1	1	1	

Tabelle 2.1: Kombinationen für die Energiequantenzahlen des dreidimensionalen Harmonischen Oszillators

mit einem Energieeigenwert, der sich als Summe der Energien aus den 3 kartesischen Raumrichtungen darstellt

$$\begin{aligned}
 E_\nu &= \hbar\omega \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \\
 &= \hbar\omega \left(\nu + \frac{3}{2} \right) \quad \text{mit} \quad \nu = n_x + n_y + n_z,
 \end{aligned} \tag{2.1.6}$$

wobei n_x , n_y und n_z die Werte 0, 1, 2, ... annehmen können. Die niedrigste Energie ergibt sich für

$$\nu = 0 \quad \Leftrightarrow \quad n_x = n_y = n_z = 0,$$

dieser Zustand ist also nur einfach entartet. Berücksichtigt man die Tatsache, dass die Nukleonen Fermionen mit einem Spin von $1/2$ sind, so besitzen sie 2 Möglichkeiten für die Spinprojektion $m = \pm 1/2$, so dass insgesamt 2 Nukleonen in die Schale mit $\nu = 0$ untergebracht werden können, ohne dass das Pauli Prinzip verletzt wird.

Die möglichen Kombinationen für $\nu = 1$, $\nu = 2$ und $\nu = 3$ sind in der Tabelle 2.1 aufgelistet, ebenfalls die entsprechende Entartung dieser Energieschalen. Berücksichtigt man wieder die Entartung durch den Spin, so ergeben sich maximale Besetzungszahlen

von 6, 12 und 20 für diese Schalen. Addiert man diese Besetzungszahlen auf, so liefert das Modell des Harmonischen Oszillators Schalenabschlüsse bei Z oder N von 2, 8, 20, 40, etc. Die Zahlen 2, 8 und 20 stimmen mit den magischen Zahlen von (2.1.1) überein. Für diese leichten Atomkerne funktioniert als das Oszillatormodell. Bei den schwereren Atomkernen versagt dieses einfache Modell jedoch.

Eine alternative Lösung für das Oszillatormodell ergibt sich aus der Tatsache, dass das Potential (2.1.4) nur vom Betrag des Ortsvektors \vec{r} der Nukleonen abhängt. Damit ist der entsprechende Hamiltonoperator kugelsymmetrisch, man sagt auch invariant unter einer Drehung im Raum. Dies bedeutet für die Klassische Mechanik, dass der Drehimpuls eines Teilchens, das sich in einem solchen Zentralfeld bewegt, erhalten bleibt: Die Poisson Klammer der Drehimpulskomponenten mit der Hamiltonfunktion ist null. Übertragen in die Quantenmechanik bedeutet dies, dass der Hamiltonoperator mit den Operatoren des Bahndrehimpulses, \hat{l}^2 und \hat{l}_z , kommutiert, sodass die Eigenzustände des Hamiltonoperators so gewählt werden können, dass sie gleichzeitig Eigenzustände zu \hat{l}^2 und \hat{l}_z sind, also

$$\hat{H}|nlm\rangle = \varepsilon_{nl}|nlm\rangle .$$

Für die Ortsdarstellung der Eigenzustände $|nlm\rangle$ in Kugelkoordinaten bedeutet dies, dass die entsprechenden Wellenfunktion faktorisieren in einen Winkelanteil, der durch die Kugelflächenfunktionen gegeben ist und einen Radialteil der noch zu bestimmen ist

$$\langle \vec{r} | nlm \rangle = \langle r \vartheta \varphi | nlm \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta \varphi) . \quad (2.1.7)$$

Mit dem Ansatz

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} u_{nl}(r)$$

ergibt sich dann die radiale Schrödingergleichung zur Bestimmung der Eigenwerte ε_{nl} und Wellenfunktionen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + U(r) \right] u_{nl}(r) = \varepsilon_{nl} u_{nl}(r) . \quad (2.1.8)$$

Im Fall des Oszillatorpotentials sind die Eigenwerte

$$\varepsilon_{nl} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right)$$

natürlich identisch mit den entsprechenden Werten (2.1.6) aus der Lösung in der kartesischen Darstellung

Mit diesem Ansatz für ein Zentralfeld kann man nach anderen Potentialformen schauen. Ein Beispiel dafür ist das sogenannte Woods Saxon Potential in der Form

$$U_{WS}(r) = \frac{-U_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} , \quad (2.1.9)$$

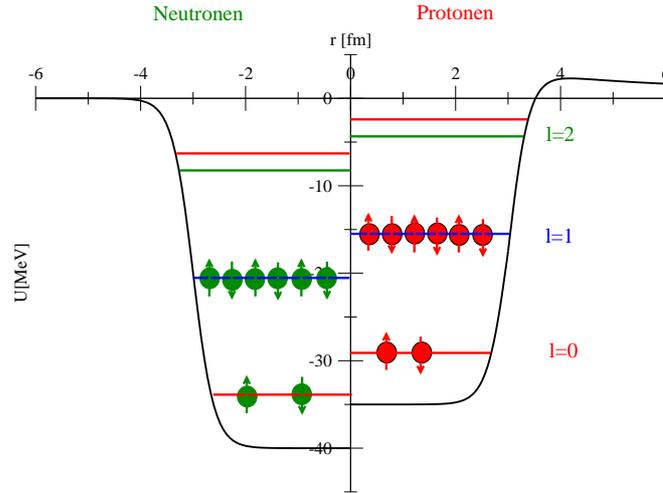


Abbildung 2.2: Woods Saxon Potential für Neutronen (linke Hälfte) und Protonen (rechte Hälfte). Bei den Protonen ist das Coulomb Potential hinzuaddiert. Aufgetragen sind die Einteilchenenergien für Schalen mit verschiedenen l und eine Besetzung dieser Niveaus für den Kern ^{16}O . Die Darstellung ist nur qualitativer Art.

mit den Parametern U_0 , R und a , die die Tiefe des Potentialtopfes, seinen Radius und die Breite der Oberfläche kontrollieren. Die Werte für diese Parameter hängen natürlich von dem betrachteten Atomkern ab. Ein Beispiel für ein solches Woods Saxon Potential ist in der Abb. 2.2 dargestellt. Im rechten Teil der Abbildung ist dabei noch der Beitrag des Coulomb Potentials für die Protonen hinzuaddiert. Diese Potentialform erscheint viel realistischer als das einfache Modell des Harmonischen Oszillators. Insbesondere wird es auch für $r \rightarrow \infty$ nicht unendlich groß, sondern nimmt den Wert null an.

Die Energieeigenwerte des Woods Saxon Potentials liefern eine ähnliche Schalenstruktur wie die des Harmonischen Oszillators. Die Entartung der Zustände ist zum Teil aufgehoben. Auch das Woods Saxon Potential liefert die richtigen magischen Zahlen bis 20 und versagt bei den höheren Werten.

Die Lösung des Problems, die Schalenstruktur und damit auch die magischen Zahlen für die schweren Atomkerne zu erklären, stammt aus dem Jahr 1949 und wurde von Maria Goeppert-Mayer und H. Jensen entwickelt. In Analogie zur Atomphysik nahmen sie an, dass es neben dem zentralen Anteil des Potentials auch in der Kernphysik einen Spin-Bahn Term gibt, so dass das Einteilchenpotential der Nukleonen insgesamt die Form

$$\hat{U} = U_{\text{zent}}(\vec{r}) + U_{ls}(r) \frac{\vec{l} \cdot \vec{s}}{\hbar^2}, \quad (2.1.10)$$

annimmt. Dabei kann der Zentralanteil die Form des Woods Saxon Potentials annehmen. \vec{l} und \vec{s} sind die Operatoren für den Bahndrehimpuls und den Spins des Nukleons.

Auch wenn der Spin-Bahn Term formal die gleiche Struktur hat wie in der Atomphysik, so basiert er doch nicht auf der elektromagnetischen Wechselwirkungen; diese Effekte wären auch viel zu klein. Die Ursache dieser Spin-Bahn Wechselwirkung liegt in der Struktur der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung. Sie ergibt sich, wenn man Effekte der Relativitätstheorie bei der Lösung des Vielteilchenproblems berücksichtigt¹.

Zur Berücksichtigung eines Spin-Bahn Terms im Potential geht man wie in der Atomphysik über in die Basis, in der Spin und Bahndrehimpuls zu einem Gesamtdrehimpuls j gekoppelt sind. In dieser Basis kann der Operator durch die Eigenwerte zu l^2 , s^2 und j^2 beschrieben werden

$$2 \frac{\vec{l} \cdot \vec{s}}{\hbar^2} = j(j+1) - l(l+1) - \frac{1}{2} \frac{3}{2}.$$

Die Aufspaltung der Schalen verläuft analog zur Atomphysik, nur dass in der Kernphysik die Zustände mit $j = l+1/2$ eine niedrigere Energie zeigen als die mit $j = l-1/2$. Die Wirkung dieser Spin-Bahn Aufspaltung ist qualitativ in der Abb. 2.3 dargestellt. Die Einteilchenzustände auf der rechten Seite (mit Berücksichtigung des Spin-Bahn Terms) sind durch die zugehörigen Quantenzahlen n , l und j in der Form gekennzeichnet, dass der Bahndrehimpuls l wie üblich durch die Buchstaben s , p , d , etc. bezeichnet wird, der Gesamtdrehimpuls j als unterer Index angezeigt wird und die Zahl n , die angibt der wievielte Zustand von diesem Typ angezeigt wird, als Zahl vor dem Bahndrehimpuls erscheint. der $2p_{3/2}$ Zustand ist also von unten gezählt der zweite Zustand mit $l = 1$ und $j = 3/2$.

Wir sehen aus der Darstellung von Abb. 2.3 auch, dass die Energien der Einteilchenzustände mit der Spin-Bahn Aufspaltung so getrimmt werden können, dass auch eine signifikante Energielücke zwischen der $1f_{7/2}$ und der $2p_{3/2}$ Schale entsteht, so dass die magische Zahl 28 erklärt wird. Der Spin-Bahn Term erklärt darüber hinaus aber auch die höheren magischen Zahlen.

Zum Abschluss dieses Abschnittes wollen wir noch einige Aspekte des Tröpfchenmodells (1.1.13) aus der Sicht des Schalenmodells erklären.

In der Bethe-Weizsäcker Formel begegnete uns der Symmetrieterm, der besagt, dass die Bindungsenergie eines Atomkerns kleiner wird, wenn sich die Zahl für Protonen und Neutronen unterscheiden (1.1.17). Dieser Term leuchtet aus der Sicht des Schalenmodells sofort ein. In einem Atomkern, der sehr viel mehr Neutronen als Protonen besitzt, müssen die Neutronen wegen des Pauli Prinzips Schalen mit sehr viel höherer Energie besetzen als die Protonen. Man könnte also Energie dadurch gewinnen, dass man ein Neutron durch ein Proton ersetzt, da man dieses in eine energetisch günstigere Schale unterbringen kann.

¹Details und den Stand der Forschung finden Sie z.B. in dem Übersichtsartikel: H. Müther and A. Polls: "Two-Body Correlations in Nuclear Systems", Prog. Part. and Nucl. Phys. 45 (2000) 243; Er ist auch einsehbar unter <http://de.arxiv.org/abs/nucl-th/0001007>

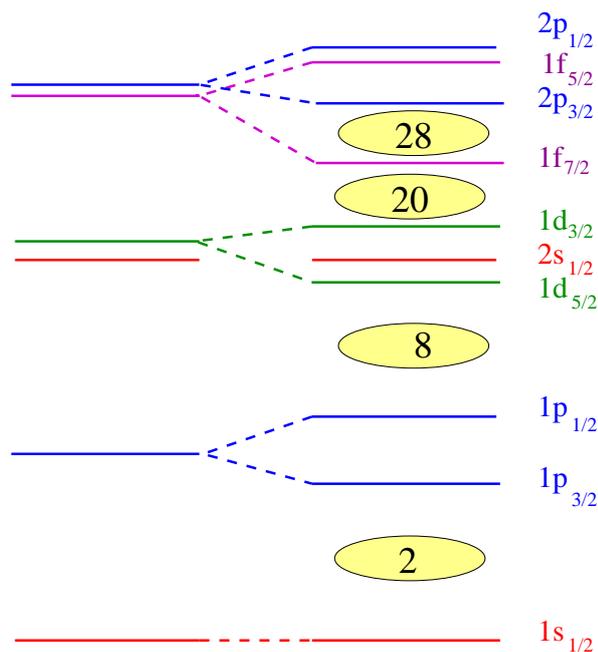


Abbildung 2.3: Einteilchenenergien ohne (linker Teil) und mit Berücksichtigung der Spin-Bahn Wechselwirkung (siehe Diskussion im Text)

Dieser Trend wird natürlich teilweise dadurch kompensiert, dass die Einteilchenenergien für die Zustände der Protonen wegen der Coulombrepulsion etwas weniger gebunden sind als die vergleichbaren Zustände für die Neutronen (siehe Abb. 2.2). Dieses Zusammenspiel zwischen Coulomb Energie und dem Symmetrieterm haben wir im Abschnitt zum Tröpfchenmodell ausführlich diskutiert.

2.2 Valenznukleonen, Isospin

Der Spin-Bahn Term kann aber nicht nur die magischen Zahlen erklären. Wenn man etwa den Atomkern ^{17}O heranzieht mit 8 Protonen und 9 Neutronen, so besagt das Schalenmodell mit diesem Spin-Bahn Term, dass 8 Protonen und 8 Neutronen jeweils die $1s$ und $1p$ Schalen vollständig besetzen, was zu einem Gesamtdrehimpuls dieser Nukleonen in den abgeschlossenen Schalen von $J = 0$ führt. Das zusätzliche Neutron von ^{17}O im Vergleich zu ^{16}O wird dann in die $1d_{5/2}$ Schale gesetzt. Der Spin des gesamten Atomkerns entspricht dem Einteilchendrehimpuls dieses zusätzlichen Neutrons, man spricht wie in der Atomphysik von einem Valenznukleon. Der Atomkern ^{17}O sollte also den Spin $J = 5/2$ besitzen, wenn er sich im Grundzustand befindet, also nicht angeregt ist. Dies wird durch das Experiment bestätigt.

Außerdem legt uns das Schalenmodell nahe, dass der Atomkern ^{17}O Anregungszustände mit niedriger Anregungsenergie besitzen sollte, bei denen das Valenznukleon nicht in der $1d_{5/2}$ Schale sondern in der $2s_{1/2}$ oder $1d_{3/2}$ Schale untergebracht wird. In der Tat findet man solche Zustände mit $j = 1/2$ bei einer Anregungsenergie von 0.87 MeV und einen mit $j = 3/2$ bei 5.08 MeV. Natürlich gilt Ähnliches auch für andere Atomkerne mit abgeschlossenen Schalen plus einem Valenznukleon.

Zur theoretischen Beschreibung dieses Systems kann man jetzt den Grundzustand des Referenzkernes ^{16}O als Ausgangspunkt, das Vakuum für Quasiteilchenzustände $|\tilde{0}\rangle$ heranziehen und die gerade beschriebenen Zustände des Atomkerns mit einem Valenznukleon als 1-Quasiteilchenzustände relativ zum Referenzkern darstellen in der Form

$$|^{17}\text{O}, jm\rangle = a_{njm}^\dagger |\tilde{0}\rangle. \quad (2.2.11)$$

Dabei erzeugt der Operator a_{njm}^\dagger ein zusätzliches Neutron (verdeutlicht durch den Index n in dem Einteilchezustand mit den Drehimpulsquantenzahlen jm). Da sich diese Zustände bei einer Rotation transformieren wie die Komponenten m eines Drehimpulseigenzustandes j bilden die entsprechende Erzeugungsoperatoren a_{njm}^\dagger einen sphärischen Tensor vom Rang j .

Die Energien für diese Zustände werden durch den Einteilchenoperator

$$H^{(1)} = \sum_{j,m} \varepsilon_{jn} a_{njm}^\dagger a_{njm} \quad (2.2.12)$$

dargestellt. Dabei steht der Operator a_{njm} für den Vernichtungsoperator eines Neutrons aus dem Zustand mit den Quantenzahlen j und m . Damit dieser Operator $H^{(1)}$ ein Skalar ist, muss ganz analog zu den Phononoperatoren in (1.3.47) gelten, dass sich

$$(-)^{j-m} a_{nj-m} \quad (2.2.13)$$

verhält wie die Komponente m ein sphärischen Tensors vom Rang j . Der Referenzkern ^{16}O soll ja das Quasiteilchenvakuum $|\tilde{0}\rangle$ für diese Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren darstellen (soweit sie sich auf die Zustände der Valenzschale also $1d_{5/2}$, $2s_{1/2}$

und $1d_{3/2}$ beziehen, sodass also

$$a_{njm}|\tilde{0}\rangle = 0,$$

gilt. Die Bedeutung der Tensoreigenschaft der Vernichtungsoperator, die in (2.2.13) zum Ausdruck kommt wird deutlich, wenn wir jetzt in unserem Beispiel den auf ^{16}O folgenden doppelt magischen Kern mit $N = Z = 20$, nämlich ^{40}Ca betrachten. Bei diesem Kern sind die $1d_{5/2}$, $2s_{1/2}$ und $1d_{3/2}$ Zustände vollständig besetzt und der Grundzustand ist demnach ebenfalls ein Zustand mit Gesamtdrehimpuls $J = 0$. Bezeichnen wir diesen Grundzustand mit $|^{40}\text{Ca}, 0\rangle$ und wenden darauf den Vernichtungsoperator aus (2.2.13) an

$$(-)^{j-m}a_{nj-m}|^{40}\text{Ca}, 0\rangle = |^{39}\text{Ca}, jm\rangle,$$

so wird der resultierende Zustand ein Zustand des ^{39}Ca sein mit Drehimpulsquantenzahlen j und m , da ja zum vollständigen Auffüllen der Schale gerade ein Neutron mit Quantenzahlen j und $-m$ fehlt. Man bezeichnet solche Konfigurationen auch als "1-Loch Zustände".

Die Operatoren a_μ^\dagger und a_ν^2 sind Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Fermionen und sind daher charakterisiert durch die Anti-Kommutatorrelationen

$$\begin{aligned} \{a_\mu^\dagger, a_\nu^\dagger\} &:= a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger + a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger = 0 \\ \text{also} \quad a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger &= -a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger \\ \{a_\mu, a_\nu\} &= 0 \\ \{a_\mu^\dagger, a_\nu\} &= \delta_{\mu\nu}. \end{aligned} \tag{2.2.14}$$

Das gleiche "Spiel" kann man natürlich jetzt auch mit Protonen machen und in unserem Beispiel zum Referenzkern ^{16}O ein Proton hinzufügen

$$|^{17}\text{F}, jm\rangle = a_{pjm}^\dagger|\tilde{0}\rangle,$$

Auch der Grundzustand des ^{17}F ist 6-fach ($= 2*j+1 = 2*5/2+1$) entartet und besitzt einen Drehimpuls $j = 5/2$. Die Anregungsenergien der $j = 1/2$ und $j = 3/2$ Zustände sind mit 0.495 MeV und 5.0 MeV sehr ähnlich, wie im Fall des ^{17}O (siehe auch Abb. 2.4). Die Spektren sind also nahezu invariant gegenüber einer Vertauschung Protonen und Neutronen und man bezeichnet solche Kerne, bei denen N und Z vertauscht sind als Spiegelkerne.

Der tiefere Grund für diese Spiegelsymmetrie bezüglich der Vertauschung Protonen gegen Neutronen liegt darin, dass Protonen und Neutronen nahezu die gleich Masse besitzen und die starke Kernkraft, also die Wechselwirkung von Nukleonen unter Vernachlässigung der elektromagnetischen Wechselwirkung, praktisch invariant ist unter einer Vertauschung von Protonen und Neutronen.

²Die Indices μ und ν fassen die Quantenzahlen njm zusammen

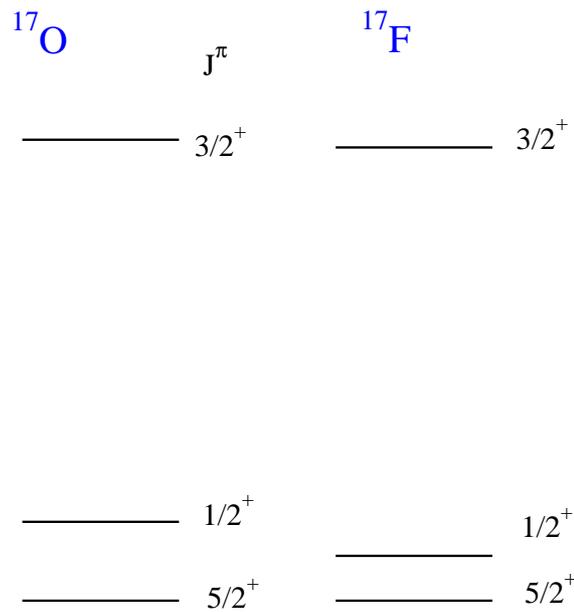


Abbildung 2.4: Grundzustand und Anregungszustände für die Spiegelkerne ^{17}O und ^{17}F .

Dies kann man mathematisch so formulieren, dass man Protonen und Neutronen, eben die Nukleonen, als eine Teilchensorte ansieht, die sich nur in einer Eigenschaft dem Isospin unterscheiden. Der Isospin ist wie der Spin eine Eigenschaft der Nukleonen. Beide Typen der Nukleonen haben einen Isospin wie einen Drehimpuls vom Betrag $t = 1/2$ mit entsprechenden Projektionen dieses Isospins

$$\begin{aligned} t_z &= -1/2 && \text{für Protonen} \\ t_z &= +1/2 && \text{für Neutronen} \end{aligned} \quad (2.2.15)$$

Die Festlegung $t_z = -1/2$ für Protonen ist natürlich einfach eine Konvention. In der Tat ist diese Konvention so üblich in der Kernphysik, während in der Teilchenphysik der Isospin im Allgemeinen mit der Konvention eingeführt wird, dass $t_z = -1/2$ für Neutronen gilt.

Mit der Konvention der Kernphysik ergibt sich die Projektionsquantenzahl für den Gesamtisospin eines Atomkerns mit Z Protonen und N Neutronen durch

$$T_z = \frac{1}{2} (N - Z) . \quad (2.2.16)$$

Die Spiegelkerne ^{17}O und ^{17}F sind daher die $T_z = +1/2$ und $T_z = -1/2$ Komponenten eines Isospindoublets mit dem Gesamtisospin $T = 1/2$

Die Invarianz der Wechselwirkung, bzw. der Hamiltonoperators der starken Wechselwirkung, gegenüber einer konsistenten Vertauschung von Protonen und Neutronen bedeutet jetzt, dass dieser Hamiltonoperator invariant ist gegenüber einer Drehung der

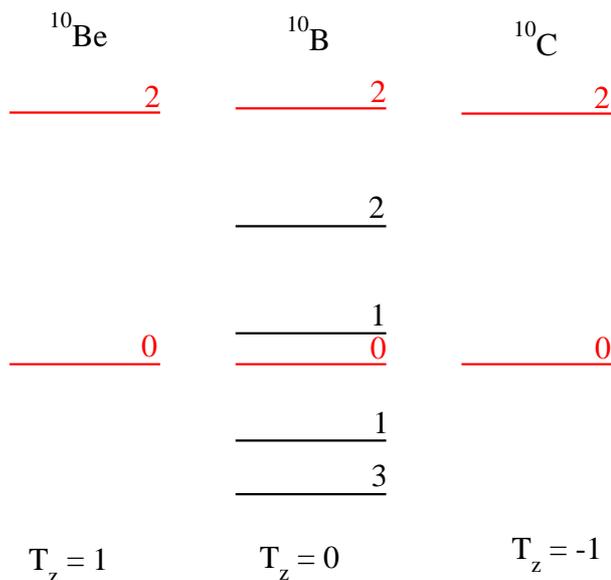


Abbildung 2.5: Grundzustand und Anregungszustände für die Atomkerne mit $A = N + Z = 10$. Die Zustände sind durch ihre Drehimpulsquantenzahl gekennzeichnet. Zustände mit Isospin $T = 1$ sind rot, solche mit $T = 0$ schwarz dargestellt.

Isospins der Nukleonen. Der Hamiltonoperator ist also ein Skalar im Raum der Isospins. Dies bedeutet, ganz analog zum Fall des Drehimpulses, dass die Eigenzustände des Hamiltonoperators auch Eigenzustände zu den Operatoren des Gesamtisospins T^2 und T_z sind, wobei die Zustände mit gleichem T und unterschiedlichem T_z entartet sind. Dies macht sich in den identischen Energien des Isospindoublets ^{17}O und ^{17}F in Abb. 2.4 bemerkbar.

Als ein weiteres Beispiel für ein Isospin Multiplett sind in Abb. 2.5 einige Zustände der Atomkerne ^{10}Be ($Z=4, N=6$), ^{10}B ($Z=5, N=5$) und ^{10}C ($Z=6, N=4$) dargestellt. Mit (2.2.16) bestimmen wir die Isospin Projektionsquantenzahlen T_z 1,0, bzw. -1. Da die Isospinquantenzahl T größer oder gleich dem Betrag von T_z sein muss, erwarten wir für alle 3 Kerne Zustände mit dem Gesamtisospin $T = 1$. Diese sind in der Figur mit roter Farbe herausgehoben und man sieht, dass diese Energien in allen 3 Mitgliedern dieses Isospin Triplet $T = 1$, $T_z = -1, 0, 1$ nahezu identisch auftauchen. Im Atomkern ^{10}B sind wegen $T_z = 0$ auch $T = 0$ Zustände möglich, die in den Nachbarkernen keine Entsprechung aufweisen. Diese Niveaus sind in schwarzer Farbe dargestellt.

2.2.1 Magnetische Momente

Für Atomkerne mit einem Valenznukleon kann man auch einfache Abschätzungen für das magnetische Moment des Atomkerns machen. Dieses magnetische Moment ist eine wichtige Kenngröße für die Hyperfein Aufspaltung des atomaren Spektrums. Das heisst, man kann es auch experimentell aus der Analyse von den Hyperfeinspektren extrahieren und so die experimentellen Daten mit diesen Modellvorhersagen vergleichen.

Das magnetische Moment des Atomkerns ist ein Vektor der Form

$$\vec{\mu}_{op} = \frac{\mu_K}{\hbar} \sum_{i=1}^A (g_l \vec{l}_i + g_s \vec{s}_i) . \quad (2.2.17)$$

Dabei steht μ_K für das Kernmagneton

$$\mu_K = \frac{e\hbar}{2M} , \quad (2.2.18)$$

mit M der Masse eines Nukleons. Es ist also um fast eine Faktor 2000 kleiner als das Bohrsche Magneton für ein Elektron. \vec{l}_i und \vec{s}_i bezeichnen den Bahndrehimpuls und den Spin des Nukleons i und es wird über alle Nukleonen des Kerns summiert. Die g -Faktoren für den Bahndrehimpuls g_l sind 1 für das Proton und $g_l = 0$ im Falle eines Neutrons. Das Neutron ist ja elektrisch neutral und deshalb erzeugt eine Kreisbewegung des Neutrons keinen elektrischen Kreisstrom mit entsprechendem magnetischen Moment. Die g -Faktoren für den Spin lauten

$$g_s = \begin{cases} 5.58 & \text{für ein Proton} \\ -3.82 & \text{für ein Neutron} \end{cases} . \quad (2.2.19)$$

In einem Atomkern mit einem Valenznukleon kompensieren sich die Beiträge der anderen Nukleonen in den abgeschlossenen Schalen und die Summe in (2.2.17) kann auf das Valenznukleon beschränkt werden.

Bei der Messung des magnetischen Momentes $\vec{\mu}$ bestimmt man nicht den Vektor $\vec{\mu}_{op}$ sondern die Projektion dieses Vektors in Richtung auf den Gesamtdrehimpuls des Kerns \vec{j} . Dieses magnetische Moment hat also die Form

$$\begin{aligned} \vec{\mu} &= \frac{\vec{\mu}_{op} \cdot \vec{j}}{|\vec{j}|} \frac{\vec{j}}{|\vec{j}|} \\ &= \frac{\mu_K}{\hbar} \frac{(g_l \vec{l} \cdot \vec{j} + g_s \vec{s} \cdot \vec{j})}{|\vec{j}|^2} \vec{j} . \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

Diesen Ausdruck kann man leicht auswerten wenn man die Operatoren durch die zugehörigen Eigenwerte ersetzt mit

$$|\vec{j}|^2 = \hbar^2 j(j+1)$$

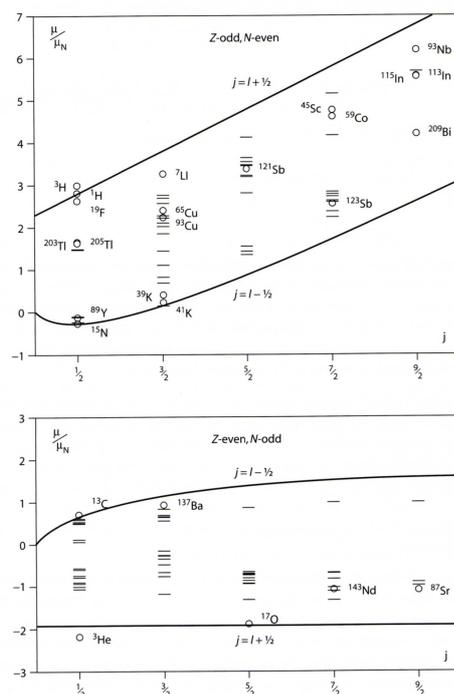


Abbildung 2.6: *Magnetische Momente von Atomkernen mit einem Valenzproton (oberer Teil), bzw. einem Valenzneutron (unterer Teil) bei verschiedenen Drehimpulsquantenzahlen j . Die durchgezogenen Linien entsprechen den Werten der Schmidt Abschätzung Das Bild wurde dem Buch C.A. Bertulani: “Nuclear Physics in a Nutshell” entnommen.*

$$\begin{aligned}
 \vec{l} \cdot \vec{j} &= \frac{1}{2} (\vec{l}^2 + \vec{j}^2 - \vec{s}^2) = \frac{\hbar^2}{2} \left(l(l+1) + j(j+1) - \frac{3}{4} \right) \\
 \vec{s} \cdot \vec{j} &= \frac{1}{2} (\vec{s}^2 + \vec{j}^2 - \vec{l}^2) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{3}{4} + j(j+1) - l(l+1) \right)
 \end{aligned}
 \tag{2.2.21}$$

Entsprechende Abschätzungen erhält man auch für Atomkerne mit einem fehlenden Nukleon in ansonsten abgeschlossenen Schalen (siehe oben). Die experimentellen Werte entsprechen diesen sogenannten Schmidt Werten recht gut (siehe Abb. 2.6). Sie weisen in der Regel einen kleineren Betrag auf, was man durch die Polarisation des Restkerns, die zu einer Abschirmung führt, erklären kann.

Ein Zustand, also insbesondere der Grundzustand eines Atomkerns, wird neben dem Spin auch noch durch die Parität charakterisiert. Der Paritätsoperator angewandt auf eine Vielteilchenfunktion, ergibt diese Funktion an der Stelle, an der alle Argumente,

also Ortsvektoren der Teilchen, durch das gespiegelte Argument ersetzt werden

$$\hat{P}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_A) = \Psi(-\vec{r}_1, -\vec{r}_2 \dots -\vec{r}_A). \quad (2.2.22)$$

Da der Hamilton Operator des Atomkerns mit dem Paritätsoperator kommutiert, sind die Eigenfunktionen des Hamilton Operators, also die Lösungen der stationären Schrödinger Gleichung, auch Eigenfunktionen zum Paritätsoperator. Da das Quadrat des Paritäts Operators gleich dem Einsoperator ist, $\hat{P}^2 = 1$, sind die Eigenwerte des Paritätsoperators plus 1 oder minus 1

$$\begin{aligned} \Psi(-\vec{r}_1, -\vec{r}_2 \dots -\vec{r}_A) &= \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_A) && \text{positive Parität} \\ \Psi(-\vec{r}_1, -\vec{r}_2 \dots -\vec{r}_A) &= -\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_A) && \text{negative Parität} \end{aligned} \quad (2.2.23)$$

Experimentell ist es nicht einfach die Parität eines Zustandes zu bestimmen. Bei einem Erwartungswert eines Operators tritt die Wellenfunktion quadratisch auf und man kann deshalb die Parität aus solchen Erwartungswerten nicht extrahieren. Anders ist es bei Operatoren, die Übergänge beschreiben, wie z.B. die Emission von elektromagnetischer Strahlung. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für solche Übergänge ist proportional zum Matrixelement

$$\langle \Psi_f | O | \Psi_i \rangle.$$

Besitzt der Operator O positive Parität, so muss die Parität des Anfangszustandes Ψ_i gleich der Parität des Endzustandes sein. Wäre das nicht der Fall, so würde bei dem Integral zur Berechnung des Matrixelementes der Integrand das Vorzeichen wechseln bei $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, das Integral wäre also identisch null; der Übergang hätte die Wahrscheinlichkeit Null und ist wegen der Paritätsauswahlregel verboten. Durch die Beobachtung solcher Übergänge kann man die Parität von Zuständen relativ zueinander bestimmen.

Das Schalenmodell liefert eine einfache Möglichkeit zur Berechnung der Parität. Im Schalenmodell ist ja die Gesamtwellenfunktion das Produkt der Einteilchenwellenfunktion für die Zustände, die besetzt sind. Die Parität des Gesamtzustandes ist damit das Produkt der Paritäten der einzelnen Zustände, die wiederum gegeben ist durch $(-1)^l$ zur Potenz l , dem Bahndrehimpuls dieses Einteilchenzustandes (siehe Vorlesung Physik 3). Damit ergibt sich für die Gesamtparität der Wert

$$\prod_{i=1}^A (-1)^{l_i}.$$

Die Entartung einer Schale ist stets eine gerade Zahl. Deshalb haben Atomkerne mit voll besetzten Schalen für Protonen und Neutronen einen Grundzustand mit positiver Parität. Bei Atomkernen mit abgeschlossenen Schalen plus einem Valenznukleon, ist die Parität durch den Bahndrehimpuls dieser Valenzschale festgelegt.

2.3 Zwei Nukleonen in der Valenzschale

Zur Veranschaulichung wollen wir uns auch hier wieder auf den doppelt magischen Kern ^{16}O als Referenzkern beziehen, und Systeme mit mehreren zusätzlichen Nukleonen betrachten. Ein erstes nichttriviales Beispiel wäre hier der Atomkern des Isotops ^{18}O , also Referenzkern ^{16}O plus 2 zusätzliche Valenzneutronen, die jeweils einen Einteilchenzustand in der sd Schale besetzen. Mit Hilfe der Neutronenerzeugungsooperatoren aus dem Abschnitt 2.2 könnte man diese Zustände also beschreiben in der Form

$$a_{nj_1m_1}^\dagger a_{nj_2m_2}^\dagger |\tilde{0}\rangle . \quad (2.3.24)$$

Die Fermioneneigenschaft der Neutronen wird ja in dieser Operator Darstellung durch die Antikommutatorrelationen in (2.2.14) womit also der Zustand

$$a_{nj_2m_2}^\dagger a_{nj_1m_1}^\dagger |\tilde{0}\rangle = -a_{nj_1m_1}^\dagger a_{nj_2m_2}^\dagger |\tilde{0}\rangle$$

bis auf die Phase, das Vorzeichen -1 , identisch ist mit dem Zustand von (2.3.24) sodass man also jeweils nur einen von diesen Konfigurationen berücksichtigen darf. Außerdem gilt natürlich das Pauli Prinzip und die Zustände mit $j_1, m_1 = j_2, m_2$ sind identisch 0. Gibt es also in der Valenzschale N jm Zustände für Neutronen, so erhalten wir insgesamt $N * (N - 1)/2$ antisymmetrische 2 Neutronenzustände vom Typ (2.3.24). In der sd Schale erhält man insgesamt $N = 12$ Einteilchenzustände, womit sich also insgesamt $12 * 11/2 = 66$ Zustände für 2 Valenzneutronen ergeben.

Die einfachen Konfigurationen aus (2.3.24) bilden zwar eine Basis für die entsprechenden Zustände unseres Beispielkerns ^{18}O , sie sind aber nicht Eigenzustände zum Gesamtdrehimpuls der Nukleonen, wie wir das von den physikalischen Zuständen, den Eigenzuständen des Hamiltonoperators erwarten dürfen. Deshalb ist es sicher nützlich, wenn man ganz analog zu den 2 Phononzuständen in (1.3.52) auch hier zu Zuständen mit gekoppelten Drehimpulsen übergeht in der Form

$$|^{18}\text{O}, ab\rangle_{JM} = \sum_{m_a, m_b} C(j_a m_a, j_b m_b | JM) a_{nj_a m_a}^\dagger a_{nj_b m_b}^\dagger |\tilde{0}\rangle . \quad (2.3.25)$$

Dabei bezieht sich $a(b)$ auf die Quantenzahlen der Zustände ohne die jeweiligen Projektionsquantenzahlen $m_a(m_b)$. Wegen der Eigenschaft (1.3.53) der Clebsch Gordan Koeffizienten und der Antikommutatorrelation der Fermionenoperatoren (2.2.14) gilt für diese gekoppelten, antisymmetrischen Zustände

$$\begin{aligned} |^{18}\text{O}, ba\rangle_{JM} &= \sum_{m_a, m_b} C(j_b m_b, j_a m_a | JM) a_{nj_b m_b}^\dagger a_{nj_a m_a}^\dagger |\tilde{0}\rangle \\ &= -(-)^{j_a + j_b - J} \sum_{m_a, m_b} C(j_a m_a, j_b m_b | JM) a_{nj_a m_a}^\dagger a_{nj_b m_b}^\dagger |\tilde{0}\rangle \\ &= (-)^{j_a + j_b - J + 1} |^{18}\text{O}, ab\rangle_{JM} . \end{aligned} \quad (2.3.26)$$

J	a	b
0	$1d_{5/2}$	$1d_{5/2}$
	$1d_{3/2}$	$1d_{3/2}$
	$2s_{1/2}$	$2s_{1/2}$
1	$1d_{5/2}$	$1d_{3/2}$
	$1d_{3/2}$	$2s_{1/2}$
2	$1d_{5/2}$	$1d_{5/2}$
	$1d_{3/2}$	$1d_{3/2}$
	$1d_{5/2}$	$1d_{3/2}$
	$1d_{5/2}$	$2s_{1/2}$
	$1d_{3/2}$	$2s_{1/2}$
3	$1d_{5/2}$	$2s_{1/2}$
	$1d_{5/2}$	$1d_{3/2}$
4	$1d_{5/2}$	$1d_{5/2}$
	$1d_{5/2}$	$1d_{3/2}$

Tabelle 2.2: Konfiguration $|ab \rangle_J$ für 2 Neutronen in der sd Schale

Insbesondere gilt damit also für den Fall, dass die beiden Zustände identisch sind ($a = b$), dass es nur dann von null verschiedenen Zustände gibt, wenn die Phase

$$(-)^{j_a+j_a-J+1} = (-)^{2j_a-J+1} = 1 \quad \text{also} \quad J \quad \text{eine gerade Zahl ist.} \quad (2.3.27)$$

Diese Auswahlregel ist sozusagen die Konsequenz des Pauli Prinzips bei den gekoppelten Zuständen.

Die Zustände mit 2 Valenzneutronen in der sd Schale, gekoppelt zu einem Gesamtdrehimpuls J sind in der Tabelle 2.2 aufgelistet. Zur Berechnung der Energien für dieses System aus 2 Neutronen benötigen wir neben dem Einteilchen Hamiltonoperator $H^{(1)}$ aus (2.2.12) aber auch die Matrixelemente der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung zwischen den gekoppelten 2 Teilchenzuständen

$${}_{J'} \langle cd | \hat{V} | ab \rangle_J .$$

Die Berechnung solcher Matrixelemente werden wir noch zu behandeln haben. Da mit dem Hamiltonoperator auch dieser Operator für Nukleon-Nukleon Wechselwirkung \hat{V} ein Skalar sein muss, kann er den Drehimpuls nicht “verändern”, d.h. die Matrixelemente von \hat{V} sind nur dann von 0 verschieden, wenn der Drehimpuls des Ket-Zustandes, J , gleich dem des Bra-Zustandes J' ist und die Gesamtmatrix von \hat{V} reduziert sich auf Blockmatrizen mit gegebenem Drehimpuls J . Außerdem sind die Matrixelemente aber auch diagonal in der Projektionsquantenzahl für den Drehimpuls M und unabhängig von M , weshalb diese Quantenzahl hier auch gar nicht explizit angegeben wurde.

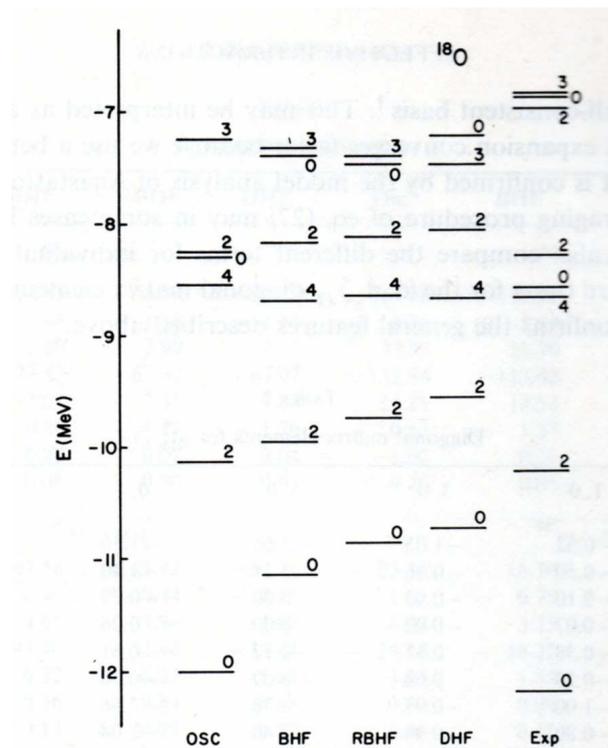


Abbildung 2.7: Vergleich des experimentellen Spektrums von ^{18}O mit verschiedenen Rechnungen

Die Matrix des Hamiltonoperators ergibt sich also insgesamt zu

$$\langle cd|H|ab\rangle_J = (\varepsilon_a + \varepsilon_b) \delta_{ac}\delta_{bd} + \langle cd|\hat{V}|ab\rangle_J . \quad (2.3.28)$$

Die Energien des Atomkerns ^{18}O relativ zum Referenzkern, also dem Grundzustand von ^{16}O erhalten wir durch die Diagonalisation dieses Hamiltonoperators für die verschiedenen Werte von J . Gleichzeitig ist damit also auch der Drehimpuls der Zustände bestimmt.

Als ein typisches Beispiel für die Ergebnisse solch einfacher Rechnungen im Schalenmodell sind in Abb. 2.7 solche berechneten Spektren aufgezeigt und mit experimentellen Werten verglichen³

Bisher haben wir uns in diesem Abschnitt beschränkt auf das Beispiel von ^{18}O mit 2 Valenzneutronen. Übersetzt in die Isospindarstellung bedeutet dies, dass wir einen Produktzustand aus 2 Isospin 1/2 Zuständen betrachten mit der Isospinprojektionsquantenzahl für 2 Neutronen, also $M_T = 1$. Insgesamt ist dieser 2 Nukleonenzustand

³Diese Figur entstammt der Arbeit J. Shurpin, H. Müther, T.T.S. Kuo, A. Faessler: "The Influence of a Self-Consistent Model-Space on the Folded Diagram Expansion of Nuclear Effective Interactions", Nucl. Phys. A293 (1977) 61

daher ein Zustand mit den Isospinquantenzahlen $T = M_T = 1$.

Wir haben bereits erwähnt, dass, wenn wir die Coulombwechselwirkung vernachlässigen, der Hamiltonoperator auch ein Skalar bezüglich einer Rotation im Isospinraum ist. Dies bedeutet, dass die Matrixelemente von \hat{V} nur dann ungleich null sind, wenn im Bra- und im Ket-Zustand die gleichen Quantenzahlen T und M_T vorliegen. Außerdem sind die Matrixelemente unabhängig von M_T . Dies bedeutet, dass wir ein Isospintriplett vorliegen haben und die Ergebnisse für 2 Valenzprotonen, das wäre ^{18}Ne und die $T = 1$ Zustände des Systems mit 1 Valenzproton und einem Valenzneutron, das ist der Kern ^{18}F , identisch ausfallen.

Im Fall des ^{18}F gibt es aber neben den $T = 1, M_T = 0$ Zuständen auch noch Zustände mit den Isospinquantenzahlen $T = 0$ und $M_T = 0$. Wir betrachten deshalb Zustände für 2 Nukleonen, die nicht nur zu einem Gesamtdrehimpuls J sondern außerdem auch noch zu einem Gesamtisospin T gekoppelt sind in der Form (vergl.(2.3.25))

$$|18 ab \rangle_{JM, TM_t} = \sum_{m_a, m_b, t_1, t_2} C(j_a m_a, j_b m_b | JM) C(\frac{1}{2} t_1, \frac{1}{2} t_2 | TM_T) a_{t_1 j_a m_a}^\dagger a_{t_2 j_b m_b}^\dagger |\tilde{0} \rangle . \quad (2.3.29)$$

Wir haben in den Fermionerzeugungsoperatoren den Index für Protonen und Neutronen ersetzt durch die entsprechenden Isospinprojktionsquantenzahlen t_1 und t_2 . Bei Vertauschung der beiden Einteilchenzustände gilt entsprechend (2.3.26)

$$|18 ba \rangle_{JM, TM_T} = (-)^{j_a + j_b - J + 1 + 1/2 + 1/2 - T} |18 ab \rangle_{JM, TM_T} \quad (2.3.30)$$

Insbesondere sind also im Fall $a = b$ nur die $T = 0$ Zustände von null verschieden, für die J ungerade ist. Dies hat zur Folge, dass der niedrigste Zustand im $T = 0$ Spektrum des ^{18}F ein Zustand mit ungeradem J ist, nämlich $J = 1$ (siehe Abb. 2.8)

Für die Systeme mit 2 Nukleonen vom gleichen Typ ist die Tranformation zur Isospindarstellung trivial, denn es gilt ja

$$\begin{aligned} |T = 1, M_T = -1 \rangle &= |pp \rangle && 2 \text{ Protonen} \\ |T = 1, M_T = -1 \rangle &= |nn \rangle && 2 \text{ Protonen} \end{aligned} \quad (2.3.31)$$

Im Fall des Systems aus einem Proton und einem Neutron liefern die Clebsch Gordan Koeffizienten der Isospinkopplung aus (2.3.29) das Ergebnis

$$\begin{aligned} |T = 1, M_T = 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|np \rangle + |pn \rangle) \\ |T = 0, M_T = 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|np \rangle - |pn \rangle) . \end{aligned} \quad (2.3.32)$$

Daraus ergibt sich die Umkehrtransformation

$$\begin{aligned} |np \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|T = 1, M_T = 0 \rangle + |T = 0, M_T = 0 \rangle) \\ |pn \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|T = 1, M_T = 0 \rangle - |T = 0, M_T = 0 \rangle) . \end{aligned} \quad (2.3.33)$$

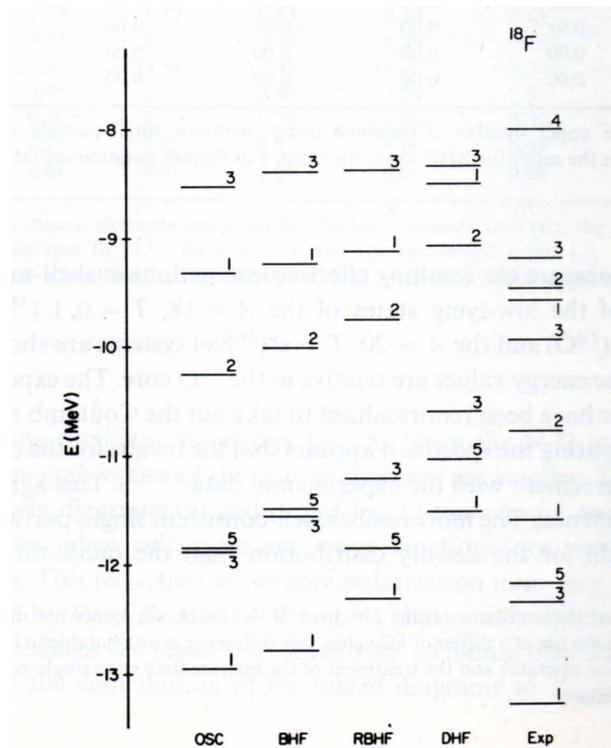


Abbildung 2.8: Vergleich des experimentellen Spektrums von ^{18}F mit verschiedenen Rechnungen für die Zustände mit Isospin $T = 0$.

2.4 Systeme mit vielen Valenznukleonen

Hat man eine Valenzschale mit M Einteilchenzuständen und N Nukleonen von einem Typ, also entweder Protonen oder Neutronen, so erhält man insgesamt

$$\binom{M}{N} = \frac{M!}{N!(M-N)!} \quad (2.4.34)$$

Verteilungen dieser Valenznukleonen auf die Zustände der Schale, die mit dem Pauli Prinzip verträglich sind. Der Ausdruck in (2.4.34) entspricht dabei dem Binomialkoeffizienten.

Im Fall von $N = 2$ Valenzneutronen auf die 12 Zustände der sd -Schale, die wir im vorhergehenden Abschnitt diskutiert haben führte dies zu insgesamt 66 Zuständen. Dies bedeutet, dass der Hamiltonoperator insgesamt durch eine Matrix der Dimension 66 dargestellt ist, eine Größe, die überschaubar ist und zu Matrizen führt, die man ohne Probleme diagonalisieren kann.

Hinzu kommt, dass der Hamiltonoperator ein Skalar ist und die Gesamtmatrix sich als Blockmatrix darstellt, die einzeln diagonalisiert werden können. So reicht es sich auf die Zustände mit gegebenen Quantenzahlen J und M für den Gesamtdrehimpuls zu beschränken, was zu Unterblöcken der Dimension 5 und kleiner führte.

Mit zunehmender Zahl der Valenznukleonen steigt der Binomialkoeffizient in (2.4.34) aber rasant an. Für 6 Neutronen in der sd Schale liefert der Binomialkoeffizient 924 Konfigurationen. Betrachtet man aber die entsprechenden Kombinationen für 6 Neutronen und 6 Protonen, was dem Atomkern ^{28}Si entspricht, so ergeben sich $924 \cdot 924$ also über 800.000 Konfigurationen, eine Größe, die nicht mehr so einfach zu handhaben ist.

Natürlich kommt es auch hier durch die Symmetrien des Hamiltonoperators zu einer Blockstruktur mit deutlich kleineren Unterblöcken. Im Gegensatz zum Fall mit 2 Nukleonen, ist es aber bei Systemen mit vielen Teilchen nicht mehr so einfach, die Zustände mit definiertem Drehimpuls und Isospin zu konstruieren und die entsprechenden Matrixelemente des Hamiltonoperators zu generieren. Eine Beschreibung der dafür erforderlichen Techniken findet sich z.B. in dem Buch von Brussard und Gaudemans und⁴.

Die Matrix des Hamiltonoperators kann viel einfacher konstruiert werden, wenn man auf Basiszustände verzichtet, die bereits einen definierten Gesamtdrehimpuls J besitzen. In diesem Fall beschränkt man sich auf solche Basiszustände, für die die Projektion des Gesamtdrehimpulses auf die z -Achse, definiert durch die Quantenzahl M einen bestimmten Wert annimmt. In diesem Fall sind die Basiszustände einfach identifiziert und man kann auch, wie wir sofort sehen werden, die Matrixelemente des Hamilton-

⁴P. J. Brussard and P. W. M. Glaudemans "Shell-model applications in nuclear spectroscopy", Amsterdam [u.a.] : North-Holland, 1977

operators recht einfach bestimmen. Der Nachteil dieses Verfahrens, das in der Literatur den Namen *M-scheme* trägt, ist die Tatsache, dass die Dimension der Matrizen, die zu diagonalisieren sind recht groß sind. So enthält doch die Basis zu einem bestimmten M Eigenzustände zu J^2 mit den Quantenzahlen, $J = M$, $J = M + 1$ usw. bis hin zu $J = J_{Max}$.

Die Eigenzustände des Hamiltonoperators sind dann auch in diesem M-scheme Eigenzustände zu J^2 , die Eigenwerte müssen aber noch bestimmt werden. Dies kann man entweder dadurch erreichen, dass man den Erwartungswert des Gesamtdrehimpulses entweder explizit berechnet, oder aber zusätzlich auch eine Rechnung für die Projektionsquantenzahl $M + 1$ ausführt. Die Eigenwerte, die bei der Diagonalisation des Hamiltonoperators für M erscheinen, nicht aber für $M + 1$ müssen dann Zustände mit $J = M$ sein.

Um das Verfahren zur Berechnung der Matrixelemente des Hamiltonoperators für das Schalenmodell zu demonstrieren betrachten wir den Operator in der Form

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij|V|kl \rangle_A a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (2.4.35)$$

Der Index A an den Matrixelementen der Zweiteilchenwechselwirkung weist darauf hin, dass es sich hier um die sogenannten antisymmetrisierten Matrixelemente handelt in der Form

$$\langle ij|V|kl \rangle_A = \langle ij|V|kl \rangle - \langle ij|V|lk \rangle \quad (2.4.36)$$

wobei sich die Produktmatrixelemente $\langle ij|V|kl \rangle$ berechnen für ein Potential, das von dem Abstand der wechselwirkenden Teilchen abhängt, in der Form

$$\langle ij|V|kl \rangle = \int d^3r d^3r' \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_j^*(\vec{r}') V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \varphi_k(\vec{r}) \varphi_l(\vec{r}'),$$

wobei $\varphi_i(\vec{r}) = \langle \vec{r}|i \rangle$ die Wellenfunktion zum Zustand i bezeichnet. Für die antisymmetrisierten Matrixelemente gilt

$$\langle ij|V|kl \rangle_A = - \langle ij|V|lk \rangle_A = - \langle ji|V|kl \rangle_A = \langle ji|V|lk \rangle_A \quad (2.4.37)$$

Als einfaches Beispiel betrachten wir Konfigurationen von 2 Neutronen und einem Proton in der $d_{5/2}$ Schale, so dass die Einteilchenzustände durch die Bezeichnung $i = n2m$ bzw. $i = p2m$ eindeutig charakterisiert sind. Im M-scheme haben wir dann für $M = 1/2$ unter anderem die folgenden Konfigurationen in Betracht zu ziehen:

$$\begin{aligned} |A \rangle &= a_{p-5}^\dagger a_{n1}^\dagger a_{n5}^\dagger |\tilde{0} \rangle \\ |B \rangle &= a_{p-3}^\dagger a_{n-1}^\dagger a_{n5}^\dagger |\tilde{0} \rangle \\ |C \rangle &= a_{p-1}^\dagger a_{n-1}^\dagger a_{n3}^\dagger |\tilde{0} \rangle \end{aligned}$$

Als Beispiel für die Berechnung der Matrixelemente in diesem M-scheme werden wir als erstes den Beitrag des Einteilchenterms des Hamiltonoperators für das Diagonalelement

$$\langle A | \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i | A \rangle = \sum_i \varepsilon_i \langle \tilde{0} | a_{n5} a_{n1} a_{p-5} a_i^\dagger a_i a_{p-5}^\dagger a_{n1}^\dagger a_{n5}^\dagger | \tilde{0} \rangle ,$$

berechnen. Zur Auswertung dieses Matrixelementes kann man das Wick'sche Theorem benutzen und die vollständig kontrahierten Terme auswerten. Alternativ kann man sich auch überlegen, dass das Matrixelemente nur dann von null verschieden ist, wenn der Vernichtungsoperator a_i auf einen rechts stehenden Erzeugungsoperator mit gleichem Index i trifft. Entsprechendes gilt für den Erzeugungsoperator (angewandt auf den Bra Zustand) und einem links stehenden Erzeugungsoperator. Daraus ergibt sich

$$\langle A | \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i | A \rangle = \varepsilon_p + 2 \times \varepsilon_n .$$

Als zweites Beispiel betrachten wir das nichtdiagonale Matrixelement

$$\langle B | \hat{H} | A \rangle = \langle p-3, n-1 | V | p-5, n1 \rangle .$$

Schliesslich gilt für das dritte Beispiel

$$\langle C | H | A \rangle = 0 ,$$

da im Zustand $|C\rangle$ 3 andere Einteilchenzustände besetzt sind als im Ket Zustand $|A\rangle$, der Hamiltonoperator mit einem Einteilchenterm und einer Zweiteilchenwechselwirkung aber maximal die Besetzung von 2 Einteilchenzuständen verändern kann.

2.4.1 Schalenmodell ohne Rumpfkern

Wir haben bereits diskutiert, dass allein bei dem Problem der Schalenmodellrechnungen in der $2s1d$ Schale die Zahl der Konfigurationen, das heisst, die Zahl der Basiszustände für die zu diagonalisierende Matrix sehr groß wird. Dies gilt natürlich in viel stärkerem Maße für schwerere Atomkerne, da in dem Bereich großer Massenzahlen sowohl die Zahl der Einteilchenzustände in einer Schale als auch die Zahl der Valenznukleonen sehr groß werden. Da die Zahl der Konfigurationen mit dem Binomialkoeffizienten aus (2.4.34) als Funktion dieser beiden Zahlen rasant anwächst, sind solche Schalenmodellrechnungen in der Praxis auf die Beschreibung von leichten Atomkernen beschränkt. Die Entwicklung von Rechnersystemen mit hoher Kapazität erlaubt heute Rechnungen ohne die Annahme eines Cores, sogenannte "no-core" Schalenmodellrechnungen bis etwa zur Massenzahl $A = 16^5$ und bei Berücksichtigung von speziellen Abschneidemethoden, sogenannte "truncation schemes" bis etwa zur Massenzahl $A = 40$.⁶

⁵A. Nogga et al. Phys. Rev. C 73, 064002 (2006)

⁶A.G. Negoita, J.P. Vary und S. Stoica, arXiv:1003.3428

N_{shell}	2	3	4	5	6	7
	<i>M</i> -scheme					
${}^4\text{He}$	98	3060	3.98e4	3.14e5	1.77e6	7.84e6
${}^6\text{He}$	216	6.51e4	3.860e6	9.80e7	1.45e9	1.47e10
${}^6\text{Li}$	293	8.59e4	5.08e6	1.29e8	1.91e9	1.94e10
${}^7\text{Li}$	400	3.60e5	4.51e7	2.05e9	4.91e10	7.50e11
${}^8\text{Be}$	518	1.47e6	3.96e7	3.24e10	1.26e12	2.91e13
${}^{10}\text{B}$	293	1.34e7	1.82e10	5.02e11	5.22e14	2.78e16
${}^{12}\text{C}$	98	8.22e7	5.87e11	5.50e14	1.54e17	1.90e19
${}^{16}\text{O}$	1	8.12e8	2.10e14	2.51e18	5.32e21	3.59e24
	<i>J</i> -scheme					
${}^4\text{He}$	20	272	2102	1.12e4	4.58e4	1.54e5
${}^6\text{He}$	35	3928	1.37e5	2.35e6	2.52e7	1.93e8
${}^6\text{Li}$	97	1.42e4	5.19e5	9.05e6	9.79e7	7.57e8
${}^7\text{Li}$	89	3.63e4	2.73e6	8.40e7	1.46e9	1.69e10
${}^8\text{Be}$	70	6.89e4	1.08e7	5.92e8	1.66e10	2.90e11
${}^{10}\text{B}$	43	2.20e6	1.21e9	2.21e11	1.65e13	6.67e14
${}^{12}\text{C}$	20	2.94e6	1.14e10	6.94e12	1.38e15	1.28e17
${}^{16}\text{O}$	1	2.54e7	3.26e12	2.46e16	3.66e19	1.84e22

TABLE I: Dimensions of the *M*-scheme (top) and *J*-scheme (bottom) many-body basis spaces for selected nuclei with the N_{shell} truncation. The dimensions are for the natural parity states with *M* and *J* taken to be the lowest allowed value ($M = 0$ for even nuclei except for ${}^6\text{Li}$ and ${}^{10}\text{B}$ where $M = 1$;

Abbildung 2.9: Zahl der Konfigurationen für *no-core* Schalenmodellrechnungen bei unterschiedlichen Kernen und verschiedenen Abschneideparametern N_{shell} .

Eine Übersicht über solche Abschneidemethoden findet sich z.B. in⁷ und es sollen hier einige Ergebnisse dieser Arbeit vorgestellt werden. Alle Ergebnisse dieses Unterabschnittes basieren auf Rechnung mit einer Oszillatorbasis für die Einteilchenzustände. Ein häufig benutztes Abschneideverfahren, oder truncation scheme, besteht darin, dass man nur Konfigurationen zulässt, bei denen Nukleonen in die Zustände von Oszillatorhauptschalen mit Quantenzahlen

$$(2n + l + 1) \leq N_{shell}$$

plaziert sind. In einem ersten Schritt betrachten wir die Zahl der daraus resultierenden Basiszustände und damit die Dimension der zu diagonalisierenden Matrizen. Entsprechende Angaben sind in der Tabelle, die in Abb. 2.9 dargestellt sind. Dabei bezieht sich der obere Teil der Tabelle auf die Basisgröße im sogenannten “M-Schema” bei dem also Basiskonfigurationen zu einem definierten Eigenwert J_z des Gesamtkerns gezählt werden. Für Kerne mit gerader Nukleonenzahl bezieht sich dieses Angabe auf $M = 0$, während bei ungerader Teilchenzahl $M = 1/2$ betrachtet wird. Der untere Teil der Tabelle listet die Zahl der Zustände im “J-Schema” mit definiertem Gesamtdrehimpuls.

Betrachtet man also den Kern ${}^4\text{He}$ mit 2 Protonen und 2 Neutronen jeweils in einem der Zustände der *s* oder *p*-Schale ($N_{shell} = 2$) ergeben sich im M-Schema die noch überschaubare Anzahl von 98 Basiszuständen. Diese Zahl wächst an auf ca. 7,84 Millionen

⁷T. Abe, P. Maris, T. Otsuka, N. Shimizu, Y. Utsuno und J. P. Vary, arXiv:1204.1755

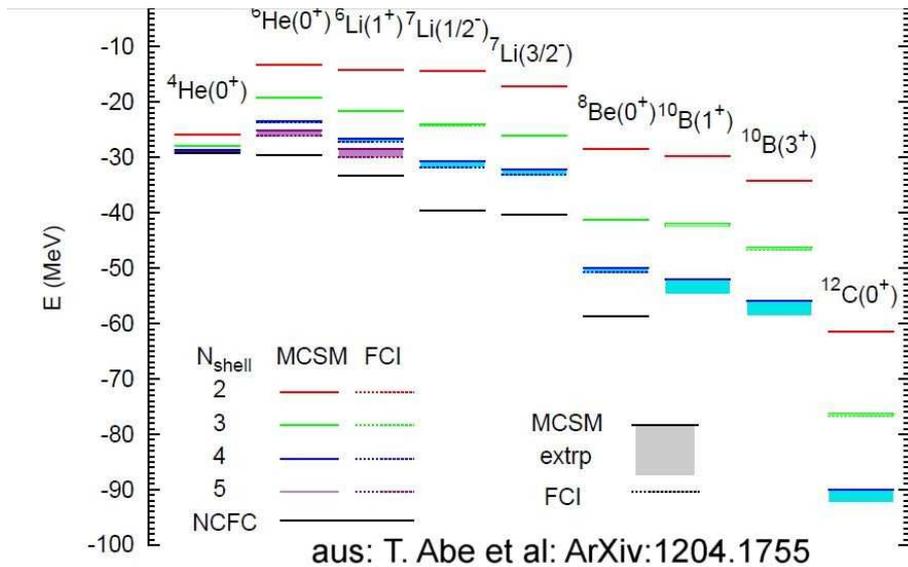


Abbildung 2.10: Berechnete Energie in no-core Schalenmodellrechnungen für verschiedene Kernzustände und Abschneideparameter N_{shell}

Konfigurationen, wenn man Zustände bis $N_{shell} = 7$ zulässt. Andererseits gibt es im Fall des ^{16}O für $N_{shell} = 2$ genau eine Konfiguration (alle Zustände der s und p -Schale sind besetzt), während die Basis auf etwa 3.59×10^{24} ansteigt bei $N_{shell} = 7$. Die Basisgrößen sind zwar signifikant kleiner für die gekoppelten Basiszustände des J -Schemas, aber auch hier ergibt sich für ^{16}O bei $N_{shell} = 7$ immer noch eine Basisgröße von $1,84 \times 10^{22}$.

Ergebnisse für die Energie der jeweiligen Grundzustände von verschiedenen Atomkernen sind in Abb. 2.10 dargestellt. Das “richtige” Ergebnis, das bedeutet in diesem Fall, dass man N_{shell} so hoch gesetzt hat, dass sich keine signifikanten Änderungen mehr ergeben, ist, soweit dies vorlag, durch den schwarzen Strichen (NCFC) dargestellt. Die farbigen Striche beziehen sich auf die angegebenen Werte für N_{shell} .

Im Fall des ^4He liefert die Rechnung mit $N_{shell} = 4$ eine Energie, die kaum noch vom exakten Wert zu unterscheiden sind. Dies bedeutet, dass die Konfigurationen mit Nucleonen in höher liegenden Oszillatorzuständen vernachlässigbar sind (die entsprechenden Entwicklungskoeffizienten können identisch null angenommen werden). Bei ^7Li und ^8Be liefern solche Konfigurationen eine zusätzliche Bindungsenergie von etwa 10 MeV. Für Nucleonenzahl $A = 10$ und $A = 12$ fehlt der Vergleichswert der vollständigen Rechnung, man sieht aber auch hier aus dem Vergleich der Energien als Funktion von N_{shell} , dass auch in diesen Fällen der exakte Wert für $N_{shell} = 4$ noch nicht erreicht ist.

Die Basiskonfigurationen sind aber nicht nur durch den Abschneideparameter N_{shell} identifiziert. Das Ergebnis der Rechnung hängt natürlich auch davon ab in welcher Oszillatorbasis, d.h. bei welcher Winkelfrequenz des Oszillators ω , bzw. zu welcher

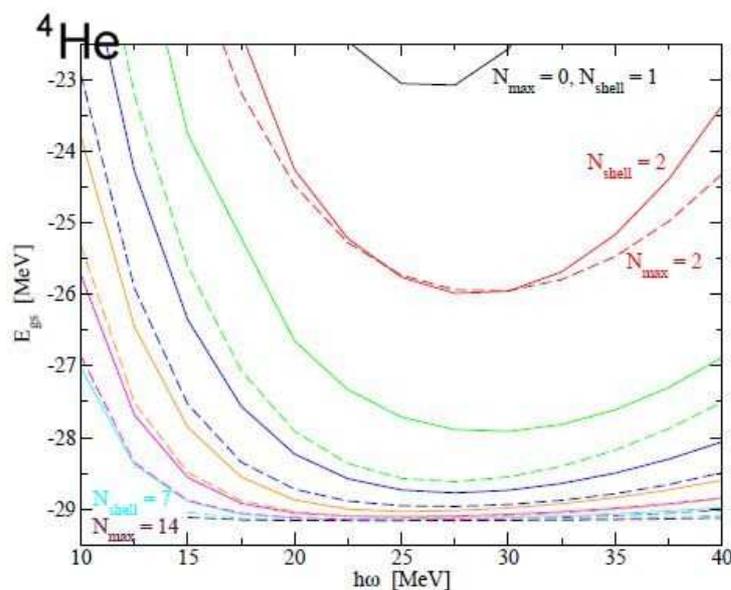


Abbildung 2.11: Berechnete Energie des ${}^4\text{He}$ Kerns in no-core Schalenmodellrechnungen bei verschiedenen Werten für N_{shell} als Funktion der Oszillatorenergie $\hbar\omega$

Oszillatorenergie $\hbar\omega$ die Einteilchenzustände definiert sind.

So stellt die Abb. 2.11 die in no-core Schalenmodellrechnungen berechnete Energie des Alphateilchens, ${}^4\text{He}$, bei verschiedenen Werten von N_{shell} als Funktion der Oszillatorenergie für die Einteilchenbasis, $\hbar\omega$, dar. Für $N_{shell} = 2$ ergibt sich ein ausgeprägtes Minimum bei $\hbar\omega = 28$ MeV. Bei größeren Werten für N_{shell} wird die berechnete Energie niedriger, da mit der größeren Anzahl von Konfigurationen natürlich der Variationsraum vergrößert wird, in dem das Minimum des Variationsverfahrens gesucht wird.

Es zeigt sich aber auch, dass die berechneten Energien mit zunehmendem N_{shell} immer unabhängiger von der Wahl der Einteilchenbasis $\hbar\omega$ werden.

2.4.2 Diagonalisation von Matrizen

So viel zu der Bestimmung der Matrix des Hamiltonoperators, die ja dann diagonalisiert werden muss, um die Eigenwerte und Eigenvektoren des Hamiltonoperators zu bestimmen und damit die stationäre Schrödingergleichung zu lösen.

Als erstes wollen wir dazu kurz ein konventionelles Verfahren für die numerische Diagonalisation einer hermiteschen, d.h. bei reellen Matrixelementen symmetrischen Matrix, \mathcal{X} , beschreiben, das Jacobi Verfahren. Dies Verfahren basiert darauf, dass man durch eine Folge von orthogonalen Transformationen, also Drehungen im hochdimensiona-

len Raum der Basiszustände, die nichtdiagonalen Matrixelemente von \mathcal{X} systematisch kleiner macht, bis der Betrag aller nichtdiagonalen Matrixelemente kleiner ist als eine vorgegebene kleine Zahl δ . Die resultierende Matrix ist dann also eine Matrix, die nichtdiagonalen Elemente von der Größe δ als numerische Null ansieht, eine Diagonalmatrix, die in der Diagonalen die Eigenwerte enthält.

Dazu bestimmt man das Matrixelement X_{ij} der Matrix \mathcal{X} , das vom Betrag her maximal ist und führt eine orthogonale Transformation durch, die genau dieses nichtdiagonale Element zu null macht in der Form

$$\mathcal{X}^{(\infty)} = R\mathcal{X}R^{-1} \quad (2.4.38)$$

mit einer orthogonalen Transformationsmatrix, also $R^{-1} = R^t$, die nur in den Zeilen und Spalten i und j von 0 verschiedene Elemente besitzt in der Form

$$R = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \cos \vartheta & \dots & \sin \vartheta & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & -\sin \vartheta & \dots & \cos \vartheta & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix}$$

mit dem Rotationswinkel ϑ , der durch

$$\tan \vartheta = \frac{2X_{ij}}{X_{ii} - X_{jj}}.$$

Durch die orthogonale Transformation (2.4.38) wird aber nicht nur das Element $X_{ij}^{(1)} = 0$, es werden auch die anderen Elemente in den Zeilen und Spalten i und j in $\mathcal{X}^{(\infty)}$ gegenüber X verändert. Man kann sich aber überlegen, dass keines der Elemente vom Betrag her größer als X_{ij} wird. Das nichtdiagonale Element von $\mathcal{X}^{(\infty)}$ mit maximalem Betrag ist also kleiner als X_{ij} .

Im nächsten Schritt wiederholt man diese Prozedur jetzt für $\mathcal{X}^{(\infty)}$ und fährt iterativ fort, bis alle nichtdiagonalen Elemente kleiner als ein vorgegebene Schranke δ sind, so dass die resultierende Matrix im Rahmen der vorgegebenen Genauigkeit Diagonalgestalt besitzt.

Dieses Verfahren ist numerisch relativ aufwendig. Dies gilt insbesondere für Matrizen großer Dimension. Der Aufwand steigt mit der dritten Potenz der Dimension und übersteigt daher für die hochdimensionalen Matrizen des Schalenmodells schliesslich selbst die Kapazität moderner Computer.

Andererseits ist man im Schalenmodell der Kernphysik gar nicht daran interessiert, alle Eigenwerte zu bestimmen. Von Interesse und mit experimentellen Daten vergleichbar

sind in der Regel nur einige Eigenwerte (10, 20 oder 30) der Zustände mit den niedrigsten Energien. Im Folgenden soll eine Methode vorgestellt werden, das sogenannte Lanczos Verfahren, die sich in besonderer Weise dafür eignet die extremen Eigenwerte, also die besonders hohen und die besonders niedrigen Eigenwerte und Eigenvektoren von großen, symmetrischen Matrizen zu bestimmen.

Ausgangspunkt ist ein beliebiger normierter Basisvektor $|L1\rangle$. Bezeichne \hat{H} den Operator, dessen Eigenwerte bestimmt werden sollen, so liefert die Anwendung dieses Operators auf den Ausgangszustand

$$\begin{aligned}\hat{H}|L1\rangle &= |M1\rangle \\ &= A_1|L1\rangle + B_1|L2\rangle\end{aligned}\quad (2.4.39)$$

also einen Ergebnisvektor $|M1\rangle$, den man zerlegen kann in eine Komponente $A_1|L1\rangle$, die parallel zum Ausgangsvektor liegt und einen Rest $B_1|L2\rangle$, der orthogonal zu $|L1\rangle$ steht, also $\langle L2|L1\rangle = 0$. Dabei ist die führende Konstante dadurch festgelegt, dass auch $|L2\rangle$ normiert sein soll, also $\langle L2|L2\rangle = 1$. Damit gilt dann

$$\begin{aligned}\langle L1|\hat{H}|L1\rangle &= A_1 \langle L1|L1\rangle + B_1 \langle L1|L2\rangle = A_1 \\ \langle L2|\hat{H}|L1\rangle &= B_1 = \langle L1|\hat{H}|L2\rangle\end{aligned}\quad (2.4.40)$$

Die letzte dieser Gleichungen gilt, da \hat{H} ein hermitescher Operator mit reellen Matrixelementen und damit einer symmetrischen Matrix entspricht. Für alle anderen $|Li\rangle, i > 2$, die senkrecht zu $|L1\rangle$ und $|L2\rangle$ stehen, gilt

$$\langle Li|\hat{H}|L1\rangle = 0. \quad (2.4.41)$$

Im zweiten Schritt des Lanczos Verfahrens wird der Operator \hat{H} auf den Zustand $|L2\rangle$ angewandt

$$\begin{aligned}\hat{H}|L2\rangle &= |M2\rangle \\ &= \sum_j |Lj\rangle \langle Lj|\hat{H}|L2\rangle \\ &= B_1|L1\rangle + A_2|L2\rangle + B_2|L3\rangle.\end{aligned}\quad (2.4.42)$$

Dabei ist die Komponente in Richtung $|L1\rangle$ durch (2.4.40) bestimmt, die Konstante A_2 durch die Normierung der Komponente von $|M2\rangle$ parallel zu $|L2\rangle$ bestimmbar und der verbleibende Vektor $B_2|L3\rangle$ wird durch die Bedingung, dass $|L3\rangle$ normiert ist, eindeutig in eine Konstante B_2 und einen Vektor $|L3\rangle$ faktorisiert.

Der dritte ‘‘Lanczos Schritt’’ erfolgt entsprechend durch Anwendung von \hat{H} auf $|L3\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{H}|L3\rangle &= |M3\rangle \\ &= \sum_j |Lj\rangle \langle Lj|\hat{H}|L3\rangle \\ &= |L1\rangle \underbrace{\langle L1|\hat{H}|L3\rangle}_{=0} + |L2\rangle \underbrace{\langle L2|\hat{H}|L3\rangle}_{=B_2} + |L3\rangle \underbrace{\langle L3|\hat{H}|L3\rangle}_{:=A_3} + \text{Rest} \\ &= B_2|L2\rangle + A_3|L3\rangle + B_3|L4\rangle.\end{aligned}\quad (2.4.43)$$

Entsprechend den vorhergehenden Schritten wurde auch hier der verbleibende Teil von $|M3\rangle$ in Zeile 3 dieser Gleichung faktorisiert in $B_3|L4\rangle$. Weiter sei darauf hingewiesen, dass $\langle L1|\hat{H}|L3\rangle = \langle L3|\hat{H}|L1\rangle$ wegen (2.4.41) identisch null ist.

Führt man dieses Verfahren fort bis zum Schritt N , wobei N die Dimension des gesamten Hilbertraumes ist, in dem \hat{H} definiert ist, so hat man mit diesem Verfahren die ursprünglich Matrix des Operators \hat{H} durch Transformation auf die Basis der $|Li\rangle$ für $i = 1 \dots N$ auf eine tridiagonal Form gebracht mit der Gestalt

$$\begin{pmatrix} A_1 & B_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ B_1 & A_2 & B_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & B_2 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & 0 & & B_{N-2} & A_{N-1} & B_{N-1} \\ 0 & 0 & & 0 & B_{N-1} & A_N \end{pmatrix} \quad (2.4.44)$$

Eine solche tridiagonale Matrix ist dann sehr einfach zu diagonalisieren, da jedes nicht-diagonale Element durch eine Transformation vom Typ (2.4.38) zu Null gemacht werden kann, ohne dass andere nichtdiagonale Matrixelemente beeinflusst werden.

Die Stärke des Lanczos Verfahrens beruht aber nicht darauf, dass man so alle Eigenwerte bestimmen könnte. Es ist vielmehr der Vorteil dieses Verfahrens, dass es auch sehr interessante Ergebnisse liefert, wenn man das Verfahren nach k -Lanczos Schritten abbricht, wobei k deutlich kleiner sein kann als die Gesamtdimension N und die bis zu diesem Schritt entstandene $k \times k$ Matrix vom Typ (2.4.44) diagonalisiert. Es stellt sich nämlich heraus, dass bei diesem reduzierten Verfahren bereits sehr zuverlässige Ergebnisse erzielt werden können für die extremen Eigenwerte und zugehörige Eigenvektoren von \hat{H} .

Die Ursache für dieses Verhalten liegt darin, dass man bei jeder Anwendung eines Lanczos Schrittes eine den Operator \hat{H} ein weiteres Mal auf den Startzustand $|L1\rangle$ anwendet. Der Zustand

$$|Mk\rangle = \hat{H}^k |L1\rangle = \sum_{\alpha} E_{\alpha}^k |\alpha\rangle \langle \alpha | L1\rangle$$

enthält also eine Komponente eines Eigenzustandes $|\alpha\rangle$ im Ausgangszustand $|L1\rangle$ mit dem Eigenwert E_{α} zur k -ten Potenz gewichtet. Extreme Eigenwerte sind damit besonders verstärkt.

In der Praxis kann man dies ausnutzen, indem man für eine Folge von Werten von k die Eigenwerte E_{α} vergleicht. Als zuverlässig kann man dann die Eigenwerte ansehen, die mit anwachsendem k stabil bleiben.

Mit diesem Verfahren kann man typischerweise bei einer Matrix der Dimension 10000, bereits nach etwa 100 Lanczos Schritten recht stabile Ergebnisse für die niedrigsten

5-10 Eigenwerte gewinnen. Dies ist ein Ergebnis, das für viele Schalenmodelluntersuchungen bereits als ausreichend angesehen werden kann, da höhere Eigenwerte nicht interessieren.

Kapitel 3

Hartree - Fock und mehr

3.1 Hartree - Fock in der Kernphysik

Im vorhergehenden Kapitel haben wir gesehen, dass das Schalenmodell, also die Annahme, dass sich die Nukleonen in einem mittleren Einteilchenpotential U bewegen, für die Kernphysik eine gute Ausgangsbasis darstellt. Die Frage, warum dies der Fall ist und wie dieses Potential bestimmt werden kann, steht im Zentrum dieses Abschnitts.

Ausgangspunkt ist der Hamiltonoperator, H , für wechselwirkende Nukleonen, der neben der kinetischen Energie der Nukleonen ein Nukleon-Nukleon Potential V enthält, das die Wechselwirkung zwischen jeweils 2 Nukleonen beschreibt. Darüber hinaus kann man natürlich auch 3-Nukleonen oder allgemein Mehr-Nukleonen Kräfte annehmen. Die Untersuchung solcher 3-Teilchenkräfte wird gerade in den letzten Jahren sehr intensiv diskutiert und wir werden noch darauf zurückkommen, wollen aber zunächst einmal darauf verzichten.

Damit besteht der Hamiltonoperator aus einem 1-Teilchen Operator, der kinetischen Energie, T , und einem 2-Teilchenterm V , und man kann man kann ihn darstellen in der Form

$$H = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha|T|\beta \rangle c_{\alpha}^{\dagger}c_{\beta} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta|V|\gamma\delta \rangle c_{\alpha}^{\dagger}c_{\beta}^{\dagger}c_{\delta}c_{\gamma} \quad (3.1.1)$$

Dabei bezeichnen die c_{α}^{\dagger} (c_{β}) die Erzeugungs- (Vernichtungs-) Operatoren für die Nukleonen in einer beliebigen Basis von Einteilchenzuständen. Dies könnten die Eigenzustände der kinetischen Energie sein, also in der Ortsdarstellung ebene Wellen, oder aber auch die Eigenzustände von Nukleonen in einem geeignet gewählten Oszillatorpotential.

Bezeichnet man die dieser Basis zugehörigen Einteilchenzustände in der Ortsdarstellung mit

$$\chi_{\alpha}(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\alpha \rangle = \langle \vec{r}|c_{\alpha}^{\dagger}|0 \rangle ,$$

so könnte man die antisymmetrisierten Matrixelemente des Potentials V in (3.1.1) berechnen in der Form

$$\langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle = \int d^3r d^3r' \chi_\alpha^*(\vec{r}) \chi_\beta^*(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \{ \chi_\gamma(\vec{r}) \chi_\delta(\vec{r}') - \chi_\delta(\vec{r}) \chi_\gamma(\vec{r}') \} . \quad (3.1.2)$$

Das Ziel ist es jetzt, ein Einteilchenpotential U zu definieren, so dass

$$\begin{aligned} H &= T + V \\ &= \underbrace{(T + U)}_{:=H_0} + (V - U) \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

und U so gewählt wird, dass H sehr gut durch den Einteilchenoperator $H_0 = T + U$ beschrieben werden kann, der Korrekturterm $(V - U)$ also in möglichst guter Näherung vernachlässigt werden kann. In diesem Fall könnte man nämlich mit den bereits bekannten Mitteln die Lösungen der stationären Schrödingergleichung für H_0 , also die Eigenzustände des Einteilchenoperators H_0 bestimmen

$$H_0 |i\rangle = \varepsilon_i |i\rangle ,$$

bestimmen. Bezeichnet man die Erzeugungs- (Vernichtungs-) operatoren in dieser Basis der Eigenzustände mit a_i^\dagger (a_j), also

$$|i\rangle = a_i^\dagger |0\rangle ,$$

bzw. in der Ortsdarstellung

$$\varphi_i(\vec{r}) = \langle \vec{r} | i \rangle = \langle \vec{r} | a_i^\dagger | 0 \rangle , \quad (3.1.4)$$

so hätte H_0 in dieser Basis die Gestalt

$$H_0 = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i .$$

Die antisymmetrisierte Produktfunktion, gebildet aus den A Einteilchenfunktionen $\varphi_i(\vec{r})$ mit den niedrigsten Einteilchenenergien ε_i wären dann die entsprechende Näherung zur Beschreibung des Grundzustandes des Atomkerns. Mit den entsprechenden Erzeugungsoperatoren würde man diese Slaterdeterminante darstellen in der Form

$$|\Phi\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^\dagger |0\rangle . \quad (3.1.5)$$

Nachdem wir jetzt die Nomenklatur definiert haben, stellt sich die entscheidende Frage: Wie findet man das Potential U , sodass $H_0 = T + U$ die optimale Näherung darstellt? Die Antwort darauf liefert das Variationsprinzip. Wir wissen allgemein aus der Quantenmechanik, dass man für einen vorgegebenen Hamiltonoperator H den Grundzustand

$|\Psi_0\rangle$ im Prinzip auch dadurch bestimmen ist, dass dieser Zustand $|\Psi\rangle$ im Vergleich mit allen anderen normierten Zuständen, den niedrigsten Erwartungswert liefert. Es gilt also, das Funktional

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (3.1.6)$$

besitzt ein absolutes Minimum an der Stelle $|\Psi\rangle = |\Psi_0\rangle$. Die optimale Lösung aus den möglichen Slaterdeterminanten vom Typ (3.1.5) ergibt sich dann dadurch, dass man die Slaterdeterminante, bzw. die Einteilchenwellenfunktion (3.1.4), sucht, für die die Energie minimal wird, also eine Lösung des Variationsprinzips

$$\delta \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = 0 \quad (3.1.7)$$

wobei die Testfunktionen $|\Phi\rangle$ auf Slaterdeterminanten beschränkt sind.

In einem ersten Schritt berechnen wir den Erwartungswert des Hamiltonoperators (3.1.1), allerdings dargestellt in der Basis der Einteilchenfunktionen der Slaterdeterminante von (3.1.4), für die entsprechende Slaterdeterminante (3.1.5). Als Beispiel greifen wir den Beitrag der kinetischen Energie heraus, was also bedeutet, den Ausdruck

$$\sum_{i,j} \langle i | T | j \rangle \langle 0 | a_1 a_2 \dots a_A a_i^\dagger a_j a_A^\dagger \dots a_2^\dagger a_1^\dagger | 0 \rangle \quad (3.1.8)$$

zu berechnen. Insbesondere benötigen wir dazu das Ergebnis für die Berechnung des Matrixelementes der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für das Teilchenvakuum $|0\rangle$. Die Anwendung des Wick'schen Theorems¹ besagt, dass hier nur die voll kontrahierten Terme beitragen, also die bei denen jeder Vernichtungsoperator mit einem rechts von ihm stehenden Erzeugungsoperator kontrahiert wird, wobei jede dieser Kontraktion den Faktor $(-)^{\nu}$ liefert, wobei ν die Zahl der Permutationen bezeichnet, die erforderlich ist, um die beiden zu kontrahierenden Operatoren an benachbarte Stellen zu bringen.

Um also einen von 0 verschiedenen Beitrag zu erzielen, muss also der Vernichtungsoperator a_j mit einem der Operatoren a_x^\dagger kontrahiert werden mit $x \in 1 \dots A$. Dazu seien ν_x Vertauschungen erforderlich. Das bedeutet aber, dass der entsprechende Vernichtungsoperator a_x mit dem Operator a_j^\dagger kontrahiert werden muss, da ja ansonsten kein Operator a_x^\dagger zur Verfügung stünde. Die Zahl der erforderlichen Vertauschungen ist ebenfalls ν_x . Die verbleibenden Vernichtungsoperatoren werden paarweise kontrahiert, ohne dass Vertauschungen erforderlich wären. Dies liefert also für (3.1.8) das Ergebnis

$$\sum_{ij} \langle i | T | j \rangle \sum_{x=1}^A (-)^{2\nu_x} \delta_{ix} \delta_{jx} = \sum_{i=1}^A \langle i | T | i \rangle \quad (3.1.9)$$

¹siehe z.B. H. Mütter: Vorlesungsskript Quantenmechanik II

In analoger Weise kann man auch den Beitrag der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung berechnen und erhält so

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^A \langle i | T | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A \langle ij | V | ij \rangle . \quad (3.1.10)$$

Das Problem besteht nun aber darin, dass wir die optimalen Einteilchenzustände $|i\rangle$ nicht kennen und daher die Matrixelemente $\langle i | T | i \rangle$ und $\langle ij | V | ij \rangle$ nicht berechnen können. Wir können aber die Einteilchenzustände $|i\rangle$ aus (3.1.4) entwickeln in der bekannten Basis der $|a\rangle$ aus (3.1.1)

$$|i\rangle = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha | i \rangle = \sum_{\alpha} d_{\alpha i} |\alpha\rangle \quad (3.1.11)$$

Setzt man diese Entwicklung in (3.1.10) ein, ergibt sich

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^A \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | T | \beta \rangle d_{\alpha i}^* d_{\beta i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\gamma | V | \beta\delta \rangle d_{\alpha i}^* d_{\gamma j}^* d_{\beta i} d_{\delta j} . \quad (3.1.12)$$

In dieser Darstellung sind also die Unbekannten und damit die Variationsparameter in dem Variationsproblem aus (3.1.7) durch die Entwicklungskoeffizienten $d_{\alpha i}^*$ und $d_{\alpha i}$ gegeben. Die Suche nach einem Extremum von $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$ erfordert also, dass die Ableitungen des Ausdrucks auf der rechten Seite von (3.1.12) nach diesen Koeffizienten den Wert Null ergeben muss.

Allerdings bleibt noch zu berücksichtigen, dass die Slaterdeterminante $|\Phi\rangle$, bzw. die entsprechenden Zustände $|i\rangle$ korrekt normiert sind, also:

$$1 = \langle i | i \rangle = \sum_{\alpha} \langle i | \alpha \rangle \langle \alpha | i \rangle = \sum_{\alpha} d_{\alpha i}^* d_{\alpha i} \quad (3.1.13)$$

Diese Nebenbedingungen für $i = 1 \dots A$ können durch die entsprechenden Lagrange Multiplikatoren ε_i in das Variationsverfahren eingebunden werden und man erhält die Bedingung

$$\frac{d}{dd_{\lambda k}^*} \left[\langle \Phi | H | \Phi \rangle - \sum_{i=1}^A \varepsilon_i \sum_{\alpha} d_{\alpha i}^* d_{\alpha i} \right] = 0 . \quad (3.1.14)$$

Setzt man in diese Gleichung die Entwicklung (3.1.12) ein und führt die Ableitung aus, ergibt sich

$$\sum_{\beta} \langle \lambda | T | \beta \rangle d_{\beta k} + \sum_{j=1}^A \sum_{\beta\gamma\delta} \langle \lambda\gamma | V | \beta\delta \rangle d_{\gamma j}^* d_{\beta k} d_{\delta j} = \varepsilon_k d_{\lambda k} \quad (3.1.15)$$

für jedes k von 1 bis A und für alle λ . Diese Gleichung kann man umschreiben in

$$\sum_{\beta} \langle \lambda | H_0 | \beta \rangle d_{\beta k} = \varepsilon_k d_{\lambda k} \quad (3.1.16)$$

entspricht also der Eigenwertgleichung für den Hamiltonoperator H_0 definiert durch

$$\langle \lambda | H_0 | \beta \rangle = \langle \lambda | T | \beta \rangle + \sum_{j=1}^A \sum_{\gamma \delta} \langle \lambda \gamma | V | \beta \delta \rangle d_{\gamma j}^* d_{\delta j} \quad (3.1.17)$$

Das Variationsverfahren führt uns also zu einem Einteilchen Hamiltonoperator H_0 , dessen Eigenvektoren die Entwicklungskoeffizienten $d_{\lambda k}$ der gesuchten Einteilchenzustände $|k\rangle$ in der ursprünglich gewählten Basis λ sind. Die Lagrange Multiplier ε_k entpuppen sich als die Eigenwerte dieses Hamiltonoperators H_0 sind also die Einteilchenenergien dieses **Hartree-Fock** Hamilton Operators H_0 .

Damit ist im Prinzip das eingangs gestellte Problem, einen optimalen Einteilchenoperator als Näherung des Vielteilchenproblems zu definieren, gelöst. Es verbleibt allerdings noch ein "Schönheitsfehler": Die Bestimmung des Operators H_0 erfordert die Kenntnis der Koeffizienten $d_{\delta j}$. Andererseits erhält man aber diese Koeffizienten erst durch die Lösung der Eigenwertgleichung (3.1.16), also durch die Diagonalisation von H_0 . Die Ursache für dieses sogenannte Hartree-Fock Selbstkonsistenz Problem basiert natürlich auf der Tatsache, dass die ursprüngliche Bestimmungsgleichung (3.1.15) eine Gleichung mit nicht-linearen Termen in den gesuchten Koeffizienten darstellt.

Die Lösung dieses Hartree-Fock Selbstkonsistenz Problems ist zwar manchmal recht aufwändig aber im Prinzip einfach nämlich durch eine Iteration: Man startet mit einer Näherung nullter Ordnung für die gesuchten Hartree-Fock Zustände $|i\rangle$ und setzt sie z.B. gleich der angenommenen Basis, also

$$d_{\alpha i}^{(0)} = \delta_{\alpha i}.$$

Damit kann man für diese nullte Näherung den Operator H_0 gemäß (3.1.17) bestimmen und diagonalisieren. Dies führt zu einer hoffentlich besseren Näherung für die gesuchten Zustände. Diese neuen Koeffizienten ergeben eine verbesserte Näherung für H_0 . Man iteriert dieses Verfahren, bis die Eigenvektoren aus der Diagonalisation von H_0 denen zur Bestimmung von H_0 entsprechen, man also eine selbstkonsistente Lösung erzielt hat.

Die Konvergenz dieses iterativen Verfahrens hängt natürlich auch von der geeigneten Wahl des Anfangszustandes ab. Grundsätzlich gewährleistet die Variationsbedingung (3.1.14) natürlich nur einen Extremalwert, nicht notwendig ein Minimum. Das Iterationsverfahren wird aber stets zu Energieminima führen, da Maxima der Energie keinen stabilen Fixpunkt des Iterationsverfahrens liefern. Die Lösung der Hartree-Fock Gleichung kann natürlich als Ergebnis ein lokales Energieminimum und nicht das absolute Minimum ergeben. Hier kann man das Ergebnis durch Wiederholungen des Verfahrens mit unterschiedlicher Startbedingungen verifizieren.

Stellt man den Hamiltonoperator H_0 in der Hartree-Fock Basis, also in der Basis seiner Eigenzustände $|i\rangle$ dar, so ist er in dieser Basis diagonal (die Diagonalelemente

entsprechen den Einteilchenenergie ε_i) so nimmt (3.1.17) die Form an

$$\varepsilon_i = \langle i|H_0|i \rangle = \langle i|T|i \rangle + \sum_{j=1}^A \langle ij|V|ij \rangle \quad (3.1.18)$$

Ein System, das durch eine Slaterdeterminante beschrieben wird, entspricht dem Bild von Teilchen (hier Nukleonen), die sich unabhängig voneinander in einem Einteilchenpotential bewegen. Naiv würde man annehmen, dass die Gesamtenergie eines solchen Systems durch die Summe der Einteilchenenergien gegeben ist. Ein Vergleich von (3.1.10) mit (3.1.18) zeigt aber, dass dies im Fall der Hartree-Fock Lösung nicht gegeben ist. Es gilt vielmehr

$$E = \sum_{i=1}^A \frac{1}{2} (\langle i|T|i \rangle + \varepsilon_i) \quad (3.1.19)$$

Diese Abweichung von der Bewegung in einem extern gegebenen Einteilchenpotential ist natürlich darin begründet, dass das Hartree-Fock Potential aus einer 2-Teilchen Wechselwirkung erwächst.

Das Hartree-Fock Potential weist aber gegenüber einfachen Einteilchenpotentialen auch noch eine weitere Eigenart auf. Übliche Einteilchenpotentiale sind lokal, d.h. in der Ortsdarstellung gilt

$$\langle \vec{r}'|U|\vec{r} \rangle = U(\vec{r})\delta(\vec{r}' - \vec{r}).$$

Andererseits ist die Einteilchendichte, die für unsere Slaterdeterminante definiert ist durch den Operator

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^A |i \rangle \langle i| \quad (3.1.20)$$

nicht lokal. Es gilt ja

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}'|\hat{\rho}|\vec{r} \rangle &= \sum_{i=1}^A \langle \vec{r}'|i \rangle \langle i|\vec{r} \rangle \\ &= \sum_{i=1}^A \varphi_i(\vec{r}')\varphi_i^*(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3.1.21)$$

Die Dichtematrix für $\vec{r} = \vec{r}'$ entspricht der einfachen Vorstellung einer Dichte als Summe von Einteilchendichten

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^A \rho_i(\vec{r}) = \sum_{i=1}^A |\varphi_i(\vec{r})|^2 \quad (3.1.22)$$

Wir gehen davon aus, dass auch die Zweiteilchenwechselwirkung lokal ist, dass also für das nicht antisymmetrisierte Produktmatrixelement in der Ortsdarstellung gilt

$$\langle \vec{r}_1', \vec{r}_2'|V|\vec{r}_1, \vec{r}_2 \rangle = V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\delta(\vec{r}_1' - \vec{r}_1)\delta(\vec{r}_2' - \vec{r}_2), \quad (3.1.23)$$

wobei das Potential $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ in der Regel nur vom Abstand der wechselwirkenden Teilchen $|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$ abhängen wird.

Wir wollen uns jetzt davon überzeugen, dass auch im Fall einer lokalen Zweiteilchenwechselwirkung das zugehörige Hartree-Fock Einteilchenpotential (vergleiche (3.1.18))

$$\langle \vec{x} | U | \vec{y} \rangle = \sum_{i=1}^A \langle \vec{x} | i | V | \vec{y} | i \rangle, \quad (3.1.24)$$

nicht-lokal ist. Dazu erinnern wir uns daran, dass die Matrixelemente der Zweiteilchenwechselwirkung in (3.1.24) antisymmetrisiert sind (siehe (3.1.2)). Damit und der Annahme einer lokalen Wechselwirkung wie in (3.1.23) erhalten wir für das Hartree-Fock Potential

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | U | \vec{y} \rangle &= \sum_{i=1}^A \int d^3 r_1 d^3 r_2 \langle \vec{x} | \vec{r}_1 \rangle \langle i | \vec{r}_2 \rangle V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ &\quad \times [\langle \vec{r}_1 | \vec{y} \rangle \langle \vec{r}_2 | i \rangle - \langle \vec{r}_2 | \vec{y} \rangle \langle \vec{r}_1 | i \rangle]. \end{aligned} \quad (3.1.25)$$

Der erste Term (d.h. erster Beitrag in der eckigen Klammer), der sogenannte Hartree Term ergibt

$$\langle \vec{x} | U | \vec{y} \rangle_H = \delta(\vec{x} - \vec{y}) \int d^3 r_2 V(\vec{x}, \vec{r}_2) \rho(\vec{r}_2) \quad (3.1.26)$$

und entspricht der einfachen Vorstellung eines Einteilchenpotentials, das durch die Wechselwirkung mit einer Dichteverteilung $\rho(\vec{r}_2)$ (hier die lokale Hartree-Fock Dichte aus (3.1.22)) entsteht. Darüber hinaus enthält (3.1.25) aber auch noch den zweiten Term, den Austausch- oder Fockterm, der eindeutig nichtlokal ist:

$$\langle \vec{x} | U | \vec{y} \rangle_F = \sum_{i=1}^A \varphi_i^*(\vec{x}) \varphi_i(\vec{y}) V(\vec{x}, \vec{y}), \quad (3.1.27)$$

mit der nicht-lokalen Einteilchendichte aus (3.1.21).

Während die Eigenwertgleichung für ein lokales Potential in der Ortsdarstellung in eine Differentialgleichung zur Bestimmung der Einteilchenenergien und Wellenfunktionen überführt werden kann:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + U(\vec{r}) \right\} \varphi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\vec{r}),$$

führt ein nicht-lokales Potential auf eine entsprechende Integro - Differentialgleichung der Form

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \right\} \varphi_i(\vec{r}) + \int d^3 y \langle \vec{r} | U | \vec{y} \rangle \varphi_i(\vec{y}) = \varepsilon_i \varphi_i(\vec{r}).$$

3.2 Kernmaterie und Neutronensterne

Im vorhergehenden Abschnitt wurde (hoffentlich) deutlich, dass selbst die einfachste Näherungsmethode zur Beschreibung des nuklearen Vielteilchenproblems, die Hartree-Fock Näherung, bereits einen gehörigen Aufwand erfordert, um in einem selbstkonsistenten Verfahren Einteilchenenergien und Wellenfunktionen und damit dann auch die totale Bindungsenergie eines Atomkerns zu bestimmen. Dieses Verfahren ist für eine erste Abschätzung, ob z.B. die Beschreibung der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung durch ein bestimmtes Modellpotential zu brauchbaren Ergebnissen führt, zu aufwändig.

Deshalb hat man sich in der Theoretischen Kernphysik ein einfaches Modellsystem konstruiert: die unendlich ausgedehnte **Kernmaterie**. Darunter versteht man ein System von Protonen und Neutronen, bei denen die Coulomb Wechselwirkung "abgeschaltet" ist, sodass wegen der Isospinsymmetrie Protonen und Neutronen entartet sind und deshalb $N = Z = A/2$, also die Zahl der Protonen gleich der der Neutronen ist. Deshalb spricht man auch häufig von **symmetrischer** Kernmaterie. Außerdem nimmt man an, dass das Volumen des Kerns V , genau so wie die Zahl der Nukleonen unendlich groß sind, mit der Nebenbedingung dass die Dichte ρ bei diesem Grenzübergang $V, A \rightarrow \infty$ konstant gehalten wird, also

$$V, A \rightarrow \infty \quad \text{mit} \quad \rho = \frac{A}{V} = \text{konst.}$$

Das System hat also keine Oberfläche und ist invariant unter einer Verschiebung im Raum. Diese Translationsinvarianz hat zur Folge, dass die Einteilchenfunktionen, Eigenzustände zum Impulsoperator, also durch eben Wellen dargestellt sind. In der Ortsdarstellung also in der Form

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad \text{mit} \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}. \quad (3.2.28)$$

(die Normierungskonstante der ebenen Welle wird noch diskutiert werden.)

Damit erübrigt sich die Suche nach den Hartree-Fock Wellenfunktionen und Zuständen. Das Hartree-Fock Einteilchenpotential U ist, genau so wie die Teilchendichte ρ unabhängig vom Ort. Wäre dieses Potential U lokal, also der Fock Term (3.1.27) vernachlässigbar, so wäre das Potential einfach eine Konstante U_0 . Die Nichtlokalität bewirkt jedoch im Allgemeinen eine Impulsabhängigkeit, die häufig approximiert wird in der Form²

$$U(|\vec{p}|) \approx U_2 \vec{p}^2 + U_0 \quad (3.2.29)$$

Dies führt dann zu Einteilchenenergien der Form

$$\varepsilon_{|\vec{p}|} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U_2 \vec{p}^2 + U_0$$

²Wegen der Invarianz des Systems unter einer Drehung kann das Potential nur vom Betrag des Impulses $|\vec{p}|$ abhängen

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m^*} + U_0 \quad \text{mit} \quad \frac{m}{m^*} = 1 + 2m U_2. \quad (3.2.30)$$

sodass das Spektrum der Einteilchenenergien häufig durch eine effektive Masse m^* charakterisiert wird. Unabhängig von dieser speziellen Parametrisierung werden wir im folgenden annehmen, dass die Einteilchenenergien ε durch eine monoton wachsende Funktion des Impulses gegeben sind.

Für eine genauere Beschreibung betrachten wir in einem ersten Schritt eine freies Quantengas von Fermionen, also $m^* = m$ und $U_0 = 0$. Ausserdem wollen wir uns zunächst auf eine Raumdimension beschränken. Das unendlich ausgedehnte System beschreiben wir durch eine Aneinanderreihung von Intervallen der Länge L . Die Wellenfunktionen in diesen Intervallen, wie etwa $(n-1)L \leq x \leq nL$ mit n eine ganze Zahl, sind dann durch die Forderung nach periodischen Randbedingungen auf den Grenzen dieser Intervalle beschränkt. Dies bedeutet, dass wir für jedes Teilintervall ebene Wellen mit Impulse p_j , bzw. Wellenzahlen k_j zulassen in der Form

$$k_j = \frac{p_j}{\hbar} = \frac{2\pi}{L} j \quad \text{mit} \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.2.31)$$

Die Impulseigenzustände haben also einen “Abstand”

$$\Delta p = \hbar \Delta k = \hbar \frac{2\pi}{L}. \quad (3.2.32)$$

Für jeden Zustand ergibt sich also ein Phasenraumvolumen

$$\Delta p L = 2\pi \hbar = h \quad (3.2.33)$$

entspricht also gerade dem Planckschen Wirkungsquantum $h = 2\pi \hbar$.

Zur Berechnung der Teilchenzahl der Hartree-Fock Slaterdeterminante für den Grundzustand dieses Systems, müssen wir die Zahl der Zustände mit einer Energie kleiner als die Fermienergie ε_F bestimmen, bzw. die Zahl der Zustände mit einem Betrag des Impulses $|\hbar k|$ kleiner als dem Fermiimpuls $\hbar k_F$.³ Also

$$A = n_{Entart} \sum_{|k_j| \leq k_F} = 4 \sum_{|k_j| \leq k_F} \quad (3.2.34)$$

Dabei steht n_{Entart} für die Entartung eines Impulseigenzustandes und ist damit in der symmetrischen Kernmaterie gleich 4 (2 für die möglichen Projektionen des Spins und 2 für den Isospin, also Proton und Neutron).

Das Phasenraumvolumen eines Zustandes im 3-dimensionalen Raum ist also entsprechend (3.2.33)

$$\Delta^3 p L^3 = h^3,$$

³Hier nutzen wir aus, dass die Einteilchenenergie eine monotone, mit dem Betrag des Impulses steigende Funktion sein soll.

und das Volumen für einen Zustand mit gegebener Wellenzahl, entsprechend (3.2.32)

$$\Delta^3 k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3. \quad (3.2.35)$$

Für die Teilchenzahl ergibt sich entsprechend (3.2.34)

$$\begin{aligned} A &= 4 \sum_{|k_j| \leq k_F} \\ &= 4 \sum_{|k_j| \leq k_F} \Delta^3 k \frac{L^3}{(2\pi)^3} \\ &= 4 \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3 k \\ &= 4 \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \end{aligned} \quad (3.2.36)$$

Bei dem Übergang zur zweiten Zeile wurde in der Summe eine 1 aus der Gl.(3.2.35) eingefügt und bei dem Übergang von der zweiten zur dritten Zeile wurde die Summe mit dem Element $\Delta^3 k$ durch ein entsprechendes Integral mit dem Volumenelement $d^3 k$ ersetzt. Aus dieser Gleichung für die Teilchenzahl ergibt sich für die Teilchendichte

$$\rho = \frac{A}{V} = \frac{A}{L^3} = \frac{4}{6\pi^2} k_F^3 \quad (3.2.37)$$

Analog zu (3.2.36) kann man auch die kinetische Energie der Nukleonen im Volumenelement L^3 berechnen

$$\begin{aligned} T &= 4 \sum_{|k_j| \leq k_F} \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m} \\ &= 4 \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3 k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ &= 4 \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi}{5} k_F^5 \\ &= \frac{3}{5} A \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \end{aligned} \quad (3.2.38)$$

mit A aus (3.2.36). Damit ergibt sich für die mittlere kinetische Energie pro Nukleon

$$\frac{T}{A} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (3.2.39)$$

Wir sehen also an diesen Überlegungen, dass die Beschreibung von unendlich ausgedehnter Kernmaterie signifikant einfacher ist, als die Berechnung eines Atomkerns mit

endlichen vielen Nukleonen und den Komplikationen, die mit der Gestalt seiner Oberfläche verbunden sind.

Die Berechnung eines solches Modellsystem wie die symmetrische Kernmaterie ist aber für Physiker nur dann sinnvoll, wenn es experimentelle Daten gibt, die es bei einer Berechnung der Kernmaterie zu reproduzieren gilt. Berechnungen der Kernmaterie liefern für jede angenommene Dichte ein Ergebnis z.B. für die Bindungsenergie der Kernmaterie pro Nukleon. Für eine Beschreibung des Verhaltens von Atomkernen sollte diese Energie pro Nukleon ein Minimum aufweisen, bei der Dichte, die der Dichte entspricht, die Atomkerne mit großer Massenzahl in ihrem Zentrum als optimale Kerndichte einnehmen. Diese optimale Dichte, man spricht auch von der **Sättigungsdichte der Kernmaterie** ρ_0 hat einen Wert von

$$\rho_0 = 0.16 \frac{1}{fm^3} \quad (3.2.40)$$

Nach (3.2.37) entspricht dieser Sättigungsdichte eine Wellenzahl k_F für die Nukleonen an der Fermikante von etwa

$$k_F \approx 1.36 fm^{-1}. \quad (3.2.41)$$

Die Bethe Weizsäcker Formel für die Bindungsenergie der Atomkerne (siehe (1.1.13)) liefert uns dann auch noch den Wert für die Energie pro Nukleon der Kernmaterie bei dieser Sättigungsdichte. Danach ist die Bindungsenergie von Kernmaterie mit $N = Z$, also ohne Oberfläche und ohne die Effekte der Coulombwechselwirkung gerade durch den Volumenterm gegeben und sollte daher dem Volumenterm entsprechen, also

$$\frac{E_{NucL.Matt.}}{A} = -a_V = -15.67 \text{ MeV} \quad (3.2.42)$$

betragen. Ziel von Berechnungen der Kernmaterie ist es also die Eigenschaften: Minimum der Energie bei der Sättigungsdichte mit einem Energiewert, der (3.2.42) entspricht, und damit den **Sättigungspunkt der Kernmaterie** zu reproduzieren.

3.2.1 Neutronensterne

Eine solche Berechnung für homogene unendlich ausgedehnte Kernmaterie ist aber nicht nur für das Modellsystem der symmetrischen Kernmaterie von Interesse. Ähnliche Rechnungen liefern auch die Zustandsgleichung von Neutronensternen und damit einen wichtigen Input für die Simulation solcher ausgebrannter Riesensterne.

Um dies zu erläutern betrachten wir die schematische Darstellung der Abb. 3.1, und die darin dargestellten Kräfte, die auf einen Volumenelement der stellaren Materie in der Kugelschale mit dem Abstand r vom Zentrum des Sterns wirken. Das Volumenelement habe die Größe $dV = df dr$ und enthält damit eine Masse

$$dm = \rho(r) dV = \rho(r) df dr, \quad (3.2.43)$$

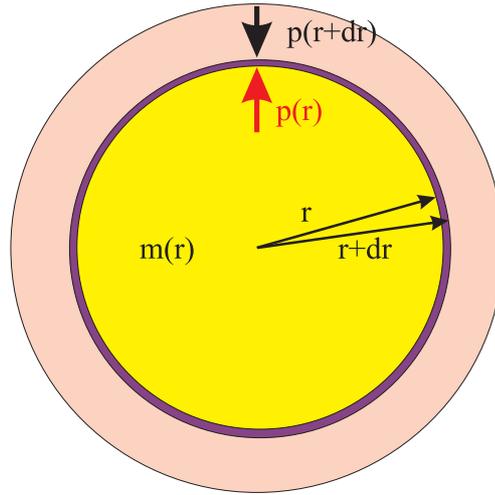


Abbildung 3.1: Kräfte auf ein Volumenelement in der Schale $[r, r + dr]$ eines Sterns

mit $\rho(r)$ für die Massendichte im Abstand r vom Zentrum. Auf dieses Massenelement wirkt zum einen die Gravitationskraft

$$\vec{K}_{\text{Grav}} = -\frac{G M(r) dm}{r^2} \hat{e}_r, \quad (3.2.44)$$

in Richtung auf das stellare Zentrum also in Richtung $-\hat{e}_r$. Die Kraft gleicht der Kraft, die auf die von einer Masse $M(r)$ im Zentrum auf die Masse dm im Abstand r ausgeübt wird (siehe Physik I), wobei $M(r)$ der Anteil der stellaren Masse ist, der sich ausgehend vom Zentrum bis zur Kugelschale mit Radius r angesammelt hat und G für die Gravitationskonstante steht.

Andererseits wirkt auf das Massenelement dm aber auch der Druck durch die umgebende Materie. Der Druck der innenliegenden Materie, $\mathcal{P}(r)$ versucht das Volumenelement nach außen zu drücken, während der Druck der außenliegenden Materie, $\mathcal{P}(r + dr)$, eine Gegenkraft ($K = \mathcal{P} df$) nach innen aufbaut. Insgesamt liefern die Druckkräfte also

$$\vec{K}_{\text{Grav}} = \underbrace{(\mathcal{P}(r + dr) - \mathcal{P}(r))}_{=d\mathcal{P}} df \hat{e}_r. \quad (3.2.45)$$

Im stationären Gleichgewicht kompensieren sich die Beiträge der verschiedenen Kräfte und es gilt

$$d\mathcal{P} df = -\frac{G M(r) \rho(r)}{r^2} dr df,$$

was sich umformen lässt in

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{P}}{dr} &= \frac{d\mathcal{P} d\rho}{d\rho dr} \\ &= -\frac{G M(r) \rho(r)}{r^2}. \end{aligned} \quad (3.2.46)$$

Dabei haben wir angenommen, dass der Druck nur von der Dichte abhängt, so dass die Anwendung der Kettenregel in der ersten Zeile gerechtfertigt ist. Die Information über die Eigenschaften der Materie sind in der sogenannten Zustandsgleichung der Materie $\mathcal{P}(\rho)$ enthalten geht über die Ableitung in (3.2.46) ein.

Wenn wir die Zustandsgleichung als bekannt voraussetzen können, ist es sinnvoll, (3.2.46) umzuschreiben auf die Form

$$\frac{d\rho}{dr} = -\frac{G M(r)\rho(r)}{r^2} \frac{1}{\frac{d\mathcal{P}}{d\rho}}. \quad (3.2.47)$$

Außerdem führen wir uns vor Augen, dass die Masse $M(r)$ sich vergrößert, wenn das Argument r um das infinitesimale Stück dr anwächst und zwar gerade um die Masse dM , die in der Kugelschale beim Radius r enthalten ist:

$$dM = M(r + dr) - M(r) = \rho(r) 4\pi r^2 dr,$$

was uns auf die Differentialgleichung

$$\frac{dM}{dr} = \rho(r) 4\pi r^2, \quad (3.2.48)$$

führt. Die beiden Differentialgleichungen (3.2.47) und (3.2.48) sind zwei gekoppelte Differentialgleichungen erster Ordnung zur Bestimmung der unbekannt Funktionen $M(r)$ und $\rho(r)$. Gibt man als Randbedingung dieser Differenzialgleichungen etwa die Werte dieser Funktionen bei $r = 0$ vor, so kann man diese Gleichungen z.B. mit numerischen Methoden integrieren und erhält die gesuchten Funktionen für beliebige Werte von r . Der Startwert $M(r = 0)$ ist dabei eindeutig vorgegeben, da ja die Masse im Kugelvolumen mit dem Radius $r = 0$ identisch null sein muss. Wir können also nur einen Startwert für die Dichte $\rho(0)$ frei vorgeben und können dann die Differentialgleichungen integrieren.

Das Ergebnis einer solchen Rechnung sind in der Abb. 3.2 dargestellt. Details der Rechnung, wie die Art der benutzten Zustandsgleichung, werden wir etwas weiter unten diskutieren. Man erkennt an dieser Darstellung, dass die Dichte mit zunehmendem r abnimmt, bis sie schliesslich den Wert 0 erreicht. Dieser Wert bezeichnet den Radius des Sterns. In der gleichen Figur sind auch die Ergebnisse die Masse $M(r)$ aufgetragen. Diese Massenfunktion wächst an bis zum Radius R und erreicht dort die Gesamtmasse des Sterns. Für $r > R$ bleibt $M(r)$ konstant, da in diesem Bereich die Massendichte ρ identisch null ist.

Die Berechnung des Druckes eines entarteten Fermigases ergibt sich aus den Ergebnissen des vorhergehenden Abschnittes. Nach (3.2.38) ist die kinetische Energie für A Fermionen in einem Volumen V proportional zu k_F^2 . Da die Dichte $\rho = A/V$ dieser Fermionen proportional zu k_F^3 ist (siehe (3.2.37)) gilt für den Druck, also die Änderung

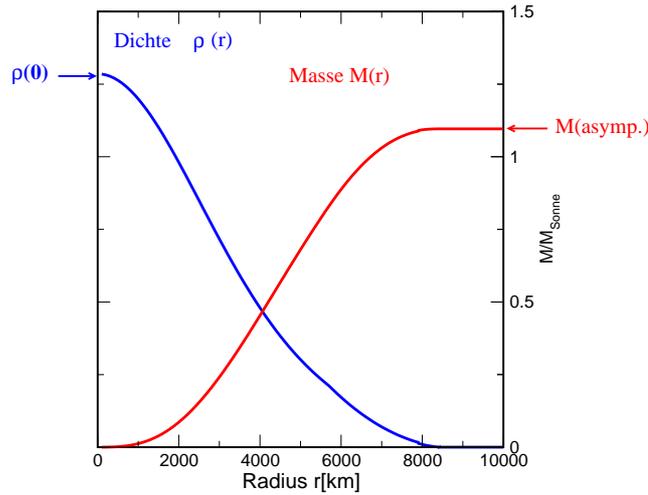


Abbildung 3.2: Ergebnisse der Integration der Gleichungen (3.2.47) und (3.2.48). Der Startwert für $\rho(0)$ und die Zustandsgleichung wurden so gewählt, dass die Ergebnisse einen Weissen Zwerg simulieren mit einer Masse von etwa 1.1 mal der Sonnemasse und einem Radius von cirka 8000 km.

dieser Energie mit dem Volumen

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P} &= -\frac{dT}{dV} \\
 &= \frac{2T}{3V} \\
 &= \frac{n_{Entart}}{6\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^5}{10m}, \tag{3.2.49}
 \end{aligned}$$

mit n_{Entart} wie oben dem Entartungsgrad der fermionischen Einteilchenzustände. Man sieht also, dass der Druck proportional zu k_F^5 und damit wegen (3.2.37) mit der Teilchendichte ρ proportional zu $\rho^{5/3}$ anwächst. Außerdem sieht man, dass der Druck proportional zu $1/m$ ist, also besonders stark für Fermionen mit kleiner Masse. Für den Fermidruck sind also in normaler Materie vor allen Dingen die Elektronen verantwortlich.

Benutzt man die Zustandsgleichung (3.2.49) für das Elektronengas in den Differenzialgleichungen (3.2.47) und (3.2.48) für die Berechnung von Massen und Radien von Kernen, so erhält man Ergebnisse, die charakteristisch sind für die sogenannten **Weissen Zwerge**⁴. Weisse Zwerge werden also nicht durch thermischen Druck sondern

⁴Bei Benutzung der Zustandsgleichung (3.2.49) muss man berücksichtigen, dass die hier hergeleitete Zustandsgleichung nur für nichtrelativistische Elektronen gültig ist. Bei Dichten, bei denen die Geschwindigkeit eines Elektrons mit dem Fermiimpuls von der Größenordnung der Lichtgeschwindigkeit wird, muss man die relativistische Energie Impuls Beziehung benutzen.

durch den Fermidruck der Elektronen stabilisiert. Dies entspricht dem Szenarium z.B. in der Sonne, wenn sie einmal ausgebrannt sein wird.

Die Berechnung der Eigenschaften eines Weissen Zwerges ist relativ einfach: Man nimmt einen Wert für die Dichte im Zentrum des Systems $\rho(0)$ an und löst die gekoppelten Differentialgleichungen (3.2.47) und (3.2.48) für die Zustandsgleichung (3.2.49). Man findet dann die Lösungsfunktionen für $\rho(r)$ und $M(r)$, wie sie z.B. in Abb. 3.2 dargestellt sind. Startet man die Rechnung mit einer höheren zentralen Dichte, so erhält man typischerweise einen Stern mit einer größeren Masse und einem kleineren Radius. Die Weissen Zwerge sind relativ kompakte Objekte. Ein Weisser Zwerg, der etwa die Masse der Sonne hat, besitzt einen Radius von etwa 8000 km, was in etwa dem Radius der Erde entspricht.

Die maximale Masse eines Weissen Zwerges ist die sogenannte **Chandrasekhar Masse**, etwa das 1.4 fache der Sonnenmasse. Bei noch größeren Dichten ergeben sich Fermi Energie für die Elektronen, die so groß sind, dass es energetisch günstiger wird, ein Proton und ein Elektron im Sinne einer Elektroneneinfang Reaktion in ein Neutron umzuwandeln



Dadurch verschwinden also die Elektronen, die für den Druck verantwortlich sind, der einen Weissen Zwerg stabilisiert und man erhält einen Stern, der im wesentlichen aus Neutronen besteht und deshalb auch den Namen **Neutronenstern** hat. Ein solcher Neutronenstern hat eine Dichte, die etwa der Dichte in einem Atomkern entspricht, also der Sättigungsdichte von symmetrischer Kernmaterie (3.2.40) entspricht. Er ist also praktisch ein riesiger Atomkern mit einem Radius von einigen Kilometern, der allerdings fast nur aus Neutronen besteht. Typischerweise hat man etwa die Masse einer Sonne zusammengepackt in einem Neutronenstern mit dem Radius von 10 km, was einer Massendichte von $10^{15} \text{ g cm}^{-3}$ entspricht.

Die bisher diskutierte Zustandsgleichung für ein entartetes Fermigas ist natürlich zu grob für realistischere Berechnungen von Neutronensternen. So ist die Erstellung entsprechender Zustandsgleichungen ein zentrales Feld aktueller Forschung in der Theoretischen Kernphysik. Dazu müssen ganz unterschiedliche Dichtebereiche erfasst werden. Dies reicht vom Inneren des Neutronensterns wo die hohen Dichten Raum geben für sehr exotische Formen der Materie, wie z.B. ein Quark - Gluon Plasma bis zum Rand der Neutronensterne, wo man mit abnehmender Dichte den Übergang von Materie mit einer homogenen Dichte zu isolierten Atomkernen beschreiben muss. Wegen der für diesen Übergang vorhergesagten quasinuklearen Strukturen spricht man von der Kruste der Neutronensterne auch von der **Pasta Phase** der nuklearen Materie (siehe auch Abb.3.3).

Dabei wird deutlich, dass ein Neutronenstern eben nicht nur aus Neutronen besteht. Bei jeder Dichte stellt sich das Gleichgewicht für die nukleare Reaktion des β -Zerfalls

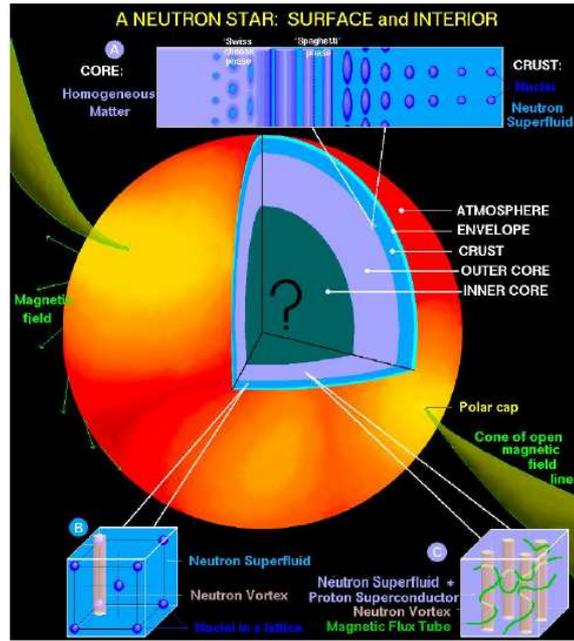


Abbildung 3.3: Skizze der verschiedenen Strukturen in einem Neutronenstern

aus (3.2.50) ein. Dies führt zu einem Energiegleichgewicht von

$$\varepsilon_n(k_{Fn}) + m_n c^2 = \varepsilon_p(k_{Fp}) + M_p c^2 + \sqrt{m_e^2 c^4 + c^2 \hbar^2 k_{Fp}^2} \quad (3.2.51)$$

Dabei bezeichnen m_n , m_p , m_e die Massen von Neutronen, Protonen und Elektronen, ε_n und ε_p die Einteilchenenergien von Protonen und Neutronen als Funktion der Wellenzahl und k_{Fn} bzw. k_{Fp} sind die jeweiligen Wellenzahlen für die Fermiimpulse. Zu beachten ist dabei, dass wegen der Ladungserhaltung die Dichte der Elektronen gleich der Dichte der Protonen sein muss und damit auch die zugehörigen Wellenzahlen identisch sind $k_{Fp} = k_{Fe}$.

Bei höheren Dichten können auch weitere exotische Baryonen und Leptonen stabil erzeugt werden, was dann zu einer Zusammensetzung führen kann, wie sie in Abb. 3.4 dargestellt ist.

Die bisher diskutierten Eigenschaften beziehen sich alle auf Materie mit einer homogenen Dichte. Es ist jedoch selbstverständlich, dass es in der Kruste der Neutronensterne einen Übergang geben muss von der "normalen" Materie bei niedrigen Dichten zu der Materie mit der homogenen Dichteverteilung der Baryonen bei den höheren Dichten im inneren Bereich der Kruste. Dieser Übergang ist einerseits von besonderem Interesse, weil viele der möglicherweise beobachtbaren Eigenschaften von Neutronensternen durch die Eigenschaften dieser Kruste dominiert sind. Andererseits ist dieser Übergang von einer "gasartigen" Phase von isolierten, nicht wechselwirkenden Atomkernen, zu einer ausgedehnten Flüssigkeit baryonischer Materie ein interessantes Beispiel für den

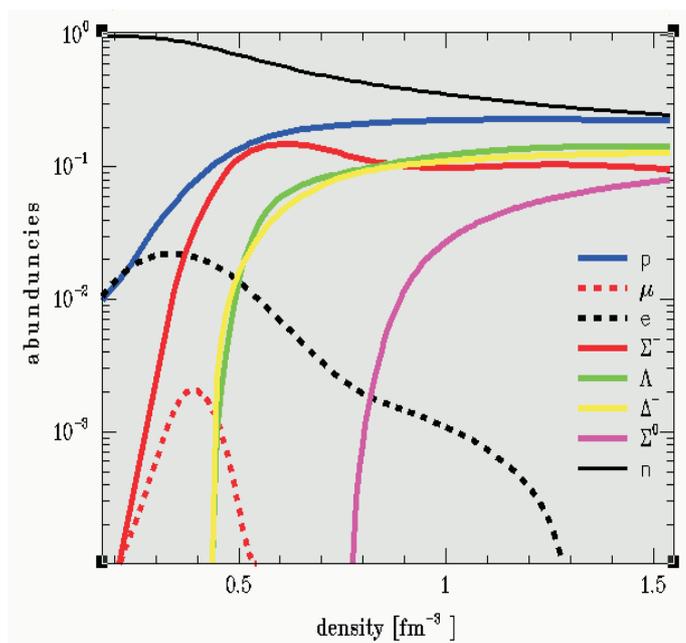


Abbildung 3.4: Vorhersage über die Zusammensetzung der Materie eines Neutronensterns bei den verschiedenen Dichten

Übergang von der gasförmigen in die flüssige Phase eines von der Quantenmechanik dominierten Vielteilchensystems.

Die normale Materie bei niedrigen Dichten besteht dabei aus normalen Atomkernen auf einem Gitter, die stabilisiert werden durch den Fermidruck des entarteten Elektronengases. Dies gilt bis zu den Dichten eines Weissen Zwerges. Mit zunehmender Dichte erhöht sich über den oben beschriebenen inversen β Zerfall (3.2.50), bzw. dem Einfang von Elektronen, der Neutronenanteil der Kerne.

Mit zunehmender Neutronenzahl werden Atomkerne generiert, die einzelne Neutronen nicht mehr binden, sodass sich eine Struktur ergibt von neutronenreichen Atomkernen, eingebettet in einem “See” von freien Nukleonen. Bei weiter anwachsender Dichte rücken diese neutronenreichen Atomkerne immer näher zusammen, die werden deformiert und entwickeln fadenähnliche Strukturen (Spaghetti) hoher Nukleonendichte in dem Neutronensee. Bei weiter anwachsender Dichte verbinden sich diese “Fäden” zu Flächen (Lasagne), die schliesslich zu einer homogenen Struktur zusammengefügt werden.

Diese Strukturen haben dem Bereich des Neutronensterns, in dem sich der Übergang von isolierten Atomkernen zur homogenen Materie vollzieht, dem Namen “Pasta - Phase” eingebracht. Die Berechnung dieser quasinuklearen Strukturen erfolgt durch Hartree-Fock Rechnungen in einem 3-dimensionalen Quader unter Annahme periodischer Randbedingungen. Die Energien pro Nukleon solcher quasinuklearer Strukturen

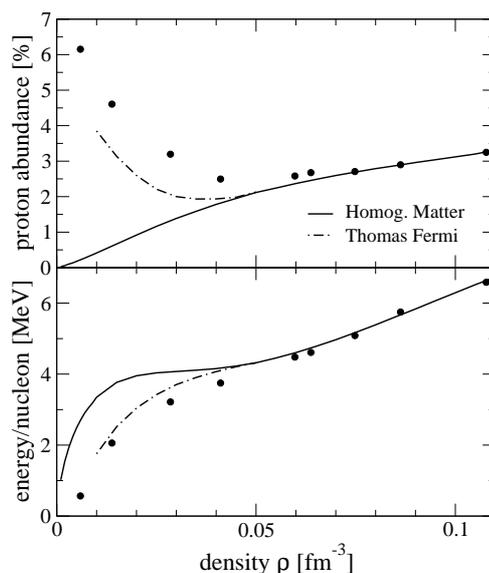


Abbildung 3.5: Vergleich der Energie pro Nukleon (untere Hälfte) und des Protonenanteils in der Kruste von Neutronensternen bei verschiedenen Dichten. Verglichen werden die Ergebnisse von Hartree-Fock Rechnungen homogener Materie (durchgezogene Linien) und solcher Rechnungen, die quasinukleare Strukturen zulassen.

im Vergleich sind im unteren Teil der Abb. 3.5 für verschiedene Dichten durch Punkte dargestellt und werden mit der Energie der entsprechenden homogenen Massenverteilung verglichen (durchgezogene Linie). Der obere Teil dieser Figur zeigt den Protonenanteil, der sich bei diesen unterschiedlichen Strukturen im β -Gleichgewicht ergibt. Weitere Details zu diesen Untersuchungen finden sich in der Arbeit P. Gögelein und H. Muther, Phys. Rev. C76 (2007) 024312.

3.3 Skyrme Ansatz der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung

Im Gegensatz zur elektromagnetischen Wechselwirkung oder zu Gravitation, gibt es im Fall der starken Wechselwirkung der Nukleonen keine mikroskopische Theorie, die diese Kräfte zwischen den Nukleonen quantitativ beschreibt. Ansätze, diese Wechselwirkungen der Nukleonen aus dem Quarkmodell der Nukleonen und der Quantenchromodynamik herzuleiten, führen zu sehr komplizierten Darstellungen der Wechselwirkung und sind auch im Vergleich zu experimentellen Ergebnissen zur Nukleon-Nukleon Wechselwirkung nicht sehr zufriedenstellend.

Deshalb haben sich in der Theoretischen Kernphysik ganz unterschiedliche Modelle der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung entwickelt, die auch ganz unterschiedliche Ansätze aufweisen. Die Familie der sogenannten realistischen Nukleon-Nukleon Wechselwirkung geht von einem Modell der Wechselwirkung aus (etwa dem Mesonen Austausch Modell) und passt die Parameter so an, dass die experimentellen Daten der 2-Nukleonensysteme (Bindungsenergie und Form des Deutereons und die Wirkungsquerschnitte bzw. Streuphasen der Nukleon-Nukleon Streuung) mit hoher Präzision reproduziert werden. Mit diesen Modellen versucht man dann das Vielteilchenproblem der Kernphysik zu lösen. Wir werden auf solche Ansätze noch zurückkommen.

Daneben aber gibt es auch phänomenologische Modelle der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung. Diese Modelle starten in der Regel mit einem recht einfachen Ansatz und passen die Parameter so an, dass z.B. in Hartree-Fock Rechnungen der Kernmaterie und einzelnen Atomkernen eine gute Übereinstimmung erzielt wird. Diese Modelle haben natürlich im Vergleich zu den realistischen Wechselwirkungen keine sehr hohe "predictive power", sind aber häufig sehr hilfreich, Einzelheiten nuklearer Strukturen zu beschreiben.

Ein sehr prominentes Beispiel für solche effektive Wechselwirkungen ist die Familie der sogenannten Skyrme Kräfte⁵

Im Abschnitt 3.1 wurde gezeigt, dass der Austauschterm des Hartree-Fock Einteilchenpotentials zu einem nichtlokalen Potential führt (3.1.27), es sei denn das Potential der Nukleon-Nukleon (NN) Wechselwirkung gleicht einer $\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \delta(\vec{r})$ Funktion, d.h. ist nur dann von 0 verschieden, wenn die wechselwirkenden Nukleonen sich am gleichen Ort befinden. Man spricht in diesem Fall von einer Kontaktwechselwirkung oder einer Wechselwirkung der Reichweite 0:

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (3.3.52)$$

Zwar ist die NN Wechselwirkung von sehr kurzer aber doch endlicher Reichweite. Es

⁵Der Namensgeber für diese Kräfte T.H.R. Skyrme hat eine erste Version dieses Typs bereits 1956 vorgeschlagen (siehe auch Nucl. Phys. 9 (1959) 615). Aktuellere Versionen finden sich z.B. in P.G. Reinhard, Rep. Prog. Phys. 52 (1985) 439.

liegt deshalb nahe, diese kurze Reichweite in einer Taylorreihe zu entwickeln. Dazu betrachten wir die Fouriertransformierte des Potentials, bzw. die Matrixelemente des Potentials in der Impulsdarstellung. Nimmt man an, dass die NN Wechselwirkung lokal ist und in der Ortsdarstellung nur vom Relativvektor der wechselwirkenden Nukleonen $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$ abhängt, ergibt sich für die Matrixelemente in der Impulsdarstellung

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | V | \vec{p}' \rangle &= \frac{1}{\hbar^3} \int d^3 r \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle V(\vec{r}) \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} V(\vec{r}) e^{i\frac{\vec{p}'\vec{r}}{\hbar}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r e^{i\frac{(\vec{p}' - \vec{p})\vec{r}}{\hbar}} V(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3.3.53)$$

mit den Relativimpulsen

$$\vec{p} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \quad \text{und} \quad \vec{p}' = \frac{1}{2}(\vec{p}_1' - \vec{p}_2').$$

Aus der Darstellung in (3.3.53) wird deutlich, dass die Matrixelemente in der Impulsdarstellung lediglich vom Impulstransfer

$$\vec{q} = \vec{p} - \vec{p}',$$

abhängen. Bei einer Kontaktwechselwirkung der Form (3.3.52) werden die Matrixelemente in der Impulsdarstellung unabhängig von den Impulsen und liefern eine Konstante. Abweichungen von dieser Kontaktwechselwirkung sollten also durch eine Entwicklung der Impulsabhängigkeit dargestellt werden. Da dabei keine Raumrichtung ausgezeichnet werden kann kommen für diese Entwicklung nur skalare Funktionen der Relativimpulse \vec{p} und \vec{p}' . Für die Potenzen niedrigster Ordnung ergeben sich also die skalaren Operatoren

$$\vec{p}^2, \quad \vec{p}'^2 \quad \text{und} \quad \vec{p}\vec{p}'.$$

Damit ergibt sich für

$$(2\pi\hbar)^3 \langle \vec{p} | V | \vec{p}' \rangle = V_0 + V_1(\vec{p}^2 + \vec{p}'^2) + V_2\vec{p}\vec{p}'. \quad (3.3.54)$$

Dabei haben wir berücksichtigt, dass wegen der Symmetrie, bzw. der Hermitizität, der Matrixelemente der Entwicklungskoeffizient vor dem Impulsquadrat \vec{p}^2 identisch sein muss wie der vor \vec{p}'^2 . Die Fouriertransformation dieser Entwicklung liefert und

$$V(\vec{r}) = V_0\delta(\vec{r}) + V_1(\hat{p}^2\delta(\vec{r}) + \delta(\vec{r})\hat{p}^2) + V_2\hat{p}\delta(\vec{r})\hat{p} \quad (3.3.55)$$

mit dem Impulsoperator

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{2i} (\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2),$$

wobei der Gradientoperator mit dem Index 1 die Ableitungen nach den Koordinaten des Teilchens 1 bezeichnet (entsprechendes gilt für 2).

Damit wird aber nur eine Wechselwirkung beschrieben, die unabhängig vom Spin und Isospin der wechselwirkenden Nukleonen ist. Will man jetzt berücksichtigen, dass die Nukleon-Nukleon Wechselwirkung z.B. auch von der Orientierung der Spins der beiden Teilchen abhängen könnte, so muss man sich vergegenwärtigen, dass ein beliebiger hermitescher Operator mit seiner Wirkung auf die Spinfunktion durch den Eins Operator und die Spinoperatoren \hat{s}_x , \hat{s}_y und \hat{s}_z dargestellt werden kann. Auch in diesem Fall müssen die Spinoperatoren für die wechselwirkenden Nukleonen insgesamt einen Skalar bilden, sodass sich die Spinabhängigkeit der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung in allgemeinsten Form auf 2 Terme reduziert, nämlich einen mit dem Einsoperator für die Spinoren beider wechselwirkender Nukleonen und der zweite mit dem Skalarprodukt aus den Spinvektoroperatoren für Nukleon 1 und Nukleon 2. Das heisst

$$\begin{aligned}\hat{V}(\vec{r}, s_1, s_2) &= \hat{V}_s(\vec{r}) \mathbf{1}_1 \mathbf{1}_2 + \hat{V}_v(\vec{r}) \frac{4}{\hbar^2} \vec{s}_1 \vec{s}_2 \\ &= \hat{V}_s(\vec{r}) + \hat{V}_v \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2\end{aligned}\quad (3.3.56)$$

Bei dem Übergang zur zweiten Zeile wurden die $\mathbf{1}$ Operatoren unterdrückt und die Spinoperatoren durch das Skalarprodukt der entsprechenden Vektoren gebildet aus den Paulimatrizen dargestellt. Beschränken wir uns im folgenden auf eine Kontaktwechselwirkung so ergibt sich

$$\begin{aligned}\hat{V}(\vec{r}, s_1, s_2) &= V_s \delta(\vec{r}) + V_v \delta(\vec{r}) \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \\ &= (V_s - V_v) \delta(\vec{r}) + V_v \delta(\vec{r}) \underbrace{(1 + \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)}_{=2P^\sigma} \\ &= t_0 \delta(\vec{r}) (1 + x_0 P^\sigma)\end{aligned}\quad (3.3.57)$$

Dabei bezeichnet man P^σ als den Spin-Austauschoperator. Wendet man diesen Operator nämlich auf einen Zustand an, bei denen die Spins s_1 und s_2 zu einem Gesamtspin S gekoppelt sind, so ergibt sich

$$\begin{aligned}P^\sigma |s_1 s_2 S \rangle &= \frac{1}{2} (1 + \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2) |s_1 s_2 S \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{2}{\hbar^2} (\hat{S}^2 - \hat{s}_1^2 - \hat{s}_2^2) \right) |s_1 s_2 S \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + 2 \left(S(S+1) - 2 \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right) \right) |s_1 s_2 S \rangle \\ &= \begin{cases} -1 |s_1 s_2 S \rangle & \text{für } S=0 \\ +1 |s_1 s_2 S \rangle & \text{für } S=1 \end{cases} \\ &= |s_2 s_1 S \rangle.\end{aligned}\quad (3.3.58)$$

Die letzte Gleichung ergibt sich aus der Eigenschaft der Clebsch-Gordan Koeffizienten (1.3.53)

$$C(s_2 m_2, s_1 m_1 | SM) = (-)^{1-S} C(s_1 m_1, s_2 m_2 | SM).$$

Analog zum Spinaustauschoperator kann man auch den entsprechenden Austauschoperator für den Isospin der wechselwirkenden Nukleonen definieren in der Form

$$P^\tau = \frac{1}{2} (1 + \vec{\tau}_1 \vec{\tau}_2) \quad (3.3.59)$$

wo τ_i die Pauli Matrizen bezeichnen, die auf die Isospinoren des Nukleons i wirken. Ergänzt werden diese Austauschoperatoren noch durch den Ortsaustauschoperator, der angewandt auf die Ortsdarstellung der 2-Teilchenzustandes definiert ist durch

$$P^r |\vec{r}_1, \vec{r}_2 \rangle = |\vec{r}_2, \vec{r}_1 \rangle . \quad (3.3.60)$$

Der Austauschoperator insgesamt ist dann das Produkt dieser 3 Austauschoperatoren

$$P = P^r P^\sigma P^\tau . \quad (3.3.61)$$

Für den antisymmetrisierten 2 Teilchenzustand der wechselwirkenden Nukleonen gilt insgesamt

$$P|12 \rangle_A = |21 \rangle_A = -|12 \rangle_A , \quad (3.3.62)$$

d.h. die Zustände sind Eigenzustände zum Permutationsoperator mit Eigenwert -1.

Die Kontaktwechselwirkung ist nur dann von null verschieden, wenn der antisymmetrisierte 2 Teilchenzustand Eigenzustand zum Ortsaustauschoperator mit dem Eigenwert 1 ist. Dies bedeutet aber, dass der antisymmetrisierte Zustand Eigenzustand zu $P^\sigma P^\tau$ mit Eigenwert -1 sein muss. Daher kann man bei der Kontaktwechselwirkung auch den Spinaustauschoperator P^σ auch ersetzen durch

$$P^\sigma = -P^\tau \quad \text{für Kontaktwechselwirkung} \quad (3.3.63)$$

Insgesamt ergibt sich als Ansatz für eine Skyrme Wechselwirkung mit einer spinabhängigen Kontaktwechselwirkung und einer spinunabhängigen Korrektur dieser Kontaktwechselwirkung gemäß (3.3.55)

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\text{Skyrme}} = & t_0 \delta(\vec{r}) (1 + x_0 P^\sigma) \\ & + \frac{1}{2} t_1 \left[\delta(\vec{r}) \frac{\hat{p}^2}{\hbar^2} + \frac{\hat{p}^2}{\hbar^2} \delta(\vec{r}) \right] + \frac{t_2}{\hbar^2} \hat{p} \delta(\vec{r}) \hat{p} \\ & + t_3 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \\ & + i \frac{W_0}{\hbar^2} (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \hat{p} \times \delta(\vec{r}) \hat{p} . \end{aligned} \quad (3.3.64)$$

Neben den bereits beschriebenen Termen in der ersten und zweiten Zeile enthält dieser Ansatz in der dritten Zeile eine Kontaktkraft für 3 Nukleonen und in der vierten Zeile einen Spin Bahn Term mit dem Skalarprodukt aus dem Gesamtspin der Nukleonen $(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)$ und einer Entwicklung des Bahndrehimpulses für die Relativbewegung bei kleinen Abständen.

Mit den Parametern

$$\begin{aligned}
 t_0 &= -1128 \text{ MeV fm}^3, & x_0 &= 0.45, \\
 t_1 &= 395 \text{ MeV fm}^5, & t_2 &= -95 \text{ MeV fm}^5, \\
 t_3 &= 14000 \text{ MeV fm}^6, & W_0 &= 120 \text{ MeV fm}^5,
 \end{aligned} \tag{3.3.65}$$

ist dann eine Version der Skyrme Wechselwirkung, die sogenannte Skyrme3 Wechselwirkung definiert.

Beschränkt man sich auf isospinsymmetrische Atomkerne ($N = Z$) mit abgeschlossenen Hauptschalen, wodurch die Beiträge des Spin-Austauschterms entfallen, so liefert die Skyrme Wechselwirkung einen Erwartungswert für eine Slaterdeterminante $|\Phi_0\rangle$ in der Form

$$\langle \Phi_0 | \hat{T} + \hat{V}_{\text{Skyrme}} | \Phi_0 \rangle = \int d^3r H(\vec{r}) \tag{3.3.66}$$

mit einer lokalen Energiedichte $H(\vec{r})$ der Form

$$\begin{aligned}
 H(\vec{r}) &= \frac{\hbar^2}{2m} \tau(\vec{r}) + \frac{3}{8} t_0 \rho^2(\vec{r}) + \frac{1}{16} t_3 \rho^3(\vec{r}) + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) \rho(\vec{r}) \tau(\vec{r}) \\
 &+ \frac{1}{64} (9t_1 - 5t_2) (\vec{\nabla} \rho)^2 + \text{Beiträge proportional } W_0
 \end{aligned} \tag{3.3.67}$$

mit der Nukleonendichte

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^F |\varphi_i(\vec{r})|^2 \tag{3.3.68}$$

und der kinetischen Energiedichte

$$\tau(\vec{r}) = \sum_{i=1}^F |\vec{\nabla} \varphi_i(\vec{r})|^2 \tag{3.3.69}$$

Dabei bezeichnen φ_i für $i = 1 \dots F$ die Einteilchenwellenfunktionen der in der Slaterdeterminaten $|\Phi_0\rangle$ besetzten Einteilchenzustände.

Als Beispiel sind in der Abb. 3.6 die Ergebnisse von Hartree-Fock Rechnungen des Kerns ^{48}Ca berechnet mit Skyrme3 für diese Dichten dargestellt.

Die 3-Teilchenwechselwirkung mit dem Parameter t_3 führt in der Energiedichte (3.3.67) zu einem Beitrag, der proportional zu ρ^3 ist. Ein solcher Beitrag kann auch als eine 2-Teilchenwechselwirkung (dies führt zu einem Energiebeitrag proportional ρ) interpretiert werden, die linear von der Dichte ρ abhängt. Wir werden auf mögliche Ursachen solcher dichteabhängiger Nukleon-Nukleon Wechselwirkung noch zurückkommen.

Für unendlich ausgedehnte, homogene Kernmaterie ist die Dichte unabhängig vom Ort \vec{r} , sodass die Beiträge in (3.3.67) die den Gradienten der Dichte $\vec{\nabla} \rho$ enthalten verschwinden. Ebenso trägt auch der Spin-Bahn Term mit dem Parameter W_0 nicht

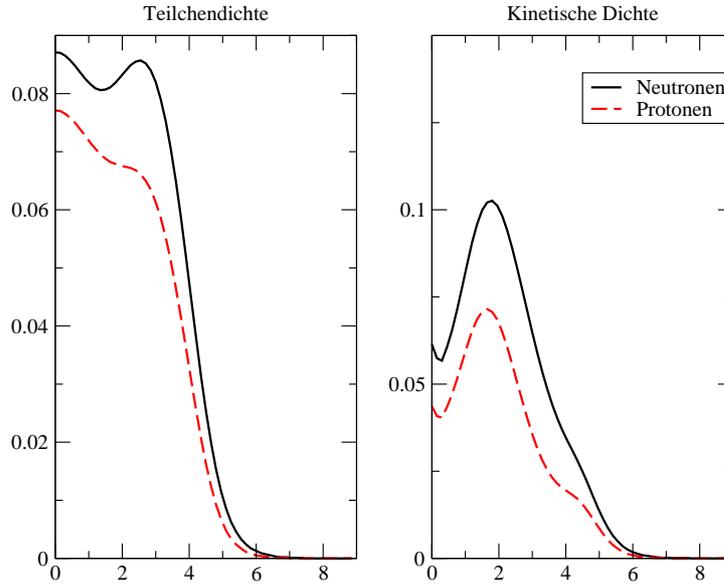
^{48}Ca , Skyrme 3

Abbildung 3.6: Beispiel für die Dichten $\rho(r)$ und $\tau(r)$ berechnet in Hartree-Fock Rechnungen für ^{48}Ca .

bei. Die Dichten ρ und τ sind in diesem Fall als Zahlenwerte gegeben und über

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{2}{3\pi^2} k_F^3 \\ \tau &= \frac{2}{3\pi^2} \frac{3}{5} k_f^5 = \frac{3}{5} \rho k_F^2\end{aligned}\quad (3.3.70)$$

direkt mit der Wellenzahl k_F des Fermiimpulses verknüpft, wie wir im Abschnitt 3.2 gezeigt haben.

Die Terme in (3.3.67) mit der kinetischen Energiedichte τ können zusammengefasst werden zu

$$\frac{\hbar^2}{2m} \tau + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) \rho \tau = \frac{\hbar^2}{2m^*} \tau. \quad (3.3.71)$$

Durch diese Gleichung wird eine effektive Masse definiert für die gilt

$$\frac{m^*}{m} = \left(1 + \frac{2m}{\hbar^2} (3t_1 + 5t_2) \rho \right)^{-1}.$$

Die Einführung einer effektiven Masse dient an verschiedenen Stellen in der Kernphysik (und auch in anderen Vielteilchen - Quantensystemen) zur Parameterisierung ganz unterschiedlicher Phänomene. Hier resultiert die effektive Masse aus der Impulsabhängigkeit der Skyrme Wechselwirkung, die eingeführt wurde um die Nichtlokalität des Hartree-Fock Potentials in einfacher Form darzustellen.

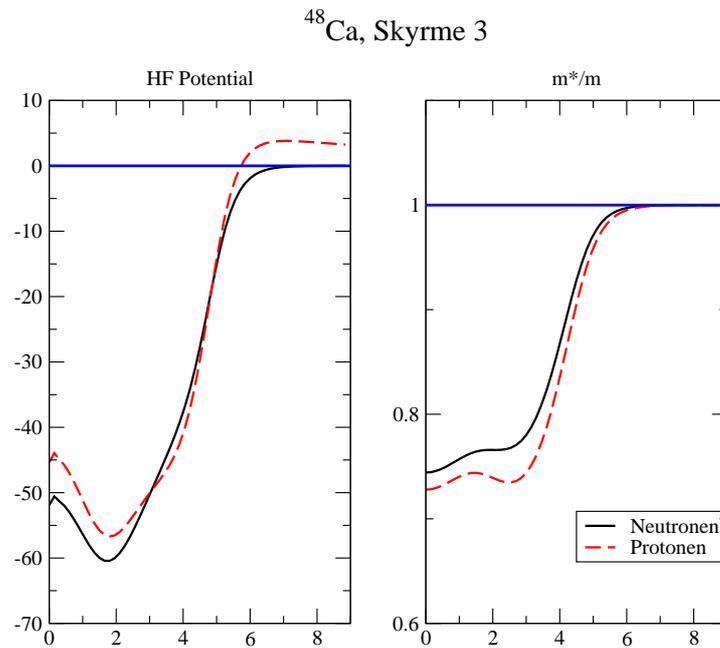


Abbildung 3.7: Beispiel für das Potential $U(r)$ und die effektive Masse $m^*(r)/m$ berechnet in Hartree-Fock Rechnungen für ^{48}Ca .

Als Beispiele für das lokale Potential $U(r)$ und diesem Verhältnis m^*/m sind in Abb. 3.7 Ergebnisse von Hartree-Fock Rechnungen für ^{48}Ca dargestellt.

Im Vergleich zur Bethe-Weizsäcker Massenformel, bei der 5 Parameter erforderlich waren, um die Bindungsenergien der Atomkerne zu beschreiben, benötigt die Hartree-Fock Methode mit der Skyrme Parameterisierung der NN Wechselwirkung 6 Parameter, um eine Beschreibung dieser Energien mit ähnlicher Genauigkeit zu erzielen. Was ist also der Fortschritt vom einfachen Tröpfchenmodell zur deutlich komplizierteren Hartree-Fock Beschreibung? Zur Beantwortung dieser Frage sei daran erinnert, dass hier zu berücksichtigen ist:

- Das Hartree-Fock Verfahren enthält auch die Effekte von Schalenstrukturen und ist daher gerade bei der Beschreibung charakteristischer Eigenschaften einzelner Atomkerne sehr viel zuverlässiger als das Tröpfchenmodell, das nur die globale Abhängigkeit von den Nukleonenzahlen erfasst.
- Das Hartree-Fock Verfahren liefert auch Ergebnisse für die Form der Dichteverteilung von Protonen und Neutronen. Dies gilt sowohl für die radiale Form der Dichteverteilung als auch für mögliche Abweichungen von der Kugelgestalt.
- Das Hartree-Fock Verfahren liefert auch das Einteilchenspektrum und macht damit Aussagen über die Drehimpulsquantenzahlen von Atomkernen mit ungerader

Nukleonenzahl.

- Diese Einteilchenenergien sind eine wichtige Voraussetzung für die komplexeren Kernstrukturrechnungen, wie wir das am Beispiel der Schalenmodellrechnungen kennengelernt haben.
- Wir werden in den folgenden Abschnitten sehen, wie die Ergebnisse von Hartree-Fock Rechnungen auch in anderer Weise als Basis für Kernstrukturrechnungen benutzt wird, die Information über die Anregungsmoden von Atomkernen liefert.

3.4 Walecka Modell der Kernmaterie

In diesem Abschnitt soll das sogenannte Walecka Modell⁶ für die Beschreibung der Kernmaterie vorgestellt werden.

3.4.1 Feldtheorie für “Dummies”

Ausgangspunkt dieses Modells ist ein System von wechselwirkenden Dirac Teilchen (Nukleonen, repräsentiert durch ein Dirac Feld Ψ), skalaren Teilchen (σ -Mesonen, repräsentiert durch das Skalarfeld Φ) und Vektorteilchen (ω -Mesonen, repräsentiert durch das Vektorfeld A^μ). Die Gleichungen für die Felder der freien nicht wechselwirkenden Teilchen ergeben sich aus den Lagrangedichten für die freien Teilchen, also etwa im Fall des skalaren σ Mesons gegeben durch

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \frac{1}{2} \left(\hbar^2 \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - m_\sigma^2 c^2 \phi^2 \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{c^2} \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 - \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 - \left(\frac{d\phi}{dy} \right)^2 - \left(\frac{d\phi}{dz} \right)^2 - \frac{m_\sigma^2 c^2}{\hbar^2} \phi^2 \right) \quad (3.4.72)\end{aligned}$$

Dabei bezeichnet m_σ die Masse des σ Mesons Diese Lagrangedichte stellt einen Lorentzskalar dar ist also invariant unter einer Lorentz Transformation. Dies ist eine notwendige Voraussetzung für eine Lagrangedichte, die den Ansprüchen der Relativitätstheorie genügen soll, denn nur so ist gewährleistet, dass auch das Wirkungsintegral und damit das Variationsprinzip unabhängig vom Koordinatensystem ist.

Das Variationsprinzip zur Bestimmung des gesuchten Feldes

$$\delta \int \mathcal{L} dt d^3r = 0$$

führt dann auf die Euler - Lagrange Gleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\phi}{dt}} + \sum_{k=1}^3 \frac{d}{dx_k} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\phi}{dx_k}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = 0. \quad (3.4.73)$$

Diese Bewegungsgleichung kann man dann umschreiben in die relativistische Nomenklatur auf die Form

$$\partial_\mu \frac{d\mathcal{L}}{d\partial_\mu \phi} - \frac{d\mathcal{L}}{d\phi} = 0 \quad (3.4.74)$$

⁶Dieses Modell ist nach dem “Erfinder” dieses Modells J.D. Walecka benannt. Eine genauere Beschreibung dieses Modells und darauf aufbauender Entwicklungen findet sich z.B. in B.D. Serot und J.D. Walecka, *Advances in Nuclear Physics*, Vol. 16 (1986)

Für die Lagrangedichte (3.4.72) ergibt sich dann

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{c^2} \frac{d^2 \phi}{dt^2} - \frac{d^2 \phi}{dx^2} - \frac{d^2 \phi}{dy^2} - \frac{d^2 \phi}{dz^2} + m_\sigma^2 c^2 \phi \\ &= [\square + m_\sigma^2 c^2] \phi. \end{aligned} \quad (3.4.75)$$

Dies ist die Klein Gordon Gleichung, die ja auch aus der relativistischen Quantenmechanik bekannt ist, mit dem D'Alembert Operator

$$\square = \partial^\mu \partial_\mu = \frac{1}{c^2} \frac{d^2}{dt^2} - \Delta. \quad (3.4.76)$$

Entsprechend ergibt sich das Feld für das freie Vektormeson aus der Lagrangedichte

$$\mathcal{L}(\partial_\mu A^\nu, A^\nu) = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\omega^2 c^2 A_\mu A^\mu. \quad (3.4.77)$$

mit der Masse des Vektormesons m_ω und dem Feldstärketensor

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu, \quad (3.4.78)$$

Diese Feldstärketensor ist antisymmetrisch

$$F^{\nu\mu} = -F^{\mu\nu},$$

und es gilt insbesondere

$$F^{\mu\mu} = 0.$$

Als kleine Übung wollen wir die Feldtheorie für die Klassische Elektrodynamik betrachten und bezeichnen die 4 Komponenten des Vektorfeldes in der Form

$$A^\mu = \begin{pmatrix} \phi \\ \vec{A} \end{pmatrix}. \quad (3.4.79)$$

Damit erhält man dann z.B. für das Element

$$\begin{aligned} F^{01} &= \partial^0 A^1 - \partial^1 A^0 \\ &= \frac{d}{dct} A_x - \frac{d}{d(-x)} \phi \\ &= -E_x, \end{aligned}$$

also bis auf das Vorzeichen die x -Komponente des elektrischen Feldes. Insgesamt ergeben sich dann die Elemente des Feldstärketensors in der Form

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.4.80)$$

Betrachtet man nun die Lagrangedichte (3.4.77) für ein masseloses Teilchen (Photonen sind ja masselos), also $m_\omega = 0$, und ergänzt die Lagrangedichte um die Wechselwirkung des Vektorfeldes mit einer vierdimensionalen Stromdichte

$$j^\nu = \begin{pmatrix} c\rho \\ \vec{j} \end{pmatrix}, \quad (3.4.81)$$

so ergibt sich für die Lagrangedichte

$$\mathcal{L}(\partial_\mu A^\nu, A^\nu) = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{4\pi}{c}j_\mu A^\mu. \quad (3.4.82)$$

Der Wechselwirkungsterm ist der einfachste Lorentzskalar, der sich aus der Stromdichte und dem Vektorfeld bilden lässt. Diese Lagrangedichte entspricht der Lagrangedichte für die Klassische Elektrodynamik. Die Bewegungsgleichung (3.4.74) für die Komponenten A^μ führen nämlich auf die Form

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} - \frac{4\pi}{c}j^\nu = 0, \quad (3.4.83)$$

was nichts anderes ist, als die kovariante Darstellung der inhomogenen Maxwellgleichung. So lautet nämlich z.B. diese Gleichung für $\nu = 0$

$$\partial_\mu F^{\mu 0} = \frac{4\pi}{c}j^0 = 4\pi\rho. \quad (3.4.84)$$

Setzt man hier die entsprechenden Komponenten des Feldstärketensors aus (3.4.80) ein, so ergibt sich daraus

$$\begin{aligned} \partial_\mu F^{\mu 0} &= \frac{d}{dct}0 + \frac{d}{dx}E_x + \frac{d}{dy}E_y + \frac{d}{dz}E_z \\ &= \vec{\nabla} \cdot \vec{E} \\ &= 4\pi\rho. \end{aligned} \quad (3.4.85)$$

Analog ergibt sich aus (3.4.83) für $\nu = 1$

$$\begin{aligned} \partial_\mu F^{\mu 1} &= \frac{d}{dct}(-E_x) + \frac{d}{dx}0 + \frac{d}{dy}B_z + \frac{d}{dz}(-B_y) \\ &= -\frac{1}{c}\frac{d}{dt}E_x + \frac{d}{dy}B_z - \frac{d}{dz}B_y \\ &= \left(-\frac{1}{c}\frac{d}{dt}\vec{E} + \vec{\nabla} \times \vec{B} \right)_x \\ &= \frac{4\pi}{c}\vec{j}_x. \end{aligned} \quad (3.4.86)$$

Die Gleichungen (3.4.85) und (3.4.86) sind aber gerade die Maxwellgleichungen für die elektromagnetischen Felder für eine Ladungs- und Stromdichte j^μ .

3.4.2 Diracteilchen

Im weiteren Verlauf dieses Abschnittes wollen wir zur Vereinfachung der Nomenklatur die natürlichen Einheiten der relativistischen Feldtheorie benutzen mit

$$\hbar = c = 1. \quad (3.4.87)$$

Die Diracgleichung für ein freies Diracteilchen der Masse m ergibt sich damit schliesslich aus der Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_{\text{frei}} = \bar{\Psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \Psi, \quad (3.4.88)$$

wobei γ^μ die üblichen 4×4 Gamma Matrizen bezeichnet

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \\ \gamma^k &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.4.89)$$

Das Diracfeld wird also durch einen 4-komponentigen Spinor

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}.$$

repräsentiert und $\bar{\Psi}$ steht für den adjungierten Spinor mit

$$\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma^0 = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, -\Psi_3^*, -\Psi_4^*). \quad (3.4.90)$$

Die Lagrangedichte (3.4.88) ist eine Funktion von den Feldern $\bar{\Psi}(\vec{r}, t)$, $\Psi(\vec{r}, t)$ und deren Ableitungen $\partial_\mu \Psi$. Die Lagrangedichte ist offensichtlich auch ein Skalar unter Lorentztransformation. Die Euler Lagrange Gleichung (3.4.74) für das Feld $\bar{\Psi}$ ergibt dann

$$\begin{aligned} 0 &= \partial_\mu \frac{d\mathcal{L}}{d\partial_\mu \bar{\Psi}} - \frac{d\mathcal{L}}{d\bar{\Psi}} \\ &= -\frac{d\mathcal{L}}{d\bar{\Psi}} \\ &= -(i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \Psi. \end{aligned} \quad (3.4.91)$$

Dies ist die Dirac Gleichung für ein freies Teilchen. Die Euler Lagrange Gleichung (3.4.74) bezogen auf das Feld Ψ

$$\begin{aligned} 0 &= \partial_\mu \frac{d\mathcal{L}}{d\partial_\mu \Psi} - \frac{d\mathcal{L}}{d\Psi} \\ &= \partial_\mu i\bar{\Psi} \gamma^\mu + m\bar{\Psi}, \end{aligned} \quad (3.4.92)$$

entspricht der adjungierten Dirac Gleichung für das Feld $\bar{\Psi}$.

Wir betrachten jetzt ein freies Teilchen, also einen Eigenzustand zu den Energie- und zu dem Energieoperator

$$\hat{p}^0 = i\partial^0 = i\partial_0 = \hat{p}_0, \quad (3.4.93)$$

und den Impulsoperatoren (für $x=1,2,3$)

$$\hat{p}^k = i\partial^k = i\frac{d}{dx_k} = -i\frac{d}{dx^k} = \frac{1}{i}\frac{d}{dx^k}. \quad (3.4.94)$$

Dies legt die Zeit- und Ortsabhängigkeit des Diracspinors fest in der Form einer ebenen Welle

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)} = \Psi e^{-ip^\mu x_{m\mu}},$$

mit

$$E = \pm\sqrt{\vec{p}^2 + m^2}. \quad (3.4.95)$$

sodass für den Impulsoperator gilt

$$\hat{p}\Psi = \frac{1}{i}\vec{\nabla}\Psi = \vec{p}\Psi,$$

und für den Energieoperator

$$\hat{E}\Psi = \hat{p}^0\Psi = i\frac{d}{dt}\Psi = E\Psi.$$

Der Diracspinor für die Lösung mit positiver Energie $E = +\sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$ hat dann die Form

$$\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi \\ \psi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\vec{p}\vec{\sigma}}{E+m} \end{pmatrix} |PS\rangle \quad (3.4.96)$$

wobei $|PS\rangle$ einen Pauli Spinor, also einen 2 komponentigen Spaltenvektor zur Charakterisierung des Spins bezeichnet. Dabei steht $\vec{p}\vec{\sigma}$ für das Skalarprodukt aus den Elementen des Vektors \vec{p} und den entsprechenden Pauli Matrizen, ist also eine 2×2 Matrix in der Form

$$\vec{a} \cdot \vec{\sigma} = \vec{\sigma} \cdot \vec{a} = a_x\sigma_x + a_y\sigma_y + a_z\sigma_z.$$

mit der Eigenschaft für beliebige Vektoren \vec{a} und \vec{b}

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b}\mathbf{1} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}). \quad (3.4.97)$$

Zum Beweis von (3.4.96) setzen wir diesen Ansatz in die Dirac Gleichung (3.4.91) ein und ersetzen die Energie- und Impulsoperatoren durch die jeweiligen Eigenwerte

$$0 = (i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\Psi \quad (3.4.98)$$

$$\begin{aligned}
&= (\gamma^0 E - \vec{\gamma} \vec{p} - m) \Psi \\
&= \begin{pmatrix} E - m & -\vec{\sigma} \vec{p} \\ \vec{\sigma} \vec{p} & -(E + m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\vec{p} \vec{\sigma}}{E + m} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} (E - m) - \frac{(\vec{\sigma} \vec{p})(\vec{\sigma} \vec{p})}{E + m} \\ \vec{\sigma} \vec{p} \left(1 - \frac{E + m}{E + m}\right) \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Während die zweite Zeile in diesem Ausdruck offensichtlich 0 ist, nutzen wir für die erste Zeile (3.4.97) in der Form

$$(\vec{\sigma} \vec{p})(\vec{\sigma} \vec{p}) = \vec{p}^2,$$

aus und formen die erste Zeile um zu

$$\frac{(E - m)(E + m) - \vec{p}^2}{E + m} = \frac{E^2 - m^2 - \vec{p}^2}{E + m} = 0,$$

sodass also die Gl.(3.4.98) in beiden Zeilen verifiziert ist. Mit der Normierung

$$\Psi = \mathcal{N} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\vec{p} \vec{\sigma}}{E + m} \end{pmatrix} |PS\rangle \quad \text{mit} \quad \mathcal{N} = \sqrt{\frac{E + m}{2m}} \quad (3.4.99)$$

ergibt sich

$$\bar{\Psi} \Psi = 1 \quad \text{und} \quad \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi = \frac{p^\mu}{m}$$

zu einem Lorentz Skalar ($\bar{\Psi} \Psi$) bzw. einem kontravarianten Vektor ($\bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi$) unter Lorentz Transformation.

Die Lagrangedichte für die freien, nicht wechselwirkenden Teilchen ist gegeben durch die Summe der jeweiligen Lagrangedichten der freien einzelnen Felder (siehe (3.4.72), (3.4.77) und (3.4.88)) plus entsprechende Wechselwirkungsterme zwischen den Mesonenfeldern und den Nukleonen. Da auch diese Wechselwirkungsterme durch einen skalaren Ausdruck gegeben sein müssen, ergibt sich für die einfachste Realisierung einer solchen Lagrangedichte

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} = & \bar{\Psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \Psi + \frac{1}{2} (\partial_\mu \Phi \partial^\mu \Phi - m_\sigma^2 \Phi^2) - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\omega^2 A^\mu A_\mu \\
& - g_\omega \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi A_\mu - g_\sigma \bar{\Psi} \Psi \Phi.
\end{aligned} \quad (3.4.100)$$

Dabei stehen g_ω (g_σ) und m_ω (m_σ) für die Kopplungskonstanten der Meson-Nukleon Wechselwirkung, bzw. die Massen der jeweiligen Mesonen.

Die Euler Lagrange Gleichungen für das Nukleonenfeld

$$\partial_\mu \frac{d\mathcal{L}}{d\partial_\mu \bar{\Psi}} - \frac{d\mathcal{L}}{d\bar{\Psi}} = 0,$$

führt zunächst einmal auf die Dirac Gleichung für die Nukleonen, die mit den Mesonenfeldern wechselwirken

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m - g_\sigma \Phi - g_\omega \gamma^\mu A_\mu) \Psi = 0. \quad (3.4.101)$$

Im folgenden wollen wir diese Gleichung im Ruhesystem der Kernmaterie betrachten. In diesem Koordinatensystem ist kein Raumpunkt ausgezeichnet. Ausserdem betrachten wir die stationäre Lösung, sodass die Mesonenfelder Konstante in Raum und Zeit sind. Im Ruhesystem der Kernmaterie gibt es auch keine ausgezeichnete Raumrichtung, sodass die raumartige Komponente des Vektorfeldes identisch null sein sollte, also nur A^0 von null verschieden ist. Übersetzt man jetzt noch die Dirac Gleichung von (3.4.101) von der Orts- in die Impulsdarstellung mit

$$i\partial_0 = E \quad \text{und} \quad i\vec{\nabla} = -\vec{p},$$

so ergibt sich für die Dirac Gleichung

$$\left[\gamma^0 (E - g_\omega A_0) - \vec{\gamma} \cdot \vec{p} - (m + g_\sigma \Phi) \right] \Psi = 0. \quad (3.4.102)$$

Mit den Abkürzungen

$$m^* = m + g_\sigma \Phi, \quad \text{und} \quad E^* = E - g_\omega A_0, \quad (3.4.103)$$

nimmt die Gleichung (3.4.102) die Form der freien Dirac Gleichung

$$\left[\gamma^0 E^* - \vec{\gamma} \cdot \vec{p} - m^* \right] \Psi = 0,$$

an und dementsprechend haben wir Lösungen mit positiver Energie

$$E^* = \sqrt{\vec{p}^2 + m^{*2}}, \quad \text{bzw.} \quad E = \sqrt{\vec{p}^2 + m^{*2}} + g_\omega A_0 \quad (3.4.104)$$

mit Dirac Spinoren entsprechend (3.4.96) in der Form

$$\Psi(\vec{r}, t) = \tilde{\mathcal{N}} e^{i(p\vec{r} - Et)} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{E^* + m^*} \end{pmatrix} |PS\rangle. \quad (3.4.105)$$

Bevor wir diese Ergebnisse weiter auswerten, wollen wir uns den Euler Lagrange Gleichungen für die Mesonenfelder zuwenden. Für das skalare Feld ergibt sich aus der Lagrangedichte (3.4.100) die Klein Gordon Gleichung für die die Felder Φ im Medium der Kernmaterie (vergleiche (3.4.75))

$$\left[\square + m_\sigma^2 \right] \Phi = -g_\sigma \bar{\Psi} \Psi \rightarrow -g_\sigma \rho_s \quad (3.4.106)$$

Wir haben bereits diskutiert, dass das Skalarfeld Φ wegen der Isotropie der Kernmaterie eine Konstante ist, sodass sich diese Gleichung reduziert auf

$$\Phi = -\frac{g_\sigma}{m_\sigma^2} \bar{\Psi} \Psi. \quad (3.4.107)$$

Für das Vektorfeld liefern die Euler Lagrange Gleichungen in Entsprechung zur Proca Gleichung

$$\left[\square + m_\omega^2 \right] A^\mu = g_\omega \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi \quad (3.4.108)$$

Wie bereits erwähnt ist hier nur die zeitartige Komponente A^0 relevant. Da auch diese nicht von Raum und Zeit abhängt reduziert sich die Gleichung (3.4.108) auf

$$A^0 = A_0 = \frac{g_\omega}{m_\omega^2} \bar{\Psi} \gamma^0 \Psi \rightarrow \frac{g_\omega}{m_\omega^2} \rho. \quad (3.4.109)$$

Die Quelle für diese zeitartige Komponente A^0 des Vektorfeldes ist natürlich nicht die Dichte eines Einteilchenzustandes sondern resultiert aus den Beiträgen aller Baryonen. Im Fall der Kernmaterie integrieren wir also die Beiträge aller Einteilchenzustände in (3.4.105) mit einem Impuls \vec{p} , der vom Betrag kleiner gleich dem Fermiimpuls k_F ist. Für die Dichte ρ ergibt sich also

$$\rho = 4\tilde{\mathcal{N}}^2 \int_0^{k_F} d^3p \left(1, \frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{E^* + m^*} \right) \gamma^0 \left(\frac{1}{\frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{E^* + m^*}} \right). \quad (3.4.110)$$

Dabei steht der Faktor 4 für den Entartungsgrad jedes Zustandes (2 für Spin und 2 für Protonen und Neutronen). Mit einer Normierung⁷

$$\tilde{\mathcal{N}}^2 = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{E^* + m^*}{2E^*}$$

ergibt sich dann

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{4}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3p \\ &= \frac{3}{2\pi^2} k_F^3 \end{aligned} \quad (3.4.111)$$

also die übliche Beziehung zwischen der Baryondichte und dem Fermiimpuls k_F . Neben dieser Baryondichte benötigen wir aber in (3.4.107) noch die skalare Dichte

$$\bar{\Psi} \Psi \rightarrow \rho_s.$$

Die entsprechende Rechnung ergibt

$$\begin{aligned} \rho_s &= 4\tilde{\mathcal{N}}^2 \int_0^{k_F} d^3p \left(1, \frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{E^* + m^*} \right) \gamma^0 \left(\frac{1}{\frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{E^* + m^*}} \right) \\ &= \frac{4}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3p \frac{m^*}{\sqrt{\vec{p}^2 + m^{*2}}} \end{aligned} \quad (3.4.112)$$

⁷Beachte diese Normierung unterscheidet sich von der Normierung (3.4.99), da hier auf die Teilchenzahl normiert werden muss

Für eine bestimmte Nukleonendichte ρ bzw. dem nach (3.4.111) entsprechendem Fermimpuls muss also zunächst einmal die skalare Dichte ρ_s bestimmt werden dadurch, dass man (3.4.112) und die Berechnung der effektiven Masse

$$m^* = m + g_\sigma \Phi \stackrel{(3.4.107)}{=} m - \frac{g_\sigma^2}{m_\sigma^2} \rho_s \quad (3.4.113)$$

konsistent löst. Daraus ergibt sich dann die Energieimpulsbeziehung

$$E = \sqrt{\vec{p}^2 + m^{*2}} + g_\omega A_0 \stackrel{(3.4.109)}{=} \sqrt{\vec{p}^2 + m^{*2}} + \frac{g_\omega^2}{m_\omega^2} \rho. \quad (3.4.114)$$

Durch die Wechselwirkung mit dem Vektorfeld, A^0 , das ja für das ω Meson steht, wird die Einteilchenenergie der Nukleonen weniger attraktiv, und zwar um eine Konstante, die proportional zur Nukleonendichte anwächst. Dies ist nicht verwunderlich, denn dieses Phänomen beobachtet man natürlich auch im Fall der elektromagnetischen Wechselwirkung: Die elektromagnetische Wechselwirkung von Teilchen gleicher Ladung führt zu einer Repulsion. Im Fall der elektromagnetischen Wechselwirkung ist aber die Masse der Vektorteilchen, also der Photonen, identisch null. Dies führt dann im Fall der unendlich ausgedehnten Materie zu einer unendlich großen Repulsion, da die entsprechende Konstante mit $1/m_\omega^2$ divergiert. Bei massiven Vektorbosonen bleibt die Repulsion endlich.

Die Wechselwirkung mit dem Skalarfeld Φ , bzw. den skalaren σ Mesonen die durch dieses Feld repräsentiert werden, führt zu einer Attraktion. Da die skalare Dichte der Nukleonen, ρ_s , positiv ist (siehe (3.4.112)) ist die effektive Masse m^* der Nukleonen in der Kernmaterie (3.4.113) kleiner als die Masse m der freien Nukleonen. Dies bedeutet aber, dass die Energie

$$\sqrt{m^{*2} + \vec{p}^2} = m^* + \frac{\vec{p}^2}{2m^*} + \dots,$$

kleiner ist, als die entsprechende Energie der freien Nukleonen. Man sieht aber auch, dass in diesem Fall der Beitrag zur Einteilchenenergie vom Impuls des Nukleons abhängt. In einer nicht relativistischen Theorie entspricht dies einem nicht-lokalen Einteilchenpotential.

Man sieht außerdem, dass die Ergebnisse für Kernmaterie nur von den Verhältnissen der Mesonen Kopplungskonstanten g und der entsprechenden Massen abhängen. Für die Wahl der Kopplungskonstanten

$$\frac{g_\sigma^2}{m_\sigma^2} m^2 = 267.1 \quad \text{und} \quad \frac{g_\omega^2}{m_\omega^2} m^2 = 195.9 \quad (3.4.115)$$

ergibt sich für die effektive Masse als selbstkonsistente Lösung der Gleichungen (3.4.112) und (3.4.113) die Ergebnisse, die im linken Teilbild der Abb. 3.8 dargestellt sind.

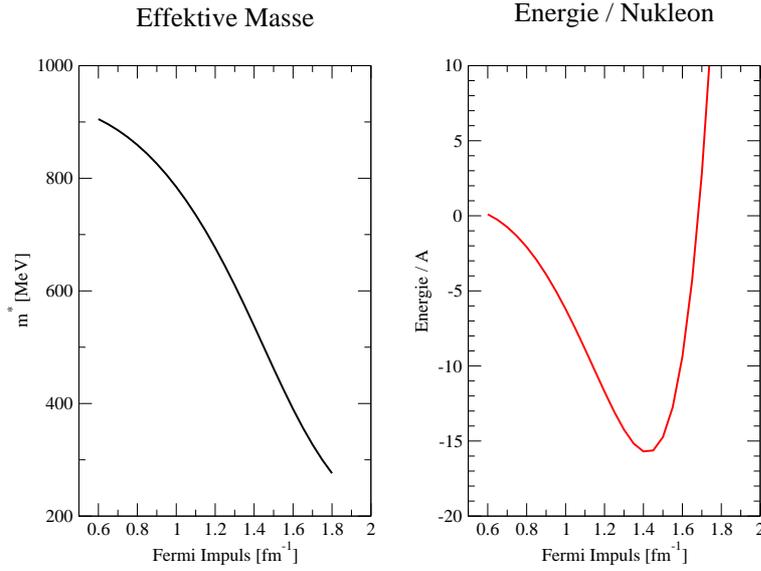


Abbildung 3.8: Ergebnisse für die effektive Masse m^* (links) und die Energie pro Nukleon von Kernmaterie als Funktion des Fermiimpulses k_F . Diese Ergebnisse wurden mit den Parametern aus (3.4.115) erzielt.

Die Gesamtenergie der Nukleonen plus Anteil der Mesonenfelder führt zu einer Energiedichte

$$\mathcal{E} = \frac{g_\omega^2}{2m_\omega^2} \rho^2 + \frac{g_\sigma^2}{2m_\sigma^2} \rho_s^2 + \frac{4}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3p \sqrt{\vec{p}^2 + m^{*2}}. \quad (3.4.116)$$

Dividiert man diese Energiedichte durch die Baryondichte ρ so erhält man die Energie pro Nukleon. Ergebnisse für diese Energie pro Nukleon als Funktion des Fermiimpulses sind im rechten Teil der Abb. 3.8 dargestellt. Man sieht, dass mit dieser Wahl der Parameter ein Minimum bei $k_F \approx 1.4 \text{ fm}^{-1}$ ergibt, was den empirischen Werten für den Sättigungspunkt (3.2.41) und (3.2.42) entspricht.

3.5 Relativistische Feldtheorie für endliche Kerne

3.5.1 Greensche Funktion für Mesonenfelder

Ausgangspunkt ist auch hier die Lagrangedichte von (3.4.100), bzw. die daraus resultierenden Euler Lagrange Gleichungen für die Felder bzw. Wellenfunktionen der Nukleonen (3.4.101) und der Mesonen (3.4.106) und (3.4.108). Wir betrachten wieder den stationären Fall, sodass die Ableitungen nach der Zeit verschwinden. Damit reduzieren sich die Feldgleichungen für die Mesonenfelder auf Differentialgleichungen in den Ortskoordinaten in der Form

$$\left[-\Delta + m_\sigma^2\right] \Phi = -g_\sigma \rho_s \quad (3.5.117)$$

für das skalare Feld und

$$\left[-\Delta + m_\omega^2\right] A^\mu = g_\omega \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi \quad (3.5.118)$$

für das Vektorfeld. Insbesondere die Klein - Gordon Gleichung (3.5.117) erinnert an die Poisson Gleichung der Elektrostatik

$$\Delta \phi = -4\pi \rho.$$

Ein Weg für die Lösung dieser Differentialgleichung bestand darin, eine Greensche Funktion zu definieren, für die gilt:

$$-\Delta G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (3.5.119)$$

womit dann mit der Greenschen Identität das Potential berechnet werden kann mit

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}) &= - \int d^3 r' \Delta G_E(\vec{r}, \vec{r}') \phi(\vec{r}') \\ &= - \int d^3 r' G_E(\vec{r}, \vec{r}') \Delta \phi(\vec{r}') \\ &= 4\pi \int d^3 r' G_E(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}') \end{aligned} \quad (3.5.120)$$

Die Greensche Funktion ist also die Gewichtsfunktion mit der eine Ladung an der Stelle \vec{r}' zum Potential ϕ an der Stelle \vec{r} beiträgt. Die Lösung der Gleichung zur Bestimmung der Greenschen Funktion (3.5.119) ist gegeben durch

$$G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (3.5.121)$$

Zum Beweis dieser Gleichung betrachten wir die Greensche Funktion für den Fall $\vec{r}' = 0$ und berechnen

$$-\Delta G_E(\vec{r}, 0) = -\frac{1}{4\pi} \Delta \frac{1}{r}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \frac{1}{r} \\
&= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \frac{r^2}{r^2} \\
&= \frac{1}{4\pi} \frac{0}{r^2} \\
&= \frac{1}{4\pi} \begin{cases} \infty & \text{für } r = 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \\
&= \delta(\vec{r}).
\end{aligned}$$

Die der Gleichung (3.5.119) entsprechende Bestimmungsgleichung für die Greensche Funktion zur Klein Gordon Gleichung (3.5.117) lautet

$$(-\Delta + m_\sigma^2) G_\sigma(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (3.5.122)$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung ist gegeben durch

$$G_\sigma(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{-m_\sigma |\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (3.5.123)$$

Zum Beweis dieser Lösung betrachten wir den Fall $\vec{r}' = \vec{0}$, also

$$G_\sigma(\vec{r}, \vec{0}) = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{-m_\sigma r}}{r},$$

und berechnen

$$\begin{aligned}
(-\Delta + m_\sigma^2) \frac{e^{-m_\sigma r}}{r} &= m_\sigma^2 \frac{e^{-m_\sigma r}}{r} - \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{-m_\sigma r e^{-m_\sigma r} - e^{-m_\sigma r}}{r^2} \\
&= m_\sigma^2 \frac{e^{-m_\sigma r}}{r} + \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (e^{-m_\sigma r} (m_\sigma r + 1)) \\
&= m_\sigma^2 \frac{e^{-m_\sigma r}}{r} + \frac{1}{r^2} e^{-m_\sigma r} (-m_\sigma (m_\sigma r + 1) + m_\sigma) \\
&= \frac{e^{-m_\sigma r} (m_\sigma - m_\sigma)}{r^2} \\
&= 4\pi \delta(\vec{r}).
\end{aligned}$$

Im Grenzfall $m_\sigma \rightarrow 0$ geht dann mit

$$e^{-m_\sigma r} \rightarrow 1,$$

die Greensche Funktion G_σ von (3.5.123) über in die Greensche Funktion der Elektrostatik aus (3.5.121). Eine von Null verschiedene Masse m_σ sorgt also dafür, dass die Greensche Funktion als Funktion des Abstandes zwischen Quelle und Bestimmungsort des Feldes $|\vec{r} - \vec{r}'|$ schneller abfällt, die Gewichtsfunktion hat also eine kürzere Reichweite.

Das Argument der Exponentialfunktion $m_\sigma r$ muss natürlich eine dimensionslose Größe sein, was bei einem Produkt aus einer Masse m_σ und eines Abstandes r auf dem ersten Blick nicht gegeben zu sein scheint. Die Ursache für diesen scheinbaren Widerspruch liegt in unserer Wahl von natürlichen Einheiten mit $\hbar = c = 1$ (vergleiche (3.4.87)). Eigentlich steht die Masse im Argument der Exponentialfunktion für

$$\frac{m_\sigma c}{\hbar} = \frac{m_\sigma c^2}{\hbar c}.$$

Betrachten wir als Beispiel für eine typische Mesonenmasse den Wert $m_\sigma c^2$ von 550 MeV, so ist mit $\hbar c = 197.315$ MeV fm, die entsprechende Wellenzahl des Mesons gegeben durch

$$\frac{m_\sigma c}{\hbar} = \frac{1}{0.359 \text{ fm}}.$$

Der Wert der Greenschen Funktion für das σ Meson ist also in einem Abstand von 0.359 fm bereits um den Faktor $1/e$ kleiner als die Greensche Funktion der masselosen Photone in der Elektrodynamik.

Mit diesen Ergebnissen für die Greenschen Funktion sind wir jetzt prinzipiell in der Lage aus bekannten Ergebnissen für die skalare Dichte $\rho_s(\vec{r}')$ das entsprechende Vektorfeld der σ Mesonen mit

$$\Phi(\vec{r}) = \int d^3r' G_\sigma(\vec{r}, \vec{r}') \rho_s(\vec{r}') \quad (3.5.124)$$

zu berechnen. Entsprechendes gilt für die Bestimmung der zeitartigen Komponente des Vektorfeldes $A^0(\vec{r})$ aus der Baryonendichte der Nukleonen.

3.5.2 Dirac Gleichung für endliche Systeme

Nach diesen Anmerkungen über die Berechnung der Mesonenfelder wenden wir uns in diesem Teilabschnitt dem Problem zu, die Dirac Gleichung für die Nukleonen bei gegebenen Mesonenfeldern zu lösen. Aus diesen Lösungen der Dirac Gleichung können dann die benötigten Nukleonendichten ρ_s und ρ bestimmt werden. Es ist natürlich klar, dass diese beiden Probleme nicht voneinander entkoppelt behandelt werden können: Es ist vielmehr eine selbstkonsistente Lösung für die Mesonenfelder und die nukleonischen Wellenfunktionen erforderlich.

In diesem Teilabschnitt wollen wir uns aber jetzt auf die Lösung der Dirac Gleichung bei vorgegebenen Mesonenfeldern $\Phi(\vec{r})$ und $A_0(\vec{r})$ konzentrieren. Ausgangspunkt ist also die stationäre Dirac Gleichung (3.4.102)

$$\left[\gamma^0 (E - g_\omega A_0) - \vec{\gamma} \cdot \vec{p} - (m + g_\sigma \Phi) \right] \Psi = 0,$$

bei der allerdings hier die Mesonenfelder nicht durch Konstante sondern als Funktionen des Ortsvektors definiert sind. Dabei wollen wir uns hier auf Kerne mit kugelsymmetrischen Dichten beschränken, sodass auch die Mesonenfelder kugelsymmetrisch, also

nur als Funktion der radialen Koordinate angenommen werden. Multipliziert man diese Gleichung von links mit $-\gamma^0$ und bezeichnet wie im vorherigen Abschnitt

$$m^*(r) = m + g_\sigma \Phi(r),$$

so schreibt sich diese Dirac Gleichung in der

$$[(-E + g_\omega A_0(r)) \mathbf{1} + \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m^*(r)] \Psi = 0,$$

bzw. in der Matrixform

$$\begin{pmatrix} m^*(r) + g_\omega A_0(r) - E & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -m^*(r) + g_\omega A_0(r) - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.5.125)$$

Wegen des Skalarproduktes aus den Paulischen Spin Matrizen und den Impulsoperatoren $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ in den nichtdiagonalen Elementen der Dirac Matrix und der Tatsache, dass die Funktionen Φ und A_0 kugelsymmetrisch sind, folgt, dass der Dirac Operator invariant unter einer kohärenten Drehung im Spin- und Ortsraum ist. Dies bedeutet, dass der Dirac Operator mit den Operatoren des Gesamtdrehimpulses $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ kommutiert. Damit können die Eigenfunktionen zum Dirac Operator gleichzeitig auch als Eigenfunktionen zu den Drehimpulsoperatoren \vec{j}^2 und j_z gewählt werden. Deshalb machen wir für die obere Komponente des Diracspinors Ψ_1 in (3.5.125) den Ansatz

$$\Psi_1(\vec{r}) = ig(r)\Omega_{ljm}(\vartheta, \varphi), \quad (3.5.126)$$

mit dem Anteil Ω , der sich als das gekoppelte Produkt von Kugelflächenfunktionen $Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)$ und Pauli Spinoren $|s, m_s\rangle$ schreiben lässt

$$\Omega_{ljm}(\vartheta, \varphi) = \sum_{m_l, m_s} \langle lm_l, s, m_s | jm \rangle Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) |s, m_s\rangle,$$

mit den Clebsch Gordan Koeffizienten $\langle lm_l, s, m_s | jm \rangle$. Für die Nukleonen mit dem Spin $s = 1/2$ kann bei vorgegebenem j der Wert für l die Werte $l = j \pm 1/2$ annehmen. Im Fall $j = 1/2$ kann die Bahndrehimpulsquantenzahl l also $l = 0$ oder $l = 1$ sein. Für die untere Komponente des Diracspinors Ψ_2 in (3.5.125) machen wir den Ansatz

$$\Psi_2(\vec{r}) = -f(r)\Omega_{l'jm}(\vartheta, \varphi). \quad (3.5.127)$$

Dabei wird sich herausstellen, dass l' die jeweils andere Möglichkeit für die Bahndrehimpulsquantenzahl darstellt.

Als Vorübung zur Lösung der Dirac Gleichung (3.5.125) wollen wir uns nun davon überzeugen, dass gilt

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \Psi_1 = \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} g(r) \Omega_{ljm} = - \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r + \frac{1 + \kappa}{r} \right) g(r) \Omega_{l'jm}, \quad (3.5.128)$$

mit

$$\begin{aligned}
\vec{\sigma} \cdot \vec{l} \Omega_{jlm} &= 2\vec{s} \cdot \vec{l} \Omega_{jlm} \\
&= (j(j+1) - l(l+1) - 3/4) \Omega_{jlm} \\
&= -(1 + \kappa) \Omega_{jlm},
\end{aligned} \tag{3.5.129}$$

was gleichbedeutend ist mit

$$\kappa = \begin{cases} -(j + 1/2) = -(l + 1) & \text{für } j = l + 1/2 \\ j + 1/2 = l & \text{für } j = l - 1/2 \end{cases} \tag{3.5.130}$$

Zum Beweis der Beziehung (3.5.128) betrachten wir die Beziehung (3.4.97) und zeigen damit

$$\begin{aligned}
\vec{\sigma} \cdot \hat{e}_r \vec{\sigma} \cdot \hat{e}_r &= \mathbf{1} \\
\vec{\sigma} \cdot \hat{e}_r \vec{\sigma} \cdot \vec{p} &= \hat{e}_r \cdot \vec{p} \mathbf{1} + i \vec{\sigma} \cdot (\hat{e}_r \times \hat{p}) \\
&= p_r + i \vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{l}}{r}
\end{aligned}$$

Eingesetzt in (3.5.128) ergibt sich

$$\begin{aligned}
\vec{\sigma} \cdot \vec{p} i g(r) \Omega_{ljm} &= (\vec{\sigma} \cdot \hat{e}_r \vec{\sigma} \cdot \hat{e}_r) \vec{\sigma} \cdot \vec{p} i g(r) \Omega_{ljm} \\
&= \vec{\sigma} \cdot \hat{e}_r (\vec{\sigma} \cdot \hat{e}_r \vec{\sigma} \cdot \vec{p}) i g(r) \Omega_{ljm} \\
&= \vec{\sigma} \cdot \hat{e}_r \left(p_r + i \vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{l}}{r} \right) i g(r) \Omega_{ljm} \\
&= \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r - \vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{l}}{r} \right) g(r) \underbrace{\vec{\sigma} \cdot \hat{e}_r \Omega_{ljm}}_{= -\Omega_{l'jm}} \\
&= - \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r + \frac{1 + \kappa}{r} \right) g(r) \Omega_{l'jm},
\end{aligned}$$

wobei in der letzten Zeile die Definition von κ nach (3.5.129) benutzt wurde. Damit ist (3.5.128) bewiesen. In ähnlicher Weise kann man auch zeigen, dass

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \Psi_2 = \vec{\sigma} \cdot \vec{p} (-f(r)) \Omega_{l'jm} = \left(\frac{i}{r} \frac{d}{dr} r + i \frac{1 - \kappa}{r} \right) g(r) \Omega_{ljm}. \tag{3.5.131}$$

Mit den Ansätzen (3.5.126) und (3.5.127) ergibt sich unter Ausnutzung von (3.5.131) für die erste Zeile von (3.5.125)

$$(m^* + g_\omega A_0 - E) i g \Omega_{ljm} - i \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r + \frac{1 - \kappa}{r} \right) f \Omega_{ljm} = 0,$$

bzw. nach "Division" durch $i\Omega_{ljm}$

$$-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r f(r) - \frac{1-\kappa}{r} f(r) + (m^* + g_\omega A_0 - E) g(r) = 0 \quad (3.5.132)$$

Analog ergibt sich aus der unteren Zeile (3.5.125) die Differentialgleichung

$$-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r g(r) - \frac{1+\kappa}{r} g(r) + (m^* - g_\omega A_0 + E) f(r) = 0 \quad (3.5.133)$$

Die Dirac Gleichung liefert also 2 gekoppelte Differentialgleichungen erster Ordnung zur Bestimmung der unbekannt Funktionen $f(r)$ und $g(r)$ sowie des zu bestimmenden Energieeigenwertes E . Zur Vereinfachung dieser Gleichungen definieren wir

$$F(r) = r f(r) \quad \text{und} \quad G(r) = r g(r)$$

sodass die Gleichungen (3.5.132) und (3.5.133) umgeschrieben werden können in

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dr} &= (m^* + g_\omega A_0 - E) G + \frac{\kappa}{r} F \\ \frac{dG}{dr} &= (m^* - g_\omega A_0 + E) F - \frac{\kappa}{r} G \end{aligned} \quad (3.5.134)$$

Die zweite dieser Gleichungen führt auf

$$F(r) = \frac{\frac{dG}{dr} + \frac{\kappa}{r} G}{D(r)}, \quad \text{mit} \quad D(r) = m^* + E - g_\omega A_0 \quad (3.5.135)$$

Diese Lösung der zweiten Gleichung kann man in die erste Gleichung einsetzen und man erhält nach einigen Rechenschritten mit der Definition

$$\varphi(r) = \frac{G(r)}{\sqrt{D(r)}},$$

eine Differentialgleichung 2. Ordnung in der Radialkoordinate in der Form der radialen Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + U_c(r) + U_{ls}(r) \right] \varphi = (E - m) \varphi \quad (3.5.136)$$

mit einem zentralen Potential

$$U_c(r) = m^*(r) - m + \frac{E}{m} g_\omega A_0(r) + \text{korrekturen} \quad (3.5.137)$$

wobei die Korrekturen Beiträge beinhalten, die wenigstens um einen Faktor $(E - m)/m$ reduziert sind, also im nichtrelativistischen Fall, in dem $|E - m| \ll m$ klein sind.

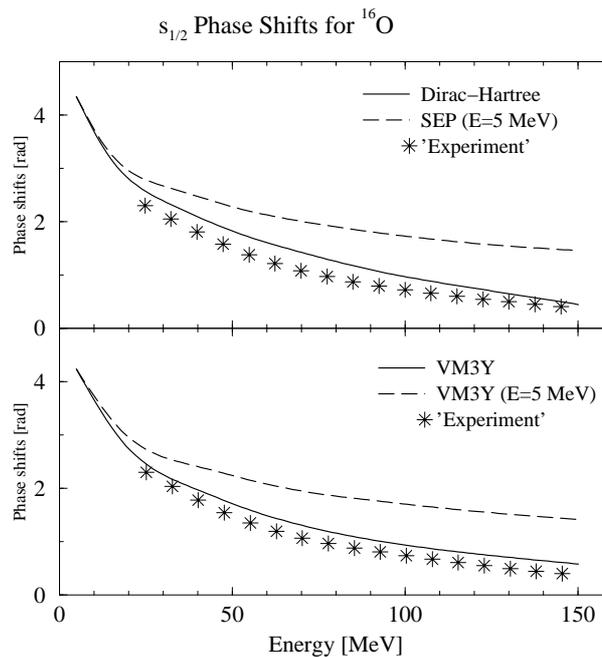


Abbildung 3.9: Ergebnisse für die Streuphasen der Nukleon - Kern Streuung in der Partialwell $l = 0$. Diskussion der Ergebnisse im Text

Dieser zentrale Anteil besitzt einen attraktiven Anteil $n - m^*(r)$, der der Wechselwirkung mit dem Skalarfeld entspricht (siehe (3.4.113)) und einem repulsiven Anteil, der in der Wechselwirkung mit dem Vektorfeld seinen Ursprung hat. Dieser repulsive Anteil ist aber, im Gegensatz zu dem attraktiven Anteil energieabhängig, sodass das zentrale Potential insgesamt energieabhängig ist. Mit wachsender Energie E wird das zentrale Potential repulsiver.

Dies sollte sich z.B. an den Streuphasen der elastischen Nukleon-Kern Streuung zeigen. Die Streuphasen für die Partialwelle $l = 0$ sind bei einem attraktiven Streupotential positiv. Mit zunehmender Energie der Projektile nimmt die Streuphase bei einem energieunabhängigen Potential leicht ab. Dies sieht man am Beispiel der gestrichelten Kurve im oberen Teilbild der Figur 3.9. Wird die Energieabhängigkeit des Zentralpotential berücksichtigt, liefert die Berechnung der Streuphasen einen deutlich rascheren Abfall mit der Energie, was in der durchgezogenen Kurve zum Ausdruck kommt. Diese durchgezogene Kurve liefert eine signifikant bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten⁸.

Auch enthält die aus der Dirac Gleichung hergeleitete Schrödingergleichung (3.5.136)

⁸Diese Ergebnisse sind der Arbeit M.Kleinmann, R.Fritz, H. Müther und A. Ramos, Nucl. Phys. A579 (1994) 85 entnommen

noch einen Spin-Bahn Term in der Form

$$U_{ls}(r) = -\frac{1}{2m} \frac{dD(r)}{dr} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{l}}{r}. \quad (3.5.138)$$

Zunächst einmal ist es bemerkenswert, dass diese Theorie einen solchen Spin-Bahn Term generiert, der ja für das Schalenmodell der Kernphysik eine zentrale Bedeutung besitzt. Darüber hinaus liefert diese Theorie Werte für die Spin-Bahn Aufspaltung der Einteilchenenergien, die ohne Anpassung von Parametern ein gut übereinstimmung mit experimentellen Werten besitzt. Dies wird in dem unteren Teil der Abb. 3.10 deutlich, in der Ergebnisse für die Einteilchenenergien der $p_{1/2}$ und $p_{3/2}$ Zustände des Atomkerns ^{16}O dargestellt sind. Diese Abbildung zeigt, dass das Ergebnis der Dirac Theorie eine signifikant bessere Übereinstimmung mit dem Experiment liefert (vergleiche die beiden letzten Spalten) als andere Modelle.

Darüber hinaus kann die Dirac Theorie nicht nur die Spin-Bahn Aufspaltung dieser stark gebundenen Zustände reproduzieren. Bei einer Analyse der protonischen Einteilchenzustände des ^{17}F (das ist ein ^{16}O plus ein weiteres Proton) findet man, dass die Spin-Bahn Aufspaltung der schwächer gebundenen $l = 2$ Orbitale (also die Differenz zwischen $d_{3/2}$ und $d_{5/2}$ Zuständen) experimentell signifikant kleiner ist, als die zwischen den $l = 1$, also den p -Zuständen. (siehe letzte Spalte im oberen Teil von Abb. 3.10) Dies ist erstaunlich, da ja der Beitrag des $\vec{\sigma} \cdot \vec{l}$ Terms mit l ansteigen sollte. In der Tat liefern die meisten Theorien auch Ergebnisse, bei denen die $l = 1$ Aufspaltung kleiner ist, als die für $l = 2$. Lediglich die Dirac Theorie sagt hier ein Verhältnis voraus, das mit den experimentellen Ergebnissen im Einklang ist⁹.

⁹Diese Ergebnisse sind der Arbeit L. Zamick, D.H. Zheng und H. Müther, Phys. Rev. C45 (1992) 2763 entnommen

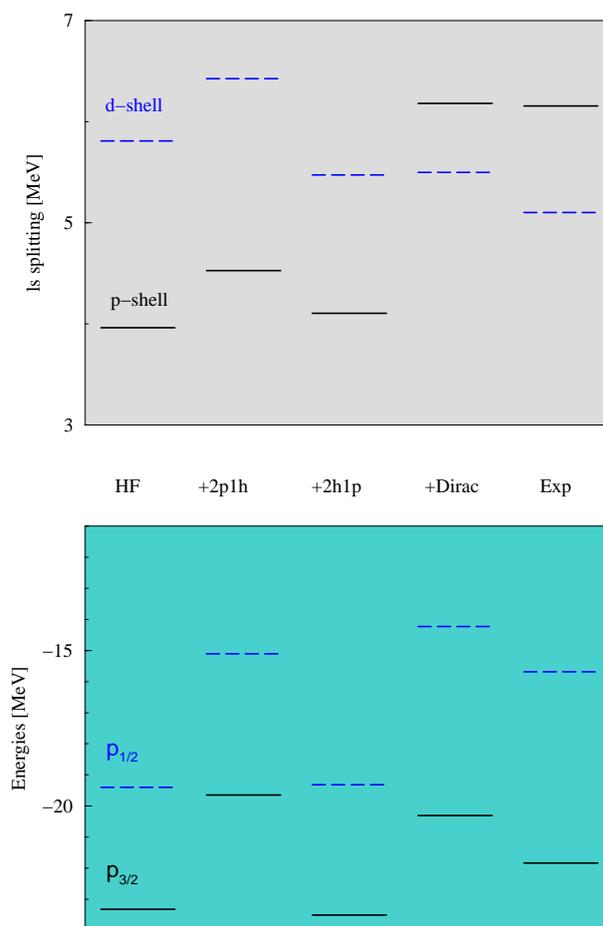


Abbildung 3.10: Ergebnisse für die Spin-Bahn Aufspaltung im Atomkern ^{16}O .
Diskussion der Ergebnisse im Text

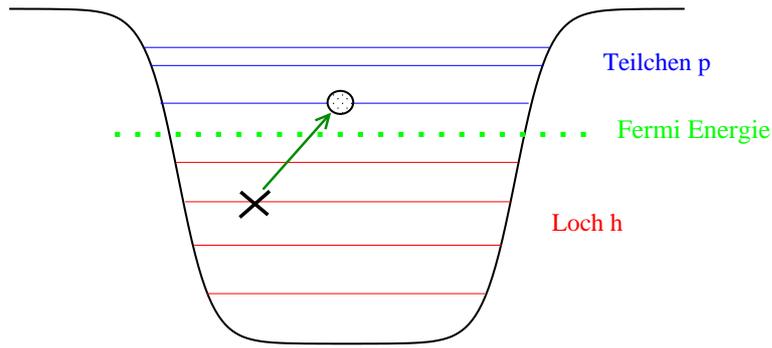


Abbildung 3.11: Schematische Darstellung von Teilchen - Loch Anregungen im Potential eines Atomkerns

3.6 TDA und RPA

Ausgangspunkt für die Überlegungen in diesem Abschnitt ist der Hamiltonoperator von (3.1.1) für Nukleonen mit kinetischer Energie

$$\hat{t} = \frac{\hat{p}^2}{2m},$$

und einer 2-Teilchenwechselwirkung V . Mit den Erzeugungs- (a_i^\dagger) und Vernichtungsoperatoren (a_i) für Nukleonen in der Hartree-Fock Einteilchenbasis stellt sich dieser Operator dar in der Form

$$\hat{H} = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j \rangle a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ik|V|jl \rangle_A a_i^\dagger a_k^\dagger a_l a_j \quad (3.6.139)$$

In der Hartree-Fock Näherung interessiert man sich zunächst nur für den Grundzustand der Atomkerne und bestimmt die Slaterdeterminante

$$|\Phi_0 \rangle = \prod_{i=1}^F a_i^\dagger |0 \rangle,$$

für die der Erwartungswert der Energie

$$E_0 = \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle$$

minimal ist. Dazu sind in der Slaterdeterminante $|\Phi_0 \rangle$ die Einteilchenzustände $i \leq F$ besetzt, die die niedrigsten Einteilchenenergien ε_i aufweisen.

In diesem Abschnitt befassen wir uns mit Atomkernen, die doppelt magisch sind, d.h. bei denen für Protonen und Neutronen jeweils alle Zustände der Valenzschale besetzt sind. Will man für solche Atomkerne die angeregten Zustände mit den niedrigsten

Energien beschreiben, so liegt es nahe dafür die sogenannten 1 Teilchen - 1 Loch (1p1h) Konfigurationen heranzuziehen, bei denen also jeweils ein Nukleon aus einem Zustand unterhalb der Fermikante in einen Zustand oberhalb der Fermikante angehoben wird, so wie das schematisch in der Abb. 3.11 dargestellt ist. Dies liefert also als Basis für die Beschreibung dieser angeregten Zustände die Konfigurationen $a_p^\dagger a_h |\Phi_0\rangle$, wobei p einen Teilchenzustand oberhalb der Fermikante und h einen solchen unterhalb der Fermikante, einen sogenannten Lochzustand bezeichnet. Der Ansatz für diese Zustände erlaubt dann eine Überlagerung solcher 1p1h Zustände und hat die Form

$$|\alpha\rangle = \sum_{p>F, h<F} f_{\alpha,ph} a_p^\dagger a_h |\Phi_0\rangle \quad (3.6.140)$$

mit den Entwicklungskoeffizienten, die es noch zu bestimmen gilt.

Natürlich ist mit diesen 1p1h Konfigurationen noch nicht der ganze Hilbertraum der nuklearen Vielteilchenzustände erfasst. Es gibt darüber hinaus auch 2 Teilchen - 2 Loch Konfigurationen (2p2h), 3p3h Konfigurationen usw. bis einschliesslich der $ApAh$ Konfigurationen mit A der Nukleonenzahl. Wir machen aber hier zunächst einmal die Annahme, dass der Beitrag der 2p2h Konfigurationen und höherer für die Zustände niedriger Energie vernachlässigbar ist.

Der Ansatz (3.6.140) wird darüber hinaus unterstützt durch das **Brillouin Theorem**¹⁰, das besagt

$$\langle \Phi_0 | \hat{H} a_p^\dagger a_h | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | a_h^\dagger a_p \hat{H} | \Phi_0 \rangle = 0. \quad (3.6.141)$$

Damit nimmt also die Matrix des Hamiltonoperators dargestellt in der Basis der Vielteilchenzustände bestehend aus dem Hartree-Fock Zustand $|\Phi_0\rangle$, n 1p1h Konfigurationen und weiteren Konfigurationen vom Type 2p2h usw., die schematische Form an

$\langle \Phi_0 $	$ \Phi_0\rangle$	E_0	0	\dots	0	h_{0n+1}	\dots
	0	h_{11}	\dots	h_{1n}	h_{1n+1}	\dots	
1p1h	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots	\ddots	
	0	h_{n1}	\dots	h_{nn}	h_{nn+1}	\dots	
2p2h	h_{n+10}	h_{n+11}	\dots	h_{n+1n+1}	\dots		

(3.6.142)

wobei n die Anzahl der ph Konfigurationen bezeichnet. In der sogenannten **Tamm Dancoff Approximation** (TDA) beschränkt man sich nun auf den Raum der 1p1h Konfigurationen, ignoriert die Matrixelemente von H zwischen den 1p1h und 2p2h und höheren Konfigurationen und diagonalisiert die $n \times n$ Matrix von H in diesem Teilraum.

¹⁰Beweis als Übung

Es bleibt also zunächst einmal die Aufgabe, die Matrixelemente von H aus (3.6.139) zwischen den Teilchen - Loch Zuständen zu berechnen, also vom Typ

$$\langle \Phi_0 | a_h^\dagger a_p \hat{H} a_{p'}^\dagger a_{h'} | \Phi_0 \rangle . \quad (3.6.143)$$

Zur Berechnung dieser Matrixelemente ist es hilfreich, neue Fermionenoperatoren einzuführen, die Quasiteilchen Erzeugungsoperatoren

$$c_i^\dagger := \begin{cases} a_i & i < F \\ a_i^\dagger & i > F \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{für } i \text{ unterhalb der Fermikante} \\ \text{für } i \text{ oberhalb der Fermikante} \end{array} \quad (3.6.144)$$

Damit sind die entsprechenden adjungierten Operatoren, die Quasiteilchen Vernichtungsoperatoren

$$c_i := \begin{cases} a_i^\dagger & i < F \\ a_i & i > F \end{cases} \quad (3.6.145)$$

Man kann sich jetzt leicht davon überzeugen, dass diese Quasiteilchenoperatoren die für Fermionen üblichen Anti Kommutatorrelationen besitzen

$$\{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = \{c_i, c_j\} = 0 \quad \text{und} \quad \{c_i^\dagger, c_j\} = \delta_{ij} ,$$

und dass der Hartree-Fock Zustand der Vakkumzustand für diese Quasiteilchenoperatoren ist, da gilt

$$c_i | \Phi_0 \rangle = 0 . \quad \text{für alle } i .$$

Damit gilt auch das Wick'sche Theorem und man kann (3.6.143) umschreiben in

$$\langle \Phi_0 | c_h c_p \hat{H} c_{p'}^\dagger c_{h'}^\dagger | \Phi_0 \rangle . \quad (3.6.146)$$

Zur weiteren Auswertung muss natürlich auch der Hamiltonoperator \hat{H} umgeschrieben werden in der Darstellung der Quasiteilchen Operatoren. Wir zeigen dies hier am Beispiel der Kinetischen Energie und schreiben

$$\begin{aligned} \hat{T} = & \sum_{i < F, j < F} \langle i < | t | j < \rangle c_{i <} c_{j <}^\dagger + \sum_{i > F, j < F} \langle i > | t | j < \rangle c_{i >}^\dagger c_{j <}^\dagger \\ & + \sum_{i < F, j > F} \langle i < | t | j > \rangle c_{i <} c_{j >} + \sum_{i > F, j > F} \langle i > | t | j > \rangle c_{i >}^\dagger c_{j >} \end{aligned} \quad (3.6.147)$$

Die Indices $<$ bzw $>$ sollen anzeigen, dass der zugehörige Teilchenindex i, j unterhalb, bzw. oberhalb der Fermikante F einzuordnen ist.

Das Wicksche Theorem besagt nun, dass nur dann von null verschiedene Beiträge erzielt werden, wenn alle Quasiteilchen Operatoren paarweise kontrahiert werden können, wobei ein links stehender Vernichtungsoperator mit einem rechts stehenden Erzeugungsoperator mit gleichem Index zu kontrahieren ist. Daraus wird deutlich, dass sowohl der

zweite wie der dritte Term auf der rechten Seite von (3.6.147) keinen Beitrag zum Matrixelement (3.6.146) leisten können. Der erste Term liefert hingegen

$$\begin{aligned} \sum_{i < F, j < F} \langle i_{<} | t | j_{<} \rangle &= \langle \Phi_0 | c_h c_p c_i < c_{j <}^\dagger c_{p'}^\dagger c_{h'}^\dagger | \Phi_0 \rangle \\ &= \delta_{pp'} \delta_{hh'} \sum_{i < F} \langle i_{<} | t | i_{<} \rangle - \delta_{pp'} \langle h' | t | h \rangle \end{aligned}$$

und der vierte Term

$$\sum_{i > F, j > F} \langle i_{>} | t | j_{>} \rangle \langle \Phi_0 | c_h c_p c_i > c_{j >}^\dagger c_{p'}^\dagger c_{h'}^\dagger | \Phi_0 \rangle = \delta_{hh'} \langle p | t | p' \rangle .$$

Insgesamt ergibt sich für die Matrix des Hamiltonoperators in der Basis der 1p1h Konfigurationen aus (3.6.143)

$$\langle ph | \hat{H} | p'h' \rangle = \delta_{pp'} \delta_{hh'} \{ E_0 + \varepsilon_p - \varepsilon_h \} + \langle ph' | V | hp' \rangle \quad (3.6.148)$$

Die Eigenwerte, die sich bei der Diagonalisation dieser Matrix ergeben sind Werte für die totale Energie der angeregten Zustände E_α und die zugehörigen Eigenvektoren sind die Spaltenvektoren, bestehend aus den Entwicklungskoeffizienten $f_{\alpha,ph}$ in (3.6.140). Diesen Eigenvektoren bleiben unverändert, wenn man von der Matrix in (3.6.148) die Konstante in der Diagonale abzieht und

$$\langle ph | \Delta \hat{H} | p'h' \rangle = \delta_{pp'} \delta_{hh'} \{ \varepsilon_p - \varepsilon_h \} + \langle ph' | V | hp' \rangle \quad (3.6.149)$$

diagonalisiert. Lediglich die Eigenwerte werden um die Konstante E_0 verschoben und die Diagonalisierung von $\Delta \hat{H}$ liefert als Eigenwerte die Anregungsenergien

$$\Delta E_\alpha = E_\alpha - E_0 .$$

Bei all diesen Überlegungen wurde vernachlässigt, dass die Eigenzustände des Hamiltonoperators auch Eigenzustände zu den Operatoren des Gesamtdrehimpulses \hat{J}^2 und \hat{J}_z sein sollten. Da wir hier Kerne mit abgeschlossenen Schalen betrachten ist das für den Hartree-Fock Grundzustand $|\Phi_0\rangle$ dadurch gewährleistet, dass die Einteilchenzustände Eigenzustände zu den Einteilchendrehimpulsen \hat{j}^2 und \hat{j}_z sind, und alle entarteten Zustände eines Einteilchenorbital mit der Quantenzahl j_i und $m_i = -j_i \dots j_i$ für Zustände mit ε_i oberhalb der Fermikante unbesetzt sind und für Zustände unterhalb der Fermikante besetzt sind. Dies hat die Konsequenz, dass die Eigenwerte der Gesamtdrehimpulsoperatoren \hat{J}^2 und \hat{J}_z null sind.

Die Drehimpulswerte für die angeregten TDA Zustände werden dadurch festgelegt, dass man sich auf Teilchen-Loch Konfigurationen mit definierten Gesamtdrehimpuls beschränkt in der Form

$$|ph, JM\rangle = \sum_{m_p, m_h} C(j_p m_p, j_h m_h | JM) a_{p m_p}^\dagger (-)^{j_h - m_h} a_{h - m_h} | \Phi_0 \rangle . \quad (3.6.150)$$

Dabei wurde berücksichtigt, dass sich

$$(-)^{j_h - m_h} a_{h - m_h},$$

wie die Komponente m_h eines spärischen Tensors vom Rang j_h transformiert (siehe (2.2.13)).

Analog gilt auch für den Isospin der Anregungszustände

$$\begin{aligned} |ph, TM_T = 0 \rangle &= \sum_{m_t} C\left(\frac{1}{2}m_t, \frac{1}{2} - m_t | T0\right) (-)^{\frac{1}{2} - m_t} a_{pm_t}^\dagger a_{hm_t} |\Phi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(-)^T a_{p\pi}^\dagger a_{h\pi} + a_{p\nu}^\dagger a_{h\nu} \right] \end{aligned} \quad (3.6.151)$$

Bei dem Übergang zur zweiten Zeile wurden die Werte für die Clebsch-Gordan Koeffizienten $C(\frac{1}{2}m_t, \frac{1}{2} - m_t | T0)$ eingesetzt und $m_t = \frac{1}{2}$ mit einem Neutron ν identifiziert, während $m_t = -\frac{1}{2}$ für Protonen π steht. Aus dieser Darstellung des Isospins der Anregungszustände wird deutlich, dass Anregungszustände mit $T = 0$ für Anregungen steht, bei denen die Koeffizienten für die entsprechenden Proton und Neutronanregungen das gleiche Vorzeichen haben (Protonen und Neutronen sind in Phase), während bei $T = 1$ Anregungen Protonen und Neutronen in entgegengesetzter Phase stehen.

Neben den Quantenzahlen für den Drehimpuls und dem Isospin der TDA Zustände ist auch noch die Parität des Zustandes relevant, die sich als Produkt der Paritäten der Einteilchenzustände für Teilchen und Loch ergeben, also

$$\Pi = \Pi_p \Pi_h = (-)^{l_p + l_h} \quad (3.6.152)$$

wobei l_p und l_h den Bahndrehimpuls der Teilchen- bzw. Lochzustände bezeichnet.

Um einige Eigenschaften der TDA Näherung zu verdeutlichen, wird hier ein einfaches Modell betrachtet, das sogenannte schematische Modell, für das man eine weitgehend analytische Lösung bestimmen kann. Ausgangspunkt ist der folgende separable Ansatz für die Restwechselwirkung zwischen den Nukleonen

$$\langle ph' | V | hp' \rangle = -\chi A_{ph} A_{p'h'}^* \quad (3.6.153)$$

Es soll an dieser Stelle nichts zur Plausibilität dieses Ansatzes gesagt werden, als dass er sich ergibt, wenn die lokale Wechselwirkung in der Ortsdarstellung durch

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\chi f(\vec{r}_1) f(\vec{r}_2)$$

repräsentiert werden kann. Mit der Konstanten χ wird die Stärke der Wechselwirkung kontrolliert. Da die Nukleon-Nukleon Wechselwirkung zwischen Protonen und Neutronen attraktiv ist, kann man davon ausgehen, dass χ für $T = 1$ Anregungen positiv ist und damit eine attraktive Wechselwirkung erzeugt bei Anregungsmoden bei denen

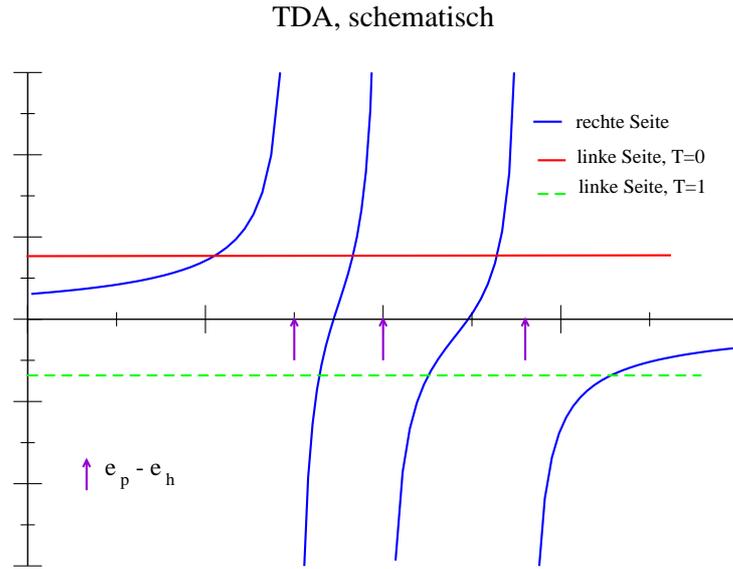


Abbildung 3.12: Grafische Lösung der Gleichung (3.6.156)

Protonen und Neutronen in Phase schwingen, während $\chi < 0$ für $T = 1$ Anregungen zu erwarten ist.

Mit diesem Ansatz ergibt sich also die Eigenwertgleichung, die der Diagonalisation von $\Delta\hat{H}$ in (3.6.149) entspricht

$$\sum_{p'h'} \left\{ \delta_{pp'} \delta_{hh'} (\varepsilon_p - \varepsilon_h) - \chi A_{ph} A_{p'h'}^* \right\} = \Delta E_\alpha f_{\alpha,p'h'} = \Delta E_\alpha f_{\alpha,ph}.$$

Leicht abgewandelt führt dies zu

$$-\chi A_{ph} \underbrace{\sum_{p'h'} A_{p'h'}^* f_{\alpha,p'h'}}_{:=\mathcal{N}} = (\Delta E_\alpha - \varepsilon_p + \varepsilon_h) \quad (3.6.154)$$

Formal kann man aus dieser Gleichung die Entwicklungskoeffizienten

$$f_{\alpha ph} = \frac{\chi \mathcal{N}}{\varepsilon_p - \varepsilon_h - \Delta E_\alpha},$$

mit der Definition von \mathcal{N} in (3.6.154)

$$\mathcal{N} = \sum_{ph} A_{ph}^* f_{\alpha ph} = \sum_{ph} A_{ph}^* \frac{\chi \mathcal{N}}{\varepsilon_p - \varepsilon_h - \Delta E_\alpha}. \quad (3.6.155)$$

Hieraus ergibt sich die Forderung

$$\frac{1}{\chi} = \sum_{ph} \frac{|A_{ph}|^2}{\varepsilon_p - \varepsilon_h - \Delta E_\alpha}, \quad (3.6.156)$$

die wir als Bestimmungsgleichung für die Eigenwerte E_α identifizieren. Die Lösungen dieser Gleichung gewinnt man mit einer grafischen Methode. Dazu ist in Fig 3.12 die rechte Seite dieser Gleichung als Funktion von ΔE_α aufgetragen. Als Beispiel haben wir 3 Teilchen Loch Energien $\varepsilon_p - \varepsilon_h$ angenommen, also 3 Werte von ΔE_α , an denen die rechte Seite divergiert. Die Lösungsenergien ergeben sich jetzt aus Schnittpunkten der Funktion, die die rechte Seite von (3.6.156) mit der Konstanten $1/\chi$. Für eine attraktive Wechselwirkung ($\chi > 0$) erhält man jeweils eine Lösung zwischen den Polen plus eine Lösung unterhalb der niedrigsten Teilchen Loch Energie $\varepsilon_p - \varepsilon_h$. Die Lösung zwischen den Polen bezeichnet man als unkorrelierte Teilchen-Loch Anregung, da bei diesen Lösungen typischerweise ein Koeffizient $f_{\alpha ph}$ dominiert. Die energetisch tiefste Lösung identifiziert man als kollektive Anregung, da hier (jedenfalls bei großen Werten von χ) alle ph Konfigurationen beitragen.

Bei repulsiver Wechselwirkung ($\chi < 0$) liegt der kollektive Zustand oberhalb aller Teilchen - Loch Energien.

Diese Ergebnisse des schematischen Modells sind durchaus charakteristisch für realistischere Modelle der Nukleon Nukleon Wechselwirkung.

3.6.1 Random Phase Approximation

Auch wenn die TDA Näherung durchaus plausibel erscheint, so besitzt sie doch gewisse Defizite, die sich in den folgenden Punkten zusammenfassen lassen:

- Es liegt im Ansatz dieser Näherung, dass der Einfluss von 2p2h (allgemein npnh mit $n > 1$) Konfigurationen ignoriert wird.
- Grundzustand und angeregte Zustände werden in gewisser Weise verschieden behandelt: Während die TDA Zustände als Überlagerungen von Slaterdeterminanten zu verstehen sind, ist der Grundzustand durch genau eine Slaterdeterminante beschrieben. Man sagt: Korrelationen jenseits vom Modell unabhängiger Teilchen werden für den Grundzustand ignoriert.
- Die TDA liefert keine korrekten Ergebnisse für spuriose Zustände

Diese Probleme werden durch die Erweiterung der TDA zur Random Phase Approximation RPA behoben.

Die letzte Bemerkung in der Auflistung soll hier noch etwas ausgeführt werden. Wir betrachten dazu das Beispiel der Translationsinvarianz. Der Hamiltonoperator für die Nukleonen in einem Atomkern sollte Ergebnisse liefern, die nicht von der Position des Atomkerns, d.h. der Schwerpunktskoordinate des Atomkerns abhängen. Für die zu berechnenden Energien spielt es keine Rolle, ob der Atomkern sich in Tübingen oder auf dem Mond befindet: Der Hamiltonoperator ist invariant gegenüber einer Veränderung der Schwerpunktskoordinate der Nukleonen, aus denen der Atomkern aufgebaut ist.

Bei der Diskussion der kollektiven Anregungen eines Atomkerns im Tröpfchenmodell haben wir gesehen, dass eine infinitesimale Änderung der Position des Atomkerns durch einer Dipolanregung entspricht. Damit wird diese Positionsänderung durch eine vektorartige Anregung, also in der Sprechweise der Tensoroperatoren eine Anregungsoperator mit Gesamtdrehimpuls $J = 1$ und negativer Parität, bzw. einem 1^- Operator beschrieben wird. Dabei bewegen sich Protonen und Neutronen in Phase, also eine 1^- Anregung mit Isospin $T = 0$.

Das Schalenmodell lokalisiert den Atomkern im Zentrum des Koordinatensystems. Die Darstellung des Grundzustandes durch eine solche Slaterdeterminante verletzt diese Translationsinvarianz. Anregungen, die der Translation entsprechen bezeichnet man als Geisterzustände, bzw. "Spurious States". Eine Theorie, die die Translationsinvarianz konsistent beschreibt, sollte für die Anregungsenergien der Geisterzustände den Wert null liefern. Man spricht dann von einer Theorie, die die Symmetrie des Hamiltonoperators respektiert oder erhält (Symmetry Conserving Approach). Die RPA Theorie ist bei konsistenter Anwendung eine solche symmetrienerhaltende Näherung¹¹

Zur Herleitung der RPA benutzen wir die Methode der Bewegungsgleichung. Ausgangspunkt ist die Definition eines Anregungsoperators \hat{Q}_α^\dagger . Angewandt auf den Grundzustand des Systems $|0\rangle$ liefert dieser Operator einen angeregten Zustand $|\alpha\rangle$

$$|\alpha\rangle = \hat{Q}_\alpha^\dagger |0\rangle \quad (3.6.157)$$

Für diesen Operator nehmen wir eine Entwicklung in der Form

$$\hat{Q}_\alpha^\dagger = \sum_i f_{\alpha i} \delta \hat{Q}_i^\dagger \quad (3.6.158)$$

Der Operator entspricht also einer Linearkombination von Basisoperatoren $\delta \hat{Q}_i^\dagger$, die noch definiert werden müssen. Zunächst aber betrachten wir den Kommutator $[H, \hat{Q}_\alpha^\dagger]$ angewandt auf den Grundzustand

$$[H, \hat{Q}_\alpha^\dagger] |0\rangle = (E_\alpha - E_0) \hat{Q}_\alpha^\dagger |0\rangle .$$

Von links multipliziert mit $\langle 0 | \delta \hat{Q}_i$ ergibt sich hieraus

$$\langle 0 | \delta \hat{Q}_i [H, \hat{Q}_\alpha^\dagger] |0\rangle = \langle 0 | \delta \hat{Q}_i (E_\alpha - E_0) \hat{Q}_\alpha^\dagger |0\rangle . \quad (3.6.159)$$

Andererseits gilt

$$\begin{aligned} \langle 0 | [H, \hat{Q}_\alpha^\dagger] \delta \hat{Q}_i |0\rangle &= E_0 \underbrace{\langle 0 | \hat{Q}_\alpha^\dagger \delta \hat{Q}_i |0\rangle}_{=0} - \underbrace{\langle 0 | \hat{Q}_\alpha^\dagger H \delta \hat{Q}_i |0\rangle}_{=0} \\ &= 0 \\ &= \langle 0 | \hat{Q}_\alpha^\dagger \delta \hat{Q}_i |0\rangle \end{aligned} \quad (3.6.160)$$

¹¹Der Beweis dieser Symmetrienerhaltung der RPA geht über den Rahmen dieser Vorlesung hinaus. In der Literatur wird dies z.B. in P. Ring und P. Schuck: "The Nuclear Many-Body Problem", Kap. 8.4 gezeigt. Im allgemeineren Kontext wird dies von Kadanoff und Baym, "Quantum Statistical Mechanics" diskutiert.

Subtrahiert man (3.6.160) ält man insgesamt die sogenannte "Bewegungsgleichung" für den Anregungsoperator Q_α^\dagger

$$\langle 0 | [\delta\hat{Q}_i, [H, \hat{Q}_\alpha^\dagger]] | 0 \rangle = (E_\alpha - E_0) \langle 0 | [\delta\hat{Q}_i, \hat{Q}_\alpha^\dagger] | 0 \rangle . \quad (3.6.161)$$

Wir werden sehen, dass die in dieser Gleichung auftauchenden Kommutatoren, bzw. Doppelkommutatoren, die Operatorstruktur vereinfachen. Als Beispiel dazu betrachten wir das Beispiel

$$\delta\hat{Q}_i^\dagger = a_p^\dagger a_h \quad \text{und} \quad \hat{Q}_\alpha^\dagger = \sum_{p'h'} f_{\alpha p'h'} a_{p'}^\dagger a_{h'} \quad (3.6.162)$$

Mit den Antikommutatorrelationen der Fermionenoperatoren

$$\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = \{a_i, a_j\} = 0 \quad \text{und} \quad \{a_i^\dagger, a_j\} = \delta_{ij},$$

erhalten wir für die folgende Operatorfolge

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_j a_{p'}^\dagger a_{h'} &= -a_i^\dagger a_{p'}^\dagger a_j a_{h'} + \delta_{p'j} a_i^\dagger a_{h'} \\ &= -a_{p'}^\dagger a_i^\dagger a_{h'} a_j + \delta_{p'j} a_i^\dagger a_{h'} \\ &= +a_{p'}^\dagger a_{h'} a_i^\dagger a_j - \delta_{ih'} a_{p'}^\dagger a_j + \delta_{p'j} a_i^\dagger a_{h'} \end{aligned}$$

Damit reduziert sich auch der Kommutator

$$[a_i^\dagger a_j, a_{p'}^\dagger a_{h'}] = -\delta_{ih'} a_{p'}^\dagger a_j + \delta_{p'j} a_i^\dagger a_{h'}$$

Ganz entsprechend reduziert sich der Doppelkommutator

$$[a_h^\dagger a_p, [a_i^\dagger a_j, a_{p'}^\dagger a_{h'}]] = \delta_{p'j} (\delta_{pi} a_h^\dagger a_{h'} - \delta_{hh'} a_i^\dagger a_p) - \delta_{ih'} (\delta_{pp'} a_h^\dagger a_j - \delta_{hj} a_p^\dagger a_p) \quad (3.6.163)$$

Ersetzen wir also den Hamiltonoperator in der Bewegungsgleichung durch den Einteilchenoperator der kinetischen Energie

$$T = \sum_{ij} \langle i|t|j \rangle a_i^\dagger a_j,$$

und machen wir die Annahme, dass

$$|0 \rangle = |\phi_0 \rangle = |\text{HF} \rangle,$$

so ergibt sich mit dem Ansatz (3.6.162) für die linke Seite von (3.6.161)

$$\langle 0 | [\delta\hat{Q}_i, [T, \hat{Q}_\alpha^\dagger]] | 0 \rangle = \sum_{p'h'} (\langle p|t|p' \rangle \delta_{hh'} - \langle h'|t|h \rangle \delta_{pp'}) f_{\alpha p'h'} \quad (3.6.164)$$

Für den ganzen Hamiltonoperator aus (3.6.139) ergibt sich

$$\langle 0 | [\delta\hat{Q}_i, [H, \hat{Q}_\alpha^\dagger]] | 0 \rangle = \sum_{p'h'} ((\varepsilon_p - \varepsilon_h) \delta_{hh'} \delta_{pp'} - \langle ph'|V|hp' \rangle) f_{\alpha p'h'} \quad (3.6.165)$$

Als Vorbereitung zur Berechnung der rechten Seite von (3.6.161) bestimmen wir

$$\left[a_h^\dagger a_p, a_{p'}^\dagger a_{h'} \right] = \delta_{pp'} a_h^\dagger a_{h'} - \delta_{hh'} a_{p'}^\dagger a_p .$$

Berechnen wir das Matrixelement dieses Operators für den Hartree-Fock Zustand, so ergibt sich

$$\langle 0 | \left[a_h^\dagger a_p, a_{p'}^\dagger a_{h'} \right] | 0 \rangle = \delta_{pp'} \delta_{hh'} \quad (3.6.166)$$

Diese Gleichung können wir auch umschreiben in

$$\langle 0 | \left[\delta Q_i, \delta Q_j^\dagger \right] | 0 \rangle = \delta_{ij} \quad (3.6.167)$$

Diese Beziehung bezeichnet man als **Quasibosonennäherung**, da für die Konstituenten der Anregungsoperatoren δQ_i und δQ_j^\dagger eine Kommutatorrelation postuliert werden, die denen Boson - Vernichtungs - und - Erzeugungsoperatoren entsprechen.

Mit dieser Quasibosonennäherung ergibt die rechte Seite von (3.6.161)

$$(E_\alpha - E_0) \langle 0 | \left[\delta \hat{Q}_i, \hat{Q}_\alpha^\dagger \right] | 0 \rangle = (E_\alpha - E_0) f_{\alpha ph} \quad (3.6.168)$$

Die Gleichungen (3.6.165) und (3.6.168) ergeben also insgesamt die TDA Gleichungen und wir finden, dass die Bewegungsgleichung (3.6.161) mit dem Ansatz (3.6.162) für den Anregungsoperator und der Anwendung auf den Hartree-Fock Grundzustand die TDA Näherung reproduziert.

Diese Annahmen werden nun in einem nächsten Schritt erweitert auf den Ansatz

$$\hat{Q}_\alpha^\dagger = \sum_{ph} X_{\alpha ph} a_p^\dagger a_h - Y_{\alpha ph} a_h^\dagger a_p . \quad (3.6.169)$$

Damit dieser zweite Term in dieser Gleichung eine nichttriviale Wirkung erzielt müssen wir davon ausgehen, dass der Grundzustand $|0\rangle$ nicht dem Hartree-Fock Zustand entspricht sondern Korrelationen enthält, die z.B. durch Beimischung von 2p2h Anregungen beschrieben werden könnten.

Die Konstituenten des Anregungsoperators sind also jetzt sowohl Teilchen-Loch Anregungen

$$\delta Q_j^\dagger = a_p^\dagger a_h ,$$

als auch Komponenten, in denen ein Nukleon aus dem Teilchenzustand p in einen teilweise (wegen der Korrelationen) unbesetzten in einen Lochzustand h unterhalb der Fermikante transferiert wird

$$\delta Q_i^\dagger = a_h^\dagger a_p .$$

Mit diesem Ansatz und der Quasibosonennäherung aus (3.6.167) liefert die Bewegungsgleichung (3.6.161) die RPA Gleichungen die in einer kompakten Schreibweise dargestellt sind durch

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \Delta E \begin{pmatrix} X \\ -Y \end{pmatrix} . \quad (3.6.170)$$

Dabei sind A und B Matrizen der Dimension n , mit n der Zahl der Teilchen - Loch Konfigurationen und gegeben durch

$$\begin{aligned} A_{ph,p'h'} &= (\varepsilon_p - \varepsilon_h) \delta_{pp'} \delta_{hh'} + \langle ph'|V|hp' \rangle \\ B_{ph,p'h'} &= \langle pp'|V|hh' \rangle . \end{aligned}$$

Außerdem bezeichnet ΔE einen möglichen Eigenwert dieser Gleichung und die Buchstaben X und Y stehen für Spaltenvektoren der Länge n , die wir im Ansatz (3.6.169) eingeführt haben.

Diese Gleichungen definieren kein hermitsches Eigenwertproblem. Dies bedeutet, dass die Eigenwerte ΔE_α nicht notwendig reell sind. Man kann sich aber davon überzeugen, dass für den Fall, dass das Hartree-Fock Variationsverfahren zu einem echten Minimum in der Energiefläche geführt hat, diese Eigenwerte tatsächlich reell sind und paarweise auftreten in der Form: Ist eine Lösung der RPA Gleichungen durch

$$\Delta E \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}$$

gegeben, so ist auch

$$\Delta \tilde{E} = -\Delta E \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} \tilde{X} \\ \tilde{Y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y \\ X \end{pmatrix}$$

eine Lösung der RPA Gleichung. Die Lösungen mit einer negativen Energie ΔE sind natürlich unphysikalisch, da sie

- eine negative Anregungsenergie ΔE liefern, was natürlich ein Widerspruch ist,
- die Amplituden $\tilde{Y}_i = X_i$ relativ groß sind. Bei der physikalischen Lösung mit positivem ΔE dominieren die X Amplituden und die Anregungen vom Typ $a_h^\dagger a_p$ sind lediglich kleine Korrekturen.

Es gibt viele unterschiedliche Methoden diese RPA Gleichungen herzuleiten. Beispiele dazu finden sich auch in dem Buch P.Ring und P. Schuck: "The Nuclear Many-Body Problem"

3.7 Quasiteilchen und BCS Theorie

Einen ersten empirischen Hinweis auf die Bedeutung von Paarkorrelationen haben wir bereits bei der Diskussion der Bethe-Weizsäcker Massenformel (1.1.18) im Abschnitt 1.1 kennen gelernt. Danach sind ja Atomkerne, bei denen sich alle Protonen und alle Neutronen zu Paaren verbinden können, deutlich stärker gebunden, als solche bei denen Nukleonen von einem Typ "ungepaart" bleiben.

Die Ursache für dieses Paarungsverhalten kann man darin sehen, dass die Nukleon-Nukleon Wechselwirkung eine sehr kurze Reichweite besitzt und sich Nukleonen, die "häufig" einen kurzen Relativabstand haben, zu gebundenen Paaren zusammenfügen. Wegen des Pauli Prinzips können Nukleonen sich aber nicht ständig am gleichen Ort aufhalten, bzw. die gleichen Orbitale besetzen. Damit verbleibt die Möglichkeit, den mittleren Abstand dadurch zu optimieren, dass sich die Nukleonen sozusagen auf dem gleichen Orbit aber mit gegenläufiger Umlaufrichtung befinden. Wechselwirkung wird also besonders attraktiv sein für Paare in den konjugierten, bzw. zeitumgekehrten Zuständen

$$|k\rangle = |nlj, m\rangle \quad \text{und} \quad |\bar{k}\rangle = (-1)^{j-m} |nlj, -m\rangle . \quad (3.7.171)$$

Dabei bezeichnen nlj, m die üblichen Quantenzahlen für ein Einteilchenorbit.

Dass Paare von Nukleonen in Zuständen $|k\rangle$ und $|\bar{k}\rangle$ besonders fest miteinander verbunden sind, ist auch daran deutlich zu erkennen, dass Systeme mit 2 Valenznukleonen, wie wir sie im Abschnitt 2.3 diskutiert haben, besonders stark gebunden sind, wenn sie sich zu Paaren mit Gesamtdrehimpuls $J = 0$ zusammenfinden.

Zur Formulierung der Paarungstheorie greifen wir auf das Konzept der Quasiteilchen Operatoren zurück, wie wir dies im vorhergehenden Abschnitt (3.6.144) benutzt für den Hartree-Fock Zustand benutzt haben. Der Ansatz wird allerdings erweiter in der Form

$$c_k = u_k a_k - v_k a_{\bar{k}}^\dagger, \quad (3.7.172)$$

mit reellen Koeffizienten u_k und v_k , so dass der adjungierte

$$c_k^\dagger = u_k a_k^\dagger - v_k a_{\bar{k}}. \quad (3.7.173)$$

den zugehörigen Quasiteilchen Erzeugungsgoperator bezeichnet. Die Phasenkonvention in (3.7.171) ist so gewählt, dass a_k^\dagger und $a_{\bar{k}}$ sich unter einer Rotation wie sphärische Tensoren vom gleichen Typ verhalten.

Mit der Wahl

$$u_k, v_k = \begin{cases} 1, 0 & \text{für } k > F \\ 0, 1 & \text{für } k \leq F \end{cases} \quad (3.7.174)$$

reduzieren sich die Gleichungen (3.7.172) und (3.7.173) auf die Definition der Quasiteilchenoperatoren im Hartree-Fock Fall.

Die Koeffizienten u_k und v_k sollten aber so gewählt sein, dass die dadurch definierten Quasiteilcheoperatoren auch die Antikommutatorrelationen von für Fermionen erfüllen. Insbesondere muss gelten

$$\begin{aligned}
\{c_k, c_k^\dagger\} &= \{u_k a_k - v_k a_{\bar{k}}^\dagger, u_k a_k^\dagger - v_k a_{\bar{k}}\} \\
&= u_k^2 \underbrace{\{a_k, a_k^\dagger\}}_{=1} - v_k u_k \underbrace{\{a_{\bar{k}}^\dagger, a_k^\dagger\}}_{=0} - u_k v_k \underbrace{\{a_k, a_{\bar{k}}\}}_{=0} + v_k^2 \underbrace{\{a_{\bar{k}}^\dagger, a_{\bar{k}}\}}_{=1} \\
&= u_k^2 + v_k^2 \\
&= 1
\end{aligned} \tag{3.7.175}$$

Definieren wir außerdem für die zeitungegekehrten Zustände

$$c_{\bar{k}} = u_{\bar{k}} a_{\bar{k}} - v_{\bar{k}} a_k^\dagger$$

so liefert uns die Antikommutatorrelation

$$\{c_k, c_{\bar{k}}\} = 0,$$

nach kurzer Rechnung das Ergebnis

$$u_{\bar{k}} = u_k \quad \text{und} \quad v_{\bar{k}} = -v_k \tag{3.7.176}$$

Damit haben wir also neben den Gleichungen für c_k (3.7.172) und c_k^\dagger in (3.7.173) auch die für die entsprechenden zeitungegekehrten Operatoren

$$\begin{aligned}
c_{\bar{k}} &= u_k a_{\bar{k}} + v_k a_k^\dagger \\
c_{\bar{k}}^\dagger &= u_k a_k^\dagger + v_k a_{\bar{k}}
\end{aligned} \tag{3.7.177}$$

und damit auch die entsprechenden Umkehrtransformationen

$$\begin{aligned}
a_k &= u_k c_k + v_k c_{\bar{k}}^\dagger \\
a_{\bar{k}} &= u_k c_{\bar{k}} - v_k c_k^\dagger \\
a_k^\dagger &= u_k c_k^\dagger + v_k c_{\bar{k}} \\
a_{\bar{k}}^\dagger &= u_k c_{\bar{k}}^\dagger - v_k c_k
\end{aligned} \tag{3.7.178}$$

Man sieht an dieser Stelle die Rolle des Vorzeichens in der ersten Definition (3.7.172). Natürlich hätte man an der Stelle auch eine Definition mit positivem Vorzeichen wählen können mit der Konsequenz, dass dann in allen Transformationsgleichungen $v_k \rightarrow -v_k$ beachtet werden müsste.

Wir werden uns im folgenden davon überzeugen, dass das Quasiteilchenvakuum der in (3.7.172) und (3.7.177) definierten Vernichtungsoperatoren, das wir hier als das BCS¹² Vakuum $|BCS\rangle$ bezeichnen wollen, dargestellt werden kann in der Form

$$|BCS\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger) |0\rangle. \tag{3.7.179}$$

¹²Die Abkürzung BCS bezieht sich auf die Erfinder dieser Quasiteilchenbeschreibung, Bardeen, Cooper und Schrieffer, die dafür mit dem Nobelpreis ausgezeichnet wurden

Dabei soll die Restriktion der Indices $k > 0$ andeuten, dass jedes Paar k und \bar{k} in dem Produkt genau einmal berücksichtigt wird.

Bevor wir den Beweis für diese Behauptung erbringen, wollen wir uns zunächst den Spezialfall der Hartree-Fock Quasiteilchendarstellung, mit den u_k und v_k definiert wie in (3.7.174), ansehen. Für $k > F$ ist $u_k = 1$ und $v_k = 0$, so dass von all diesen Faktoren in dem Produkt von (3.7.179) genau ein Faktor 1 verbleibt. für $k \leq F$ ist $u_k = 0$ und $v_k = 1$, sodass der BCS Zustand in diesem Grenzfall die Form annimmt

$$|BCS \rangle = \prod_{k>0, k \leq F} a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger |0 \rangle .$$

Das ist aber dann genau der Zustand, in dem alle Zustände k und \bar{k} unterhalb der Fermikante mit der Amplitude 1 besetzt werden, eben der Hartree-Fock Zustand. In diesem Grenzfall liefert die Darstellung von (3.7.179) also genau das entsprechende Quasiteilchen Vakuum.

Zum Beweis, dass auch im allgemeinen Fall die Darstellung (3.7.179) das entsprechende Quasiteilchen Vakuum darstellt, soll zunächst gezeigt werden, dass

$$c_i |BCS \rangle = 0 \quad \text{für alle } i .$$

Einsetzen der Definition von c_i und $|BCS \rangle$ führt zu

$$\begin{aligned} c_i |BCS \rangle &= (u_i a_i - v_i a_i^\dagger) \prod_{k>0} (u_k + v_k a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger) |0 \rangle & (3.7.180) \\ &= \prod_{k>0, k \neq i} (u_k + v_k a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger) \underbrace{(u_i a_i - v_i a_i^\dagger)(u_i + v_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger)}_{=|\Phi_i \rangle} |0 \rangle \end{aligned}$$

Beim dem Übergang zur zweiten Zeile wurde ausgenutzt, dass die Operatoren a_i und $a_{\bar{i}}^\dagger$ für $k \neq i$ vertauscht werden können mit den Faktoren $(u_k + v_k a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger)$. Wir betrachten im folgenden zunächst nur den in der zweiten Zeile von (3.7.181) Zustand $|\Phi_i \rangle$ und berechnen

$$|\Phi_i \rangle = \left[\underbrace{u_i^2 a_i}_{\alpha} - \underbrace{u_i v_i a_i^\dagger}_{\beta} + \underbrace{u_i v_i a_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger}_{\gamma} - \underbrace{v_i^2 a_{\bar{i}}^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger a_i}_{\delta} \right] |0 \rangle . \quad (3.7.181)$$

In dieser Summe liefert der Term α angewandt auf das Teilchenvakuum den Wert 0, da dieser Term nur ein Teilchen Vernichtungs Operator a_i enthält, der angewandt auf $|0 \rangle$ natürlich 0 ergibt. Auch der Term δ liefert einen verschwindenden Beitrag, da er 2 Erzeugungs Operatoren $a_{\bar{i}}^\dagger$ für den selben Zustand i enthält. Den Term γ schreiben wir um mit dem Wickschen Theorem in die Form

$$\delta |0 \rangle = u_i v_i \left[(-)^2 a_{\bar{i}}^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger a_i + a_i^\dagger \right] |0 \rangle .$$

Auch hier liefert der erste Summand den Beitrag 0, da der Vernichtungsoperator in diesem Normalprodukt direkt auf $|0\rangle$ wirkt. Der zweite Term in diesem Ausdruck ist aber bis auf das unterschiedliche Vorzeichen identisch mit dem Term β in (3.7.181), sodass $|\Phi_i\rangle$ und damit auch $b_i|BCS\rangle$ in (3.7.181) identisch null ist. Ganz ähnlich kann man jetzt auch noch zeigen, dass

$$c_i|BCS\rangle = 0,$$

und hat damit den Beweis erbracht, dass $|BCS\rangle$ in der Darstellung von (3.7.179) in der Tat das entsprechende Quasiteilchen Vakuum darstellt.

Auf dem ersten Blick scheint dieses Ergebnis aber nur von mathematischem Interesse. Multipliziert man nämlich diesen Zustand aus, so stellt man fest, dass er einen Beitrag

$$\prod_{k>0} u_k |0\rangle,$$

enthält, also mit der Amplitude $\prod u_k$ den Zustand mit null Teilchen. Daneben gibt es Beiträge von Zweiteilchenzuständen der Form

$$\sum_i \left(\prod_{k \neq i} u_k \right) v_i a_i^\dagger a_i^\dagger |0\rangle,$$

entsprechende Anteile mit 4 Teilchen, 6 Teilchen usw. Der BCS Zustand ist also im Gegensatz zu den physikalischen Zuständen, der ja in der Regel durch eine wohldefinierte Teilchenzahl gekennzeichnet ist, kein Eigenzustand zum Operator der Teilchenzahl für die Fermionen \hat{N} .

Wenn man also versucht mit Hilfe des Variationsprinzips die Koeffizienten u_k und v_k so zu optimieren, dass der Erwartungswert

$$\langle BCS|H|BCS\rangle,$$

minimal wird, dann wird man die Nebenbedingung, dass wenigstens der Erwartungswert der Teilchenzahl

$$\langle BCS|\hat{N}|BCS\rangle = N_0,$$

den gesuchten Wert N_0 ergibt, mit einem Lagrange Parameter in das Variationsprinzip integrieren, dass damit die Form annimmt

$$\delta \left(\langle BCS|H|BCS\rangle - \lambda \langle BCS|\hat{N}|BCS\rangle \right) = 0. \quad (3.7.182)$$

Als eine einfache Anwendung dieser BCS Theorie wollen wir im folgenden einen einfachen Hamiltonoperator betrachten in der Form

$$H = \sum_{k>0} \varepsilon_k \left(a_k^\dagger a_k + a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{k}} \right) + (-G) \sum_{i \neq k} a_i^\dagger a_i^\dagger a_{\bar{k}} a_k. \quad (3.7.183)$$

Neben dem Einteilchenterm mit entarteten Energiewerten $\varepsilon_k = \varepsilon_{\bar{k}}$ enthält dieser Hamiltonoperator einen Zweiteilchenterm, durch den Paare von Teilchen von zeitumgekehrten Zuständen $k\bar{k}$ in entsprechende $i\bar{i}$ gestreut werden. Die Konstante der Wechselwirkung ($-G$) soll attraktiv sein, ein Punkt, den wir noch zu diskutieren haben. Um den Erwartungswert dieses Operators für den BCS Zustand zu berechnen, transformieren wir die Operatoren a^\dagger und a mit (3.7.178) in die entsprechenden Quasiteilchenoperatoren c^\dagger und c . Dies bedeutet z.B. für einen der beiden Einteilchenterme

$$\sum_{k>0} \varepsilon_k a_k^\dagger a_k = \sum_{k>0} \varepsilon_k \left[u_k^2 c_k^\dagger c_k + u_k v_k (c_{\bar{k}} c_k + c_k^\dagger c_{\bar{k}}^\dagger) + v_k^2 c_{\bar{k}} c_{\bar{k}}^\dagger \right] \quad (3.7.184)$$

Bei der Berechnung des Erwartungswertes $\langle BCS|H|BCS \rangle$ liefert nur der letzte Term einen von 0 verschiedenen Beitrag. Bei allen anderen Summanden wirkt entweder ein Quasiteilchen Vernichtungs Operator c direkt nach rechts auf den entsprechenden Vakuumzustand $|BCS \rangle$ oder ein entsprechend adjungierter Operator b^\dagger direkt nach links auf den Bra Zustand $\langle BCS|$. Damit gilt also

$$\langle BCS| \sum_{k>0} \varepsilon_k a_k^\dagger a_k |BCS \rangle = \sum_{k>0} \varepsilon_k v_k^2.$$

Analog können die anderen Beiträge zum Erwartungswert von H sowie dem Erwartungswert von $\hat{N} = \sum_k a_k^\dagger a_k$ berechnet werden mit dem Ergebnis

$$\langle BCS|H - \lambda \hat{N}|BCS \rangle = 2 \sum_{k>0} (\varepsilon_k - \lambda) v_k^2 - G \left[\sum_{k>0} u_k v_k \right]^2 \quad (3.7.185)$$

Man erhält also in der Tat eine attraktivere Energie wenn man über die Hartree-Fock Näherung hinausgeht, also bei $u_k v_k \neq 0$ nur dann, wenn G positiv ist und damit die Paarwechselwirkung in (3.7.183) attraktiv ist. Mit (3.7.185) haben wir jetzt einen Ausdruck für die zu minimierende Größe in (3.7.182), die von der Wahl der Koeffizienten v_k und u_k abhängt.

Um das Minimum dieser Funktion als Funktion von v_k zu bestimmen bilden wir die totale Ableitung der zu minimierenden Größe nach v_k und beachten dabei, dass eine Variation von v_k auch zu einer Variation von u_k führt, da ja (siehe (3.7.175)) $u_k^2 + v_k^2 = 1$ oder

$$u_k = \sqrt{1 - v_k^2}.$$

Damit ist

$$\frac{d}{dv_k} = \frac{\partial}{\partial v_k} + \frac{\partial u_k}{\partial v_k} \frac{\partial}{\partial u_k} = \frac{\partial}{\partial v_k} - \frac{v_k}{u_k} \frac{\partial}{\partial u_k},$$

und es ergibt sich für

$$\frac{d}{dv_k} \langle BCS|H - \lambda \hat{N}|BCS \rangle = 4(\varepsilon_k - \lambda) v_k - 2G u_k \sum_i u_i v_i - \frac{v_k}{u_k} \left(-2G v_k \sum_i u_i v_i \right).$$

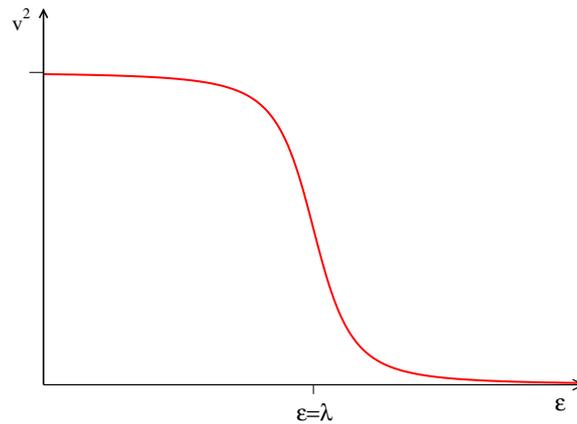


Abbildung 3.13: Besetzungswahrscheinlichkeiten v^2 als Funktion der Einteilchenenergie ϵ nach Gl. (3.7.188)

Die Variationsgleichung

$$\frac{d}{dv_k} \langle BCS | H - \lambda \hat{N} | BCS \rangle = 0$$

führt also zu

$$2(\epsilon_k - \lambda)v_k - G \sum_i u_i v_i (u_k^2 - v_k^2) = 0. \quad (3.7.186)$$

Mit der Abkürzung

$$\Delta = G \sum_i u_i v_i \quad (3.7.187)$$

erhält man Lösungen dieser Gleichung in der Form

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right) \\ v_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right), \end{aligned} \quad (3.7.188)$$

die auch die Bedingungen $u_k^2 + v_k^2 = 1$ respektieren. Offensichtlich steht das Betragsquadrat der Amplitude v_k für die Besetzungswahrscheinlichkeit des Zustandes k mit der Einteilchenenergie ϵ_k . Eine Darsellung dieser Besetzungswahrscheinlichkeit als Funktion der Energie ϵ findet sich in Abb. 3.13.

Aus dieser Darstellung und genauso natürlich auch aus der Gl. (3.7.188) wird klar, dass die Besetzungswahrscheinlichkeit den Wert $v^2 = 0.5$ annimmt für $\epsilon = \lambda$, um dann für $\epsilon > \lambda$ kontinuierlich auf den Wert 0 zu sinken. Durch die Wahl von λ kann also die Zahl der bestzten Zustände und damit auch die Teilchenzahl kontrolliert werden.

Dies ist konsistent, denn dieser Parameter war ja als Lagrangeparameter in das Variationsverfahren eingeführt worden, um zu gewährleisten, dass der Erwartungswert der Teilchenzahl einen geforderten Wert annimmt.

Die Größe Δ ist ein Maß für den Bereich der Energien um λ , in dem v^2 von 1 auf 0 absinkt. Im Grenzfall $\Delta^2 \rightarrow 0$ geht die Funktion über in die Stufenfunktion, die für $\lambda = \varepsilon_F$ von dem Wert 1 auf 0 abfällt. Man identifiziert deshalb häufig auch λ mit der Fermi Energie.

Die Größe Δ ist aber kein frei wählbarer Parameter, sondern durch (3.7.187) definiert. Setzt man jetzt das Ergebnis für die u_k und v_k aus (3.7.188) in (3.7.187) ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \Delta &= G \sum_k \sqrt{\frac{1}{4} \left(1 + \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right) \left(1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right)} \\ &= G \frac{1}{2} \sum_k \frac{\Delta}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}}. \end{aligned} \quad (3.7.189)$$

Diese Gleichung, die man häufig als **Gap Gleichung der BCS Theorie** bezeichnet ist eine nichtlineare Gleichung zur Bestimmung des Parameters Δ . Für Werte von G , das ist ja die Stärke der attraktiven Wechselwirkung zwischen den Fermionen, oberhalb eines kritischen Wertes (dieser kritische Wert hängt von dem Spektrum der Einteilchenenergien ab) gibt es nichttriviale Lösungen (d.h. $\Delta \neq 0$) dieser Gap Gleichung. Die Bezeichnung Gap für diesen Parameter werden wir noch zu diskutieren haben.

Eine erste Deutung für diesen Gap Parameter ergibt sich, wenn man die Energien der Quasiteilchenanregungen $c_k^\dagger |BCS\rangle$ relativ zu der Energie des Grundzustandes berechnet. Mit der Transformation des Hamiltonoperators (3.7.183) in die Basis der Quasiteilchen Operatoren ergibt sich nämlich nach kurzer Rechnung¹³

$$\begin{aligned} E_k &= \langle BCS | c_k \hat{H} c_k^\dagger | BCS \rangle - \langle BCS | \hat{H} | BCS \rangle \\ &= \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2} \end{aligned} \quad (3.7.190)$$

Diese Quasiteilchen Energien E_k stellen eine Verallgemeinerung der Einteilchenenergien im Grenzfall des Schalenmodells ohne Paarkorrelationen, also dem Hartree - Fock Bild dar. Da die BCS Zustände Teilchenzustände mit einer geraden Teilchenzahl beschreiben, beziehen sich die Ein - Quasiteilchen - Zustände auf Systeme mit einer ungeraden Teilchenzahl. Das Ergebnis in (3.7.190) besagt also, dass man stets eine Energie E_k von wenigstens der Größe des Gap Parameters Δ aufbringen muss, um durch Hinzufügen oder Wegnahme eines Teilchens ein System mit ungerader Teilchenzahl zu generieren. Daraus ersieht man also, dass der Gap Parameter Δ mit der Energiedifferenz zwischen Atomkernen gerade Protonen- und Neutronenzahl und solchen mit ungeraden Teilchenzahlen zusammenhängt, wie er in der Bethe-Weizsäcker Massenformel auftritt.

¹³siehe z.B. Ring und Schuck: The nuclear Many-Body Problem

Angeregte Zustände im Atomkern mit gleicher gerader Anzahl von Nukleonen beschreibt man als 2 - Quasiteilchen Anregungen der Form

$$c_i^\dagger c_j^\dagger |BCS\rangle .$$

Die Energie solcher 2 - Quasiteilchen Anregungen ist in der Näherung unabhängiger Quasiteilchen gleich der Summe der Quasiteilchenenergien $E_i + E_j$, also größer als 2Δ . Um angeregte Zustände zu erzeugen muss man also wenigstens ein Paar von Nukleonen aufbrechen und dazu diese Energie 2Δ zur Verfügung stellen. Dies ist eine Erklärung dafür, dass die Grundzustände von Atomkernen mit gerader Protonen- und Neutronenzahl als Zustände mit $J = 0$ realisiert werden mit einer Energie für diesen Zustand, die deutlich unter denen der anderen Zustände liegt.

In dieser Diskussion tritt der Gap Parameter als ein Beitrag zur Quasiteilchen Energie E_i , bzw. als Energiedifferenz zwischen Atomkernen gerader und ungerader Nukleonenzahl. Eine etwas andere Sicht auf diesen Gap Parameter ergibt sich, wenn man die Näherung der einfachen Paarwechselwirkung von (3.7.183) aufgibt, nämlich

$$\langle k\bar{k} | V | k'\bar{k}' \rangle = -G ,$$

und Matrixelemente der Wechselwirkung V zulässt, die für unterschiedliche Streuung von Paaren $k'\bar{k}' \rightarrow k\bar{k}$ auch individuelle Matrixelemente zulässt. Dies führt zu einer im Vergleich zu (3.7.189) leicht komplizierteren Gap Gleichung in der Form

$$\begin{aligned} \Delta(k) &= \sum_{k'} \langle k\bar{k} | V | k'\bar{k}' \rangle \frac{\Delta(k')}{-2\sqrt{(\varepsilon_{k'} - \lambda)^2 + \Delta^2}} \\ &= \sum_{k'} \langle k\bar{k} | V | k'\bar{k}' \rangle \frac{\Delta(k')}{\omega - 2E_{k'}} . \end{aligned} \quad (3.7.191)$$

Bei dem Übergang zur zweiten Zeile haben wir einen Parameter $\omega = 0$ eingeführt und die Definition der Quasiteilchen Energie aus (3.7.190) übernommen. Bei diesem verallgemeinerten Paarungsproblem wird aus der Gap Konstante eine Gap Funktion $\Delta(k)$. Zur Lösung dieser Gap Gleichung, gleichzeitig aber auch zur weiteren Interpretation der Lösung führen wir die Funktion

$$\delta(k) = \frac{\Delta(k)}{\omega - 2E_k} , \quad (3.7.192)$$

ein. Damit schreiben wir verallgemeinerte Gap Gleichung von (3.7.191) um in die Form

$$(\omega - 2E_k)\delta(k) = \sum_{k'} \langle k\bar{k} | V | k'\bar{k}' \rangle \delta(k') ,$$

bzw.

$$\sum_{k'} (2E_k \delta_{kk'} + \langle k\bar{k} | V | k'\bar{k}' \rangle) \delta(k') = \omega \delta(k) . \quad (3.7.193)$$

Dies entspricht also dem Eigenwertproblem für Paare von Nukleonen in den Zuständen $|k\bar{k}\rangle$ mit dem Diagonalterm, bestehend aus den Quasiteilchen Energien und dem Wechselwirkungspotential $\langle k\bar{k}|V|k'\bar{k}'\rangle$. Die Funktion $\delta(k)$ entspricht dann der Darstellung des Eigenzustandes zum Eigenwert $\omega = 0$. Die Gap Gleichung entspricht also der Suche nach einem kollektiven Paarzustand. In diesem Paarzustand sind die Komponenten mit k in der Nähe der Fermikante besonders stark vertreten, da die Quasiteilchen Energien E_k für diese Zustände nahe bei null liegen.

Das Eigenwertproblem von (3.7.193) ist allerdings nichtlinear, da die Eigenfunktion $\delta(k)$ über (3.7.192) und die daraus resultierende Gapfunktion $\Delta(k)$ in die Quasiteilchen Energien

$$E_k = \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta(k)^2}$$

und damit in die zu diagonalisierenden Matrix eingehen. Die Lösung des Eigenwertproblems liefert aber nur die unnormierte Funktion $\delta(k)$ aus der sich dann über (3.7.192) die unnormierten Werte der Gapfunktion $\Delta(k)$ ergeben. Die absolute Größe dieser muss dann so angepasst werden, dass sich der Eigenwert $\omega = 0$ ergibt. Dies kann natürlich nur dann erfolgreich sein, wenn die Quasiteilchen Energien E_k , die ja alle positiv sind und im Grenzfall $\Delta(k) \rightarrow 0$ dem Abstand der jeweiligen Einteilchenzustände von der Fermienergie $\lambda = \varepsilon_F$ entsprechen, nicht zu groß ist, bzw. die Paarwechselwirkung attraktiv genug ist, den Eigenwert $\omega = 0$ zu ermöglichen.

Bisher haben wir den Effekt der Paarkorrelationen lediglich am Beispiel von geraden Nukleonenzahlen diskutiert. Ist aber z.B. die Zahl N der Neutronen ungerade, so muss ein ungepaartes Neutron einen Zustand k in der Nähe der Fermikante besetzen. Der dazu adjungierte Zustand \bar{k} bleibt unbesetzt. Bei der Lösung der Gapgleichung (3.7.191) bleibt dieses halbbesetzte Niveau k unberücksichtigt, da es ja für die Streuung von Nukleonenpaaren blockiert ist. Man spricht deshalb auch vom "Blocking Effekt". Dieser Blocking Effekt hat häufig die Konsequenz, dass für die Nukleonen mit ungerader Nukleonenzahl keine nichttriviale Lösung der Gapgleichung erzielt wird.

Dieser Blocking Effekt erklärt auch, warum sich Paarkorrelationen in der Regel auf Nukleonenpaare vom gleichen Isospin, also Proton-Proton Paarung bzw. Neutron-Neutron Paarung beschränken. Man spricht in diesem Fall auch von $T = 1$ Paarung. Die $T = 0$ Paarung von je einem Proton und einem Neutron ist unterdrückt, da ja in der Regel wegen der Coulombabstoßung $N > Z$ und damit mehrere Zustände in der Nähe der Fermikante für den Aufbau von Proton-Neutron Paarkorrelationen blockiert sind.

3.7.1 Teilchenzahlprojektion

Aus der Diskussion des Quasiteilchenzustandes $|BCS\rangle$ in (3.7.179) haben wir gesehen, dass dieser Zustand kein Eigenzustand zum Teilchenzahl Operator \hat{N} ist, sondern ein Überlagerung von Zuständen mit jeweils gerader aber unterschiedlicher

Teilchenzahl ist

$$\begin{aligned} |BCS\rangle &= \alpha_0|N=0\rangle + \alpha_2|N=2\rangle + \alpha_4|N=4\rangle + \dots \\ &= \sum_n \alpha_{2n}|N=2n\rangle. \end{aligned} \quad (3.7.194)$$

Durch die Einführung des Lagrange Multipliers λ , bzw. durch die Adjustierung der Fermi Energie $\lambda = \varepsilon_F$ konnten wir nur erreichen, dass der Erwartungswert des Teilchenzahloperators

$$\langle BCS|\hat{N}|BCS\rangle = N_0,$$

der gewünschten Teilchenzahl entspricht. Da Atomkerne aber eine definierte Anzahl von Protonen und Neutronen besitzen, ist es natürlich wünschenswert aus diesem Zustand die Komponente mit genau dieser Teilchenzahl N_0 herauszuprojizieren. Formal geschieht dies durch den Projektionsoperator

$$\hat{P}_{N_0} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\frac{\varphi(\hat{N}-N_0)}{2}}. \quad (3.7.195)$$

Wendet man diesen Operator auf den BCS Zustand in der Darstellung (3.7.194), und ersetzt den Teilchenzahloperator \hat{N} durch den jeweiligen Eigenwert $2n$, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \hat{P}_{N_0}|BCS\rangle &= \sum_n \alpha_{2n} \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\frac{\varphi(2n-N_0)}{2}}}_{=\delta_{N_0,2n}} |N=2n\rangle \\ &= \alpha_{N_0}|N_0\rangle. \end{aligned} \quad (3.7.196)$$

Damit können dann z.B.

$$\alpha_{N_0}^2 = \langle BCS|\hat{P}_{N_0}|BCS\rangle,$$

oder auch der Erwartungswert der Energie

$$\langle BCS|\hat{H}\hat{P}_{N_0}|BCS\rangle = \alpha_{N_0}^2 \langle N_0|\hat{H}|N_0\rangle,$$

für den Zustand der gewünschten Teilchenzahl N_0 berechnet werden.¹⁴

¹⁴Zur technischen Realisierung dieser Berechnung siehe z.B. K. Goeke, H. Müther, A. Faessler: "Antipairing Effect in the Rotational States of Light Nuclei", Nucl. Phys. A201 (1973) 49 und dort angegebene Referenzen

3.8 Generator Koordinaten Methode

3.8.1 Deformierte Kerne

In diesem Kapitel haben wir uns bisher auf die Beschreibung von Kernen mit abgeschlossenen Schalen beschränkt. Die abgeschlossenen Schalen hatten zur Folge, dass die entsprechenden Einteilchendichten sphärisch symmetrisch und damit auch die daraus resultierenden Hartree-Fock Potentiale Kugelgestalt annehmen.

Dies ist nicht mehr der Fall, wenn die Einteilchenzustände einer Schale nur unvollständig besetzt werden können. In diesem Fall ist die resultierende Teilchendichte deformiert und entsprechendes gilt auch für das sich daraus berechnende Hartree-Fock Potential. Die Eigenzustände eines solch deformierten Einteilchenpotentials sind selbst nicht mehr Eigenzustände zu den Drehimpuls Operatoren j^2 und j_z . Insbesondere ist auch das Energiespektrum nicht mehr entartet bezüglich der Quantenzahlen zu j_z .

Dies wird an der Darstellung in Abb. 3.14 deutlich, in der eine typische Veränderung des Einteilchenspektrums als Funktion der Quadrupoldeformation (siehe Abschnitte 1.2 und 1.4) dargestellt sind. Hier und in der Regel auch im folgenden Text gehen wir von einer Deformation aus, die zylindersymmetrisch, also rotationssymmetrisch um die z Achse ist, sodass die Einteilchenzustände nach wie vor Eigenzustände zu j_z sind. Man spricht auch von einer axialen Deformation mit der z als Symmetrieachse. Ausserdem soll die Diskussion zunächst auf Atomkerne mit gerader Protonen- und Neutronenzahl sein. Dies bedeutet, dass Dichte und daraus resultierende Potentiale spiegelsymmetrisch bezüglich der köperfesten z -Achse sind, sodass Zustände mit den Quantenzahlen $\pm m$ von j_z energetisch entartet sind. Jeder der in Abb. 3.14 dargestellten Energiezustände ist also zweifach entartet.

In der Abbildung sind für den sphärischen Fall, also $\varepsilon = 0$, auch die magischen Zahlen 8, 20 und 50 jeweils eingekreist angegeben. Die Position entspricht gerade den Fermienergien bei der entsprechenden Nukleonenzahl. Dabei wird noch einmal deutlich, dass die magischen Kerne eben deshalb besonders stark gebunden sind, weil der Energieabstand zwischen den unbesetzten und den besetzten Zustände hier besonders groß ist.

Aber auch bei bestimmten Deformationen kann man relativ große Lücken im Spektrum der Einteilchenenergien erkennen. Diese in diesen Lücken eingekreisten Zahlen bezeichnen die zugehörigen Nukleonenzahlen, die erforderlich sind, um alle Zustände unterhalb dieser Lücke zu besetzen, sind also die magischen Zahlen bei entsprechender Deformation.

Wir sehen also hier, dass die Tatsache, dass die Mehrzahl der Atomkerne zu intrinsischen Deformationen neigen, auf dieser Eigenschaft des Schalenmodells deformierter Atomkerne basiert. Einen Hinweis auf das Faktum, dass viele Atomkerne zu einer intrinsischen Deformation neigen, haben wir bereits im kollektiven Bohr-Mottelson Modell

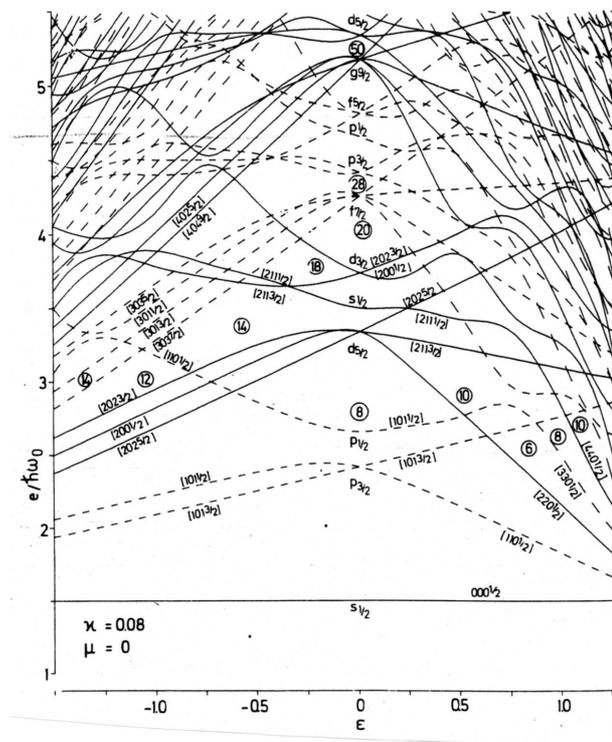


Abbildung 3.14: Darstellung eines typischen Energiespektrums für Nukleonen eines Atomkerns als Funktion der Quadrupoldeformation. Der Deformationsparameter ϵ in dieser Figur entspricht im wesentlichen dem Parameter für Quadrupoldeformationen β im Abschnitt 1.4. $\epsilon = 0$ entspricht einem kugelförmigen Kern, positive Werte stehen für prolate Deformationen während negative Werte oblaten Deformationen zuzuordnen ist. Zustände positiver Parität sind durch durchgezogene Linien gekennzeichnet, während Zustände negativer Parität mit einer gestrichelten Linie dargestellt sind. (Die Abbildung ist übernommen aus Ring und Schuck: *The nuclear many-body problem*) Atomkerns

erhalten. In diesem Rahmen war es aber nicht zu erklären, da die Minimierung der Energie eines Tropfens mit einem repulsiven Oberflächenterm stets zu einer sphärischen Lösung führt.

Andererseits bereitet uns das Auftreten von deformierten Hartree-Fock Zuständen aber auch ein Problem: Durch die Deformation wird die Rotationsinvarianz des Hamiltonoperators der Kernphysik verletzt. Durch die Orientierung der Hauptachsen der resultierenden Dichteverteilung werden Raumrichtungen ausgezeichnet. Dies bedeutet, dass die Slaterdeterminante gebildet aus solch deformierten Einteilchenzustände kein Eigenzustand zu den Operatoren des Gesamtdrehimpulses J^2 sein kann. In dem von uns angenommenen Rahmen von axial deformierten Kernen mit der Symmetrieachse z und gerader Anzahl von Protonen und Neutronen können wir lediglich davon ausgehen, dass die Slaterdeterminante Eigenzustand zu J_z ist mit dem Eigenwert $M = 0$.

Die Slaterdeterminante $|\Phi_0\rangle$ ist also eine Überlagerung von Eigenzuständen zu J^2 in der Form

$$|\Phi_0\rangle = \sum_J c_J |\Phi_0, J\rangle \quad (3.8.197)$$

mit Entwicklungskoeffizienten c_J und Zustände mit definiertem Gesamtdrehimpuls

$$\hat{J}^2 |\Phi_0, J\rangle = \hbar^2 J(J+1) |\Phi_0, J\rangle .$$

Da der nukleare Hamiltonoperator H mit \hat{J}^2 kommutiert ist auch $H|\Phi_0, J\rangle$ ein normierte Eigenzustand zu \hat{J}^2 und es gilt

$$\hat{J}^2 H |\Phi_0, J\rangle = \hbar^2 J(J+1) H |\Phi_0, J\rangle \quad \text{und} \quad \langle \Phi_0, J | \Phi_0, J \rangle = 1 . \quad (3.8.198)$$

Damit können wir die Grundzustandsenergie des Hartree-Fock Zustandes E_0 umrechnen in

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle \\ &= \sum_{J, J'} c_J c_{J'}^* \underbrace{\langle \Phi_0, J' | H | \Phi_0, J \rangle}_{=\delta_{JJ'} E_J} \\ &= \sum_J |c_J|^2 E_J \end{aligned} \quad (3.8.199)$$

mit

$$E_J = \langle \Phi_0, J | H | \Phi_0, J \rangle .$$

Die Reduktion des Matrixelementes von H in der zweiten Zeile von (3.8.199) basiert auf Gl. (3.8.198) und dem Faktum, dass Eigenzustände zu J^2 mit unterschiedlichem J zueinander orthogonal sind.

Wegen

$$\sum_J |c_J|^2 = 1 ,$$

ist die Hartree-Fock Energie E_0 lediglich ein Mittelwert der Erwartungswerte $E_J = \langle \Phi_0, J | H | \Phi_0, J \rangle$ und einzelne dieser E_J werden unterhalb E_0 liegen. Da die Hartree-Fock Energie E_0 nach Konstruktion die niedrigste Energie bezeichnet, die man für eine Slaterdeterminante erreichen kann, muss $|\Phi_0, J \rangle$ eine Überlagerung von Slaterdeterminanten darstellen, die dann auch zu einer tieferen Energie als der Hartree-Fock Energie führen kann.

Zur Konstruktion dieser Zustände benötigen wir einen Projektionsoperator in der Form

$$\hat{P}_J |\Phi_0 \rangle = \hat{P}_J \sum_{J'} c_{J'} |\Phi_0, J' \rangle = c_J |\Phi_0, J \rangle \quad (3.8.200)$$

Hierbei handelt es sich offensichtlich um einen Projektionsoperator mit der Eigenschaft

$$\hat{P}_J^2 = \hat{P}_J \quad (3.8.201)$$

Die explizite Darstellung dieses Operators werden wir später in diesem Abschnitt behandeln.

An dieser Stelle sei an die Projektion auf Zustände mit definierter Teilchenzahl im Abschnitt 3.7.1 erinnert. Dort wurde zunächst mit Hilfe des Variationsprinzips ein einfacher Zustand, der BCS Zustand als Vakuum für die Quasiteilchenoperatoren, generiert. Der Preis dieses Variationsverfahrens war in dem Fall, dass der resultierende Zustand kein Eigenzustand zum Teilchenzahloperator war und die Eigenschaft der definierten Teilchenzahl durch Projektion restauriert werden musste.

In diesem Unterabschnitt betrachten wir die Ergebnisse eines Variationsverfahrens, das mit der Beschränkung auf einfache Slaterdeterminanten zu Lösungen führt, die die Rotationsinvarianz des Raumes verletzen und somit keinen definierten Drehimpuls besitzen. Auch hier wird die physikalische Eigenschaft (Zustände mit definiertem Drehimpuls, bzw. Erhaltung der Rotationsinvarianz) durch eine anschließende Projektion wieder restauriert.

3.8.2 Vibrationen

Die Hartree-Fock Lösung liefert die normierte Slaterdeterminante $|\Phi_0 \rangle$ mit dem niedrigsten Erwartungswert für die Energie. Sie ist damit das Ergebnis eines Variationsverfahrens, bei dem ein Minimum im Raum aller Slaterdeterminanten gesucht wird. Wir können uns jetzt aber vorstellen, dass dieser Variationsraum eingeschränkt wird z.B. auf den Raum aller möglichen Slaterdeterminanten, die für den Atomkern eine Deformation der Dichteverteilung mit einem Quadrupolmoment von der Größe Q_0 , bzw. einem entsprechenden Deformationsparameter β besitzt.

Eine Lösung für dieses eingeschränkte Variationsverfahren kann man durch das sogenannte "Vonstrained Hartree-Fock" (CHF) Verfahren erhalten. Die Nebenbedingung,

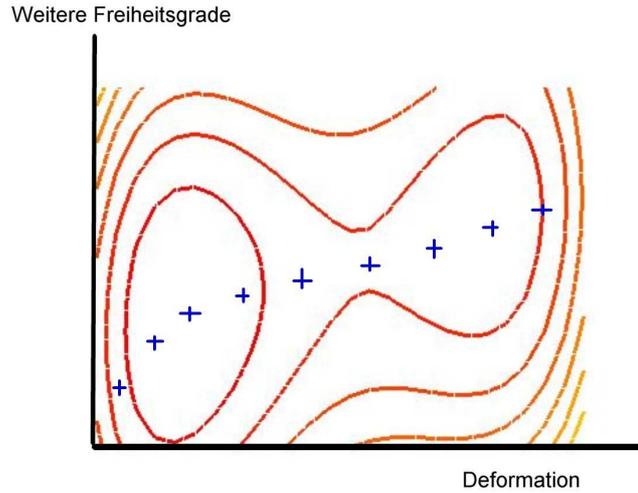


Abbildung 3.15: Schematische Darstellung des CHF Verfahrens, Details im Text

d.h. einen vorgegebenen Wert für die Deformation wird mit einem Lagrange Multiplikator λ gewährleistet. Minimiert wird dabei nicht der Erwartungswert des Hamilton Operators sondern

$$\delta \left\{ \langle \Phi | H - \lambda \hat{Q} | \Phi \rangle \right\} = 0 \quad (3.8.202)$$

mit \hat{Q} dem Einteilchenoperator für das Quadrupolmoment

$$\hat{Q} = \sum_{ij} \langle \varphi_i | r^2 Y_{20} | \varphi_j \rangle a_i^\dagger a_j$$

Dabei steht r für die Radialkoordinate der einzelnen Nukleonen und Y_{20} bezeichnet die entsprechende Kugelflächenfunktion als Funktion der Winkelvariablen. Dies führt dann auf einen Hartree-Fock Einteilchenoperator, der im Vergleich zu dem aus (3.1.17) ergänzt wird zu

$$\langle \alpha | H_0^{CHF} | \beta \rangle = \langle \alpha | H_0 | \beta \rangle - \lambda \langle \alpha | r^2 Y_{20} | \beta \rangle .$$

Der Lagrange Multiplikator λ in dieser Gleichung bzw. in (3.8.202) muss dann so gewählt werden, dass der geforderte Erwartungswert für die Deformation erzielt wird. Dieses CHF Verfahren ist schematisch in Abb. 3.15 dargestellt. In diesem Bild seien die Energien aller möglichen Slaterdeterminanten in Form einer Energiefläche dargestellt. Dabei wurde angenommen, dass die Slaterdeterminanten bereits durch 2 Parameter vollständig charakterisiert sei. Der eine Parameter, die Deformation des Zustandes ist

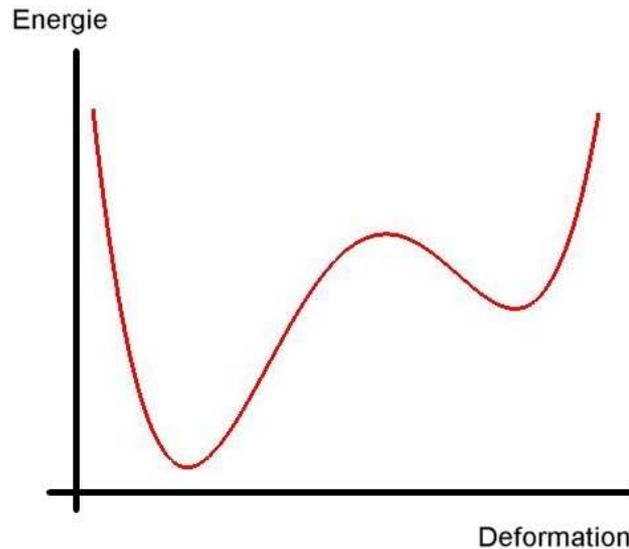


Abbildung 3.16: Schematische Darstellung von Energien eines CHF Verfahrens, Details im Text

auf der horizontalen Achse aufgetragen, alle anderen Freiheitsgrade (hier der Darstellung halber auf einen Parameter reduziert) auf die vertikale Achse.

Eine CHF Rechnung für eine vorgewählte Deformation entspricht also der Such nach dem Minimum der Energie bei fest gehaltener Deformation, also lediglich entlang der vertikalen Linie. Dies führt dann für jede Deformation β auf eine optimale Slaterdeterminante $|\Phi_\beta\rangle$ und entsprechende Energie

$$E(\beta) = \langle \Phi_\beta | H | \Phi_\beta \rangle .$$

Die daraus resultierenden Erwartungswerte $E(\beta)$ sind in der Abb. 3.16 dargestellt. Das Energieminimum in dieser Darstellung entspricht dann natürlich dem HF Minimum ohne Einschränkungen.

Die Slaterdeterminanten $|\Phi(\beta)\rangle$ stellen also eine Familie von vorsortierten Zuständen dar und es liegt nahe, den Gesamtzustand als eine Überlagerung von diesen optimierten Zuständen darzustellen. Dies führt auf den Ansatz der Generator Koordinaten Methode (Generator Coordinate Method: GCM)

$$|\Psi\rangle = \int d\beta f(\beta) |\Phi(\beta)\rangle . \quad (3.8.203)$$

Die Gewichtsfunktionen $f(\beta)$ müssen noch bestimmt werden. Dabei bezeichnet man β (hier in unserem Beispiel die Deformation) als Generator Koordinate, da dieser Parameter ja genutzt wird, um die verschiedenen Ausgangszustände zu generieren.

Im hier diskutierten Fall, dass die Variable β der Deformation entspricht, liefert der GCM Ansatz aber auch noch eine anschauliche Interpretation des Zustandes $|\Psi\rangle$. Als Überlagerung von Zuständen mit verschiedenen Deformationen erlaubt der GCM Ansatz die Darstellung der stationären Lösung für die Schwingung des Systems um das Hartree-Fock Minimum. Mit diesem Ansatz haben wir sozusagen das geeignete Mittel, um eine vibrierenden Kern auf mikroskopischer Basis zu beschreiben.

Zur Bestimmung der Gewichtsfunktionen $f(\beta)$ im GCM Ansatz ziehen wir wieder das Variationsverfahren heran

$$\begin{aligned} 0 &= \delta \{ \langle\langle \Psi | H | \Psi \rangle\rangle - \Lambda \langle \Psi | \Psi \rangle \} \\ &= \delta \left\{ \int d\beta \int d\beta' f^*(\beta') f(\beta) (\langle \Phi_\beta | H | \Phi_{\beta'} \rangle - \Lambda \langle \Phi_\beta | \Phi_{\beta'} \rangle) \right\} \end{aligned} \quad (3.8.204)$$

Die Variation der Gewichtsfunktion, bzw. die Ableitung nach f^* liefert eine Bestimmungsgleichung, die sogenannte **Hill - Wheeler** Gleichung

$$\int d\beta' \langle \Phi_\beta | H | \Phi_{\beta'} \rangle f(\beta') = \Lambda \int d\beta' \langle \Phi_\beta | \Phi_{\beta'} \rangle f(\beta') \quad (3.8.205)$$

Diese Integralgleichung wird am einfachsten durch Diskretisierung der Integrale in der Form

$$\int d\beta f(\beta) |\Phi_\beta\rangle \rightarrow \sum_i f_i |\Phi_i\rangle,$$

gelöst. Damit reduziert sich die Hill - Wheeler Gleichung (3.8.205) auf eine algebraische Gleichung der Form

$$\sum_i \underbrace{\langle \Phi_j | H | \Phi_i \rangle}_{=: h_{ij}} f_i = \Lambda \sum_i \underbrace{\langle \Phi_j | \Phi_i \rangle}_{=: n_{ij}} f_i \quad (3.8.206)$$

Dieses Gleichungssystem entspricht einem verallgemeinerten Eigenwertproblem zur Bestimmung von Eigenwerten Λ und Eigenvektoren f_i , die ja die diskrete Darstellung der Gewichtsfunktion $f(\beta)$ darstellen. Im Gegensatz zum einfachen Eigenwertproblem steht hier auf der rechten Seite der Gleichung eine Matrix n_{ij} , der sogenannte Normkern der Gleichung. Falls die diskretisierten Zustände $|\Phi_i\rangle$ orthonormal sind, wird n_{ij} zur Einheitsmatrix und (3.8.206) reduziert sich auf eine einfache Diagonalisierung des Hamiltonoperators in der mit Hilfe des CHF Verfahrens selektierten Basis der $|\Phi_i\rangle$.

Im allgemeinen Fall werden diese $|\Phi_i\rangle$ jedoch nicht orthogonal sein. In diesem Fall diagonalisiert man in einem ersten Schritt den Normkern n_{ij} . Die Eigenzustände von n_{ij} mit nicht verschwindendem Eigenwert bilden eine orthogonale Basis des Hilbertraumes, der durch die Generator Koordinate erzeugt wurde. Die Matrix h_{ij} wird dann auf diese Basis reduziert und entsprechend diagonalisiert.

Neben dem Eigenwert für den Grundzustand liefert dieses Verfahren natürlich auch Energien und Zustände für Anregungszustände. Die Zahl der Anregungszustände entspricht der Dimension, des Raumes, der durch die jeweilige Generator Koordinate erzeugt wurde.

3.8.3 Drehimpulsprojektion

Als einen Spezialfall dieser GCM stellen wir hier den Operator für die Projektion auf Zustände mit definiertem Drehimpuls J vor. Dabei wollen wir die Diskussion hier zunächst einmal beschränken auf Atomkerne mit Axialsymmetrie. In diesem Fall wählen wir als Generator Koordinate die Orientierung der Symmetrieachse des Kerns, also die z -Achse des körperfesten Hauptachsensystems relativ zur z -Achse des raumfesten Laborsystems β . Die Drehung des körperfesten Achsensystems wird durch den Rotationsoperator

$$\hat{R}(\beta) = e^{i\hat{J}_y\beta/\hbar}$$

generiert, wobei \hat{J}_y für die y -Komponente des Operators für den Gesamtdrehimpuls steht. Damit ist also

$$|\Phi(\beta)\rangle = e^{i\hat{J}_y\beta/\hbar}|\Phi_0\rangle .$$

und der GCM Ansatz (3.8.203) kann explizit geschrieben werden

$$|\Psi_J\rangle = \int d\beta f_J(\beta) e^{i\hat{J}_y\beta/\hbar}|\Phi_0\rangle .$$

Wegen der Isotropie des Raumes ist das diagonale Matrixelement

$$E_0 = \langle \Phi(\beta)|H|\Phi(\beta)\rangle ,$$

unabhängig von der Orientierung. Außerdem ist es in diesem Fall nicht erforderlich die Gewichtsfunktion durch Lösung der Hill-Wheeler Gleichung zu bestimmen. Sie ergibt sich durch die Forderung, dass der resultierende Zustand Eigenzustand zum Drehimpuls mit Eigenwert J ergeben soll, zur entsprechenden Wigner d -Funktion

$$f_J(\beta) = d_{00}^J(\beta) .$$

Damit ist der Zustand $|\Psi_J\rangle$ gegeben durch

$$|\Psi_J\rangle = \int d\beta d_{00}^J(\beta) e^{i\hat{J}_y\beta/\hbar}|\Phi_0\rangle . \quad (3.8.207)$$

So erhalten wir eine explizite Darstellung des Drehimpulsoperators (3.8.200) in der Form

$$\hat{P}_J = \int d\beta d_{00}^J(\beta) e^{i\hat{J}_y\beta/\hbar} \quad (3.8.208)$$

Diese Drehimpulsprojektion erfüllt einerseits die Funktion, dass die Rotationssymmetrie, die durch das Hartree-Fock Verfahren, das zu einem deformierten Zustand niedrigster Energie geführt hat, gebrochen wurde, restauriert wird indem aus diesem Hartree-Fock Zustand Zustände mit definiertem Drehimpuls generiert werden. Andererseits zeigt die explizite Darstellung des Projektionsoperators mit Hilfe der Generator Koordinate β , also der Orientierung des körperfesten Systems im Laborsystem, dass diese Projektion auch einer Beschreibung von Rotationen im Sinne der GCM entspricht.

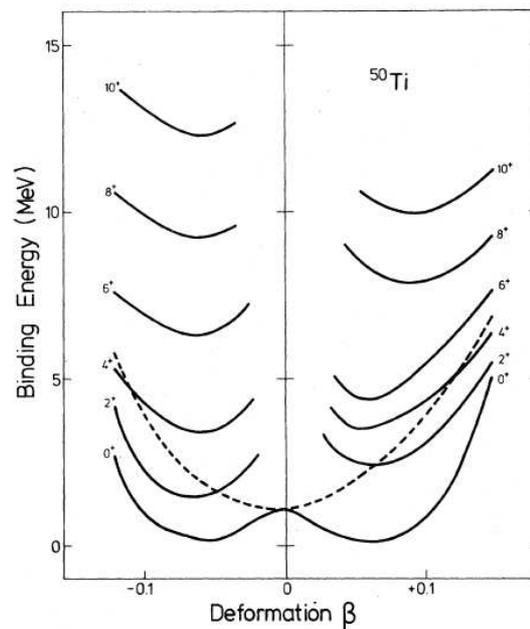


Abbildung 3.17: Ergebnisse für die Energien resultierend aus von Rechnungen als Funktion der Kerndeformation β , siehe Diskussion im Text

Damit haben wir jetzt die Werkzeuge zur Hand auf der Basis eines mikroskopisch definierten Hamiltonoperators und entsprechenden Zuständen, die durch die Koordinaten der Nukleonen dargestellt werden können, die kollektive Anregungsmoden des Atomkerns in Form von Rotationen und Vibrationen darzustellen. Die GCM ist also bei entsprechender Wahl der Generatorkoordinaten eine Brücke zwischen dem Schalenmodell des Atomkerns und den Kollektiven Modellen, bei denen der Atomkern als ein strukturloser Tropfen dargestellt wird und die generalisierten Koordinaten auf der Parametrisierung der Oberfläche dieses Tropfens beruhen.

Im folgenden soll diese Verbindung an einem konkreten Beispiel¹⁵, der Beschreibung des Atomkerns ^{50}Ti verdeutlicht werden.

In der Abb. 3.17 sind mit der gestrichelten Linie die Energien von Constrained Hartree-Fock Rechnungen als Funktion der Deformation des Kerns dargestellt. Diese Abbildung zeigt, dass das Minimum dieser Funktion bei der Deformation null zu finden ist, d.h. die Hartree-Fock Rechnung ohne Zusatzbedingung liefert eine sphärische Lösung für diesen Atomkern. Dieses Ergebnis ist auch eine Folge der Tatsache, dass ^{50}Ti mit $N = 28$ Neutronen eine magische Neutronenzahl besitzt, was sphärische Konfigurationen stützt. Aus den deformierten Hartree-Fock Zuständen kann man aber nun natürlich auch

¹⁵Details der zugehörigen Rechnungen sind in der Veröffentlichung H. Müther, K. Goeke, K. Allart und A. Faessler, Phys. Rev. C 15 (1977) 1467 dargestellt.

Zustände mit definiertem Drehimpuls projizieren. Da die Hartree-Fock Zustände axial-symmetrisch um die intrinsische z -Achse sind und spiegelsymmetrisch um die intrinsische xy Ebene, ergeben sich nur Zustände mit geradem Drehimpuls, also $J = 0, 2, 4, \dots$

Die Energien dieser Zustände sind, soweit sie denn in der intrinsischen Hartree-Fock Lösung vorhanden waren, sind durch die durchgezogenen Linien in Abb. 3.17 dargestellt. So ist die sphärische Hartree-Fock Lösung natürlich identisch mit der auf $J = 0$ projizierten Lösung. Bei den deformierten CHF Lösungen findet man aber drehimpulsprojizierte Komponenten von $J = 0$ bis hinauf zu $J = 10$, wobei bei gegebener Deformation die Energien der Zustände mit dem Drehimpuls, wie bei einem Rotationspektrum anwachsen. Verträglich mit dem Rotationsbild ist weiterhin die Tatsache, dass die Energiedifferenzen mit wachsender Deformation, also auch mit wachsendem Trägheitsmoment, tendenziell abnehmen.

Man sieht weiterhin, dass eine Variationsrechnung für die projizierten Zustände energetisch signifikant tiefere Zustände liefert, als die Projektion des sphärischen Hartree-Fock Zustandes. Dies zeigt, dass die Variation nach der Projektion effektiver ist als die Projektion nach der Variation.

Die Energiefunktionen zeigen aber auch nur sehr schwach ausgeprägte Minima als Funktion der Deformation und im Falle $J = 0$ sind die Minima bei positiver und negativer Energie nahezu entartet. Dies ist ein Hinweis darauf, dass eine Überlagerung solcher Zustände zu gegebenem J aber unterschiedlichen Deformationen im Sinne des GCM Ansatzes zu einer weiteren Verbesserung der Energie führen sollte.

Ergebnisse solche GCM Rechnungen sind in Abb. 3.18 dargestellt. Das resultierende Spektrum zeigt die Charakteristika eines Kerns mit Rotations und Vibrationsfreiheitsgraden, was auch mit dem experimentellem Ergebnis durchaus verträglich ist. Eine signifikante Verbesserung wurde hier allerdings erzielt, wenn zudem noch Freiheitsgrade von Quasiteilchen Anregungen, in der Figur als GCM+QP bezeichnet einbezogen wurden. Auf diese Erweiterung der Generatorkoordinaten Methode soll hier aber nicht eingegangen werden.

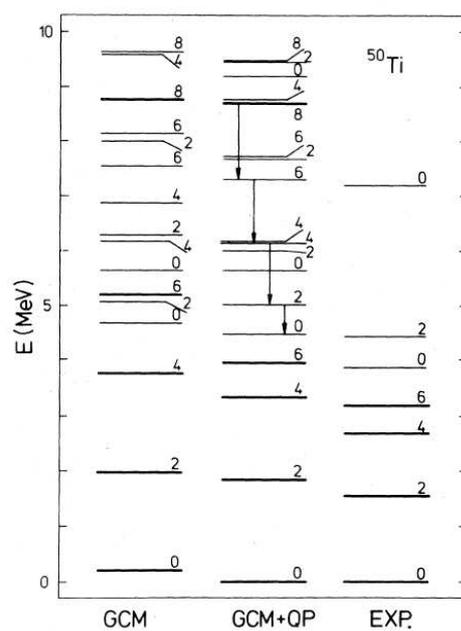


Abbildung 3.18: Ergebnisse für das Anregungsspektrum von ^{50}Ti . Ergebnisse von GCM und GCM+QP Rechnungen werden mit experimentellen Daten verglichen, siehe Diskussion im Text

Kapitel 4

Realistische NN Wechselwirkungen

4.1 Realistische Kernkräfte

Im bisherigen Teil der Vorlesung wurden sehr einfache Modelle für die Wechselwirkung zwischen den Nukleonen betrachtet wie z.B. die Kontaktwechselwirkungen vom Typ der Skyrme Kräfte. Die Parameter dieser Modellwechselwirkungen wurden so angepasst, dass die Kernstrukturrechnungen, also z.B. Hartree-Fock Rechnungen für Kernmaterie oder auch spezielle Atomkerne, die empirischen Daten für die Energie und Dichteverteilung reproduzierten. Man bezeichnet solche Wechselwirkungen als effektive oder phänomenologische Wechselwirkungen.

Wegen dieser Anpassung an die experimentellen Daten reproduzieren solche Kernstrukturrechnungen natürlich die Eigenschaften von "normalen" Atomkernen mit hoher Präzision. So wurden die Modelle schliesslich konstruiert. Extrapolationen von diesen "normalen" Atomkernen zu nuklearen Systemen mit hoher Dichte oder großer Proton Neutron Asymmetrie, wie sie z.B. in Neutronensternen oder in zentralen Stößen von schweren Ionen zu erwarten sind, müssen aber bei solchen phänomenologischen Modellen mit großer Vorsicht betrachtet werden. Diese Modelle haben nur eine geringe "predictive power", da sie ja speziell für die Beschreibung von nuklearen Systemen unter Normalbedingungen konstruiert wurden.

Alternativ zu diesem Konzept der effektiven Kernkräfte gibt es eine Klasse von sogenannten realistischen Modellen der Nukleon-Nukleon (NN) Wechselwirkung. In diesem Fall entwickelt man ein Modell für die NN Wechselwirkung zur Beschreibung aller bekannten Daten von 2 wechselwirkenden Nukleonen. Dies umfasst also sowohl die Streudaten der Nukleon-Nukleon Streuung als auch die Daten (Bindungsenergie, Formfaktor) des einzig gebundenen 2-Nukleonen Zustandes, des Deuterons.

In einem ersten Schritt werden also Modelle für ein solch realistisches NN Potential entwickelt und die Parameter des Modells so angepasst, dass die Daten des Deuterons und der NN Streuung reproduziert werden. In einem zweiten Schritt wird man mit die-

sem Modell der NN Wechselwirkung das nukleare Vielteilchenproblem lösen und testen wie zuverlässig man den Sättigungspunkt der Kernmaterie und die Grundeigenschaften von "normalen" Atomkernen ohne Anpassung von Parametern beschreiben kann. Sind diese Ergebnisse zufriedenstellend, kann man davon ausgehen, dass die Vorhersagen entsprechender Rechnungen für exotische nukleare Systeme bei hoher Dichte und/oder Isospinasyymetrie zuverlässig sind.

Zur Vorbereitung der Definition von realistischen NN Wechselwirkungen betrachten wir die verschiedenen Kombinationen von Spin- Isospin- und Drehimpulsquantenzahlen, die sogenannten Partialwellen, für die Quantenzustände von 2 Nukleonen. Diese Zustände haben einen Isospinanteil, charakterisiert durch den Gesamtisospin T , einen Spinanteil (Gesamtspin S) und einen Ortsanteil mit der Parität $\pi = (-1)^L$ wobei L für den Bahndrehimpuls der Relativbewegung steht. Bei Vorhandensein einer Spin-Bahn Wechselwirkung sind Bahndrehimpuls L und Spin S zu einem Gesamtdrehimpuls J gekoppelt. Unter Austausch der beiden Nukleonen muss der Zustand antisymmetrisch sein, also

$$\mathcal{P}_{12}|T, S, \pi, J \rangle = (-1)^{T+1}(-1)^{S+1}\pi|T, S, \pi, J \rangle = -|T, S, \pi, J \rangle . \quad (4.1.1)$$

Die Summe $T + S + L$ muss also für eine antisymmetrische Partialwelle eine ungerade Zahl ergeben.

Wir beginnen mit den Zuständen für 2 Protonen oder auch 2 Neutronen. Diese Zustände haben Isospinprojektionsquantenzahlen, M_T , von -1, bzw. +1 und sind daher Mitglieder des Isospintripplets mit Gesamtisospin $T = 1$. Die Partialwellen, die in diesem Fall mit dem Pauli Prinzip verträglich sind, sind daher gegeben durch

$${}^{2S+1}L_J = {}^1S_0, \quad {}^3P_0, \quad {}^3P_1, \quad {}^3P_2 - {}^3F_2, \dots \quad (4.1.2)$$

wobei die Bahndrehimpulsquantenzahl L wie üblich durch die Buchstaben S, P, D, F, \dots beschrieben wird. Für jede dieser Partialwellen muss dann die Lippmann Schwinger Gleichung

$$|\Psi \rangle = |\Phi \rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\eta} V |\Psi \rangle , \quad (4.1.3)$$

lösen. Dabei steht V für das betrachtete NN Potential, E für die Energie des gestreuten Nukleons, H_0 für den Operator der kinetischen Energie und η bezeichnet eine infinitesimale Größe, deren Positivität gewährleistet, dass die Gesamtwellenfunktion $|\Psi \rangle$ neben der einlaufenden Welle in Strahlrichtung $|\Phi \rangle$ eine auslaufende Kugelwelle besitzt. Daraus berechnet sich dann die Streuamplitude

$$A(\vartheta) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \Phi' | V | \Psi \rangle \quad (4.1.4)$$

bzw. der differentielle Wirkungsquerschnitt für den Streuwinkel ϑ

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) = |A(\vartheta)|^2 .$$

Dabei steht $|\Phi' \rangle$ für eine ebene Welle in Richtung des auslaufenden Projektils. Durch die Einführung der Streumatrix \mathcal{T} mit

$$V|\Psi \rangle = \mathcal{T}|\Phi \rangle, \quad (4.1.5)$$

reduziert sich die Berechnung der Streuamplitude auf die Berechnung von Matrixelementen von \mathcal{T} zwischen ebenen Wellen

$$A(\vartheta) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \Phi' | \mathcal{T} | \Phi \rangle$$

und das Problem wird verlagert auf die Lösung der Lippmann Schwinger Gleichung für T in der Form

$$\mathcal{T} = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\eta} \mathcal{T}. \quad (4.1.6)$$

Wegen der Erhaltung des Isospins, der Rotationsinvarianz und der Parität in der starken Wechselwirkung ergeben sich für V und damit auch für \mathcal{T} nur von null verschiedene Matrixelemente, wenn die Quantenzahlen für Isospin T , Drehimpuls J und Parität $\pi = (-1)^L$ im Bra und Ket identisch sind, also

$$\langle T, S', J, L' | \mathcal{T} | T, S, J, L \rangle.$$

Aus der Aufstellung der Partialwellen für $T = 1$ in (4.1.2) sieht man, dass sich damit die Lösung der Lippmann Schwinger Gleichung in (4.1.6) in der Regel auf jeweils eine Partialwelle mit definiertem Spin S und Bahndrehimpuls L reduziert. Bei den dort aufgeführten Beispielen ergibt sich eine Kopplung nur für den Fall

$${}^3P_2 - {}^3F_2.$$

Man spricht hier von gekoppelten Kanälen. Der Operator in V bzw. \mathcal{T} , der entsprechende nichtdiagonale Elemente $L \neq L'$ liefert ist ein Produkt von 2 sphärischen Tensoren vom Rang 2 im Orts- und Spinraum, die insgesamt zu einem Skalar im Raum des Gesamtdrehimpulses verknüpft sind. Man spricht deshalb hier von einer Tensorkraft.

Ein einfaches und anschauliches Modell für ein solch realistisches NN Potential V besteht nun darin, dass man für jede Partialwelle eine lokale Potentialfunktion $V_{L'LSJ}(r)$ angibt. Man spricht in diesem Fall von einer lokalen NN Wechselwirkung. Für eine gute Beschreibung der experimentellen Streudaten benötigt man Parametrisierungen dieser Funktionen mit etwa 50 Parametern.

Die grundsätzliche Form dieser Funktionen lässt sich erraten, wenn man die berechneten, wie auch die experimentellen Wirkungsquerschnitte mit Hilfe von Streuphasen darstellt. Als Beispiel sind in der Abb. 4.1 die Streuphasen für die Partialwellen 1S_0 und 3P_0 dargestellt.

In diesem Zusammenhang sei daran erinnert, dass positive Streuphasen für ein attraktives Potential und negative für ein repulsives Potential stehen. Die Energieabhängigkeit

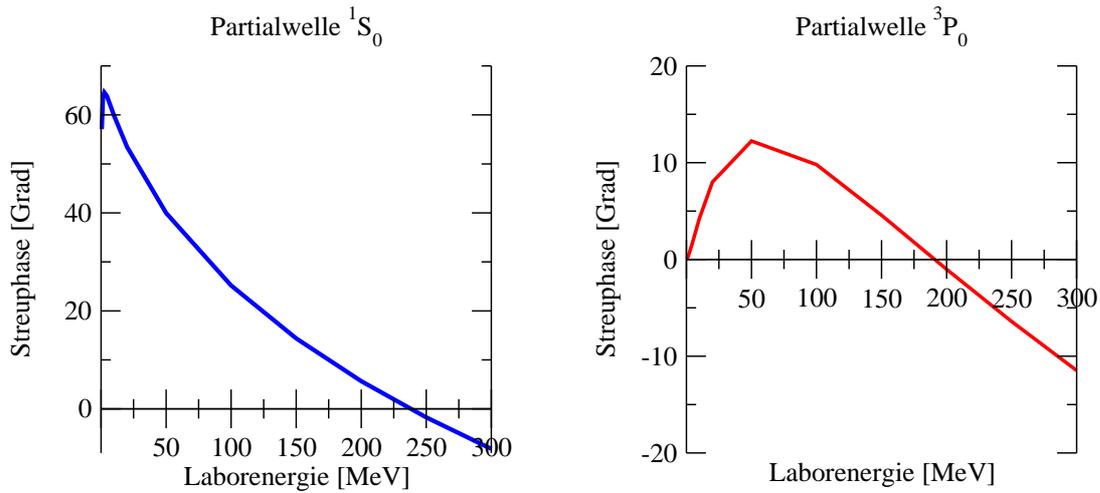


Abbildung 4.1: Streuphasen der NN Streuung in den Partialwellen 1S_0 und 3P_0 .

der Streuphasen deutet also an, dass bei niedrigen Energien die attraktiven Komponenten der NN Wechselwirkung dominieren. Bei hohen Energien und damit verbunden kurzen Wellenlängen wird die Wellenfunktion der wechselwirkenden Nukleonen sensibler gegenüber den kurzreichweitigen Anteilen des NN Potentials, die offensichtlich repulsiv sind. Insgesamt erwarten wir also eine Form eines Potentials, dass bei mittleren und großen Relativabständen attraktiv ist und bei sehr kleinen Abständen das Vorzeichen wechselt und repulsiv wird. Diese kurzreichweitige Repulsion ist so stark, dass man um 1970 - 1980 häufig sogenannte “hard-core” Potentiale benutzte. Das sind Potentiale, die unendlich repulsiv werden für Relativabstände der wechselwirkenden Nukleonen r kleiner als 0.4 fm.

Ein physikalisch eleganteres Modell ergibt sich natürlich, wenn man die NN Wechselwirkung nicht einfach parameterisiert sondern ihr ein Modell zugrunde legt. Ein besonders erfolgreiches Modell sind dabei die sogenannten “One Boson Exchange Potentials” (OBEP), bei denen die Wechselwirkung durch den Austausch von Mesonen beschrieben wird. Die entsprechenden Beiträge werden dabei in einem relativistischen Rahmen mit Dirac Spinoren für die Nukleonen und relativistischen Propagatoren für die ausgetauschten Mesonen beschrieben (vergleiche auch den Abschnitt 3.4).

Es würde den Rahmen dieser Vorlesung sprengen, wenn man Details zur Berechnung solcher OBEPs hier anführen würde. Als Referenz sei auf die zusammenfassende Arbeit von R. Machleidt¹ verwiesen. Als ein typisches Beispiel für ein solches OBEP sind die Mesonen und die dazugehörigen Parameter zur Beschreibung dieser Meson Austausch

¹R. Machleidt, “The Meson Theory of Nuclear Forces and Structure”, Advances in Nuclear Physics 19 (1989) 189ff

Typical One-Boson-Exchange potential:

- good fit of NN data with only a few parameter
- π : dominates long range, tensor force
- σ : medium range attraction
- ω : short range repulsion
- ρ : short range tensor force
- other mesons for fine tuning

Meson	T_{iso}	m_α [MeV]	Bonn A	
			$g_\alpha^2/4\pi$	Λ_α [MeV]
π	ps	138.03	14.7	1300
η	ps	548.8	4	1500
ρ	v	769	0.86 ^a	1950
ω	v	782.6	25 ^a	1350
δ	s	983	1.3	2000
σ^b	s	550 ^b (710-720) ^b	8.8	2200

however: there is no σ in the particle data booklet !?!

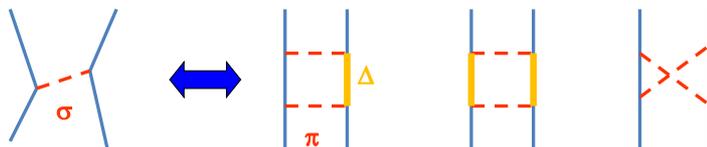


Abbildung 4.2: Parameter eines OBEP

Terme in der Figur 4.2 angegeben. Neben den bereits im Abschnitt 3.4 diskutierten skalaren (s, σ, δ) und vektorartigen (v, ω, ρ) Mesonen sind auch pseudoskalare Mesonen, das sind skalare Mesonen mit negativer Parität, (p, π, η) aufgeführt. Dabei werden sowohl isoskalare Mesonen (σ, ω, η) als auch isovektorielle Mesonen (δ, ω, π) berücksichtigt. Isovektor Mesonen, wie z.B. die Pionen treten als Isospintriplett, also in 3 verschiedenen Ladungsstufen, π^+, π^0, π^- auf. Bei ihrem Austausch kann also auch die Ladung der wechselwirkende Nukleonen ausgetauscht werden.

Für jedes dieser Mesonen α gibt es 3 Parameter, die Masse m_α , die Stärke der Meson-Nukleon Kopplung beschrieben durch eine Kopplungskonstante g_α und einen Parameter für den Formfaktor Λ_α , der die endliche Ausdehnung der Mesonen und Nukleonen parameterisiert. Die Massen der beobachtbaren Mesonen sind dabei festgelegt. Dies gilt auch für die Kopplungskonstante des Pions, die z.B. durch Daten der Pion-Nukleon Streuung weitgehend festgelegt ist. Auch für andere Mesonen sind grobe Werte für Kopplungskonstante und Formfaktor durch andere Experimente als die Nukleon - Nukleon Streuung vorgegeben.

Lediglich das skalare isoskalare σ Meson ist kein real existierendes Meson sondern repräsentiert Prozesse des irreduziblen 2-Pion-Austauschs, die im unteren Teil der Figur dargestellt sind.² Dieses fiktive oder effektive skalare σ Meson ist mit einer Masse von etwa 550 MeV sehr wichtig zur Beschreibung der attraktiven Komponenten der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung bei mittleren Reichweiten. Die kurzreichweitige Repulsion wird vor allen Dingen durch den Austausch des ω Mesons beschrieben. Die langreichweitigen Komponenten sind vor allen Dingen dem Austausch der Mesonen mit der niedrigsten Masse, den Pionen, zuzuschreiben.

Bei diesen OBEP Modellen der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung reicht die Anpassung von etwa 4 bis 6 Parametern aus, um mit der Lösung der entsprechenden Lippmann Schwinger Gleichungen die experimentellen Streuphasen mit großer Genauigkeit zu reproduzieren. Bei der Parameterisierung von lokalen Potentialfunktionen, wie wir sie weiter oben besprochen haben, werden 50 und mehr Parameter angepasst, um einen Fit der experimentellen mit ähnlich hoher Genauigkeit zu erzielen. Dies ist natürlich ein gutes Argument dafür, dass das Mesonen Austauschbild der OBEP als sehr erfolgreich angesehen werden muss, insbesondere da mit ihm auch ganz unterschiedliche Experimente (Nukleon Nukleon Streuung und Meson Nukleon Streuung) miteinander verknüpft werden.

Bisher haben wir lediglich die Streuphasen der Proton-Proton bzw. auch Neutron-Neutron Streuung diskutiert, also 2 Nukleonen mit einem Gesamtisospin $T = 1$. Darüber hinaus gibt es aber natürlich für die Proton - Neutron Systeme auch die Konfigurationen mit Isospin $T = 0$. Nach der Regel der Gl. (4.1.1) beschränkt das

²Siehe z.B. H. Müther, A. Faessler, M.R. Anastasio, K. Holinde, R. Machleidt: "Non-Iterative 2π Exchange in the Nuclear Medium", Phys. Rev. C22 (1980) 1744

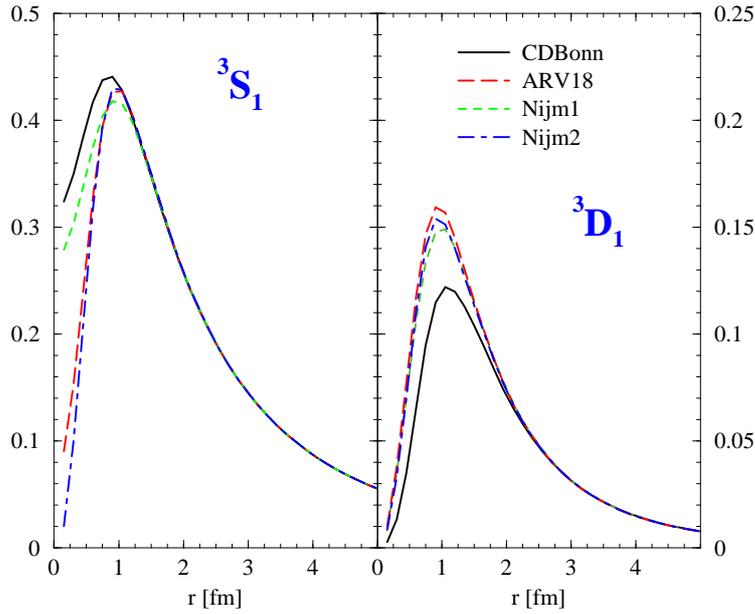


Abbildung 4.3: S und D Komponenten der Wellenfunktion des Deuterons, berechnet mit verschiedenen Modellen der NN Wechselwirkung

Pauli Prinzip diese Konfigurationen auf die Partialwellen

$${}^{2S+1}L_J = {}^3S_1 - {}^3D_1, {}^1P_1, {}^3D_2, {}^3D_3 - {}^3G_3, \dots \quad (4.1.7)$$

Insbesondere ist natürlich das einzige gebundene System aus 2 Nukleonen, das Deuteron, ein System mit Isospin $T = 0$. Wäre nämlich das Deuteron mit $M_T = 0$ ein Zustand mit $T = 1$, so müsste es wegen der Isospinsymmetrie der starken Wechselwirkung auch gebundene Systeme für Proton - Proton ($M_T = -1$) und Neutron - Neutron ($M_T = 1$) geben. Im Fall des Diprotons mag man argumentieren, dass es ungebunden ist wegen der Coulomb Repulsion zwischen den Protonen, ein Argument das jedoch nicht die Nichtexistenz des Dineutrons erklären könnte.

Wegen der Kurzreichweitigkeit der NN Wechselwirkung kann man weiter davon ausgehen, dass sich der gebundene Zustand in einer Partialwelle mit $L = 0$ realisieren sollte. Aus der Aufzählung (4.1.7) ergibt sich damit der gekoppelte Kanal ${}^3S_1 - {}^3D_1$. Dies bedeutet, dass die Wellenfunktion des Deuterons eine 3S_1 und eine 3D_1 Komponente besitzt in der Form

$$|\Psi\rangle_{deuteron} = |\Psi, {}^3S_1\rangle + |\Psi, {}^3D_1\rangle. \quad (4.1.8)$$

Dabei sollte die S Komponente dominieren und die D -Beimischung $|\Psi, {}^3D_1\rangle$ vergleichsweise klein sein. In der Tat ist die sogenannte D -state probability

$$P_D = \frac{\langle \Psi, {}^3D_1 | \Psi, {}^3D_1 \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle_{deuteron}}$$

ein Maß für die Stärke dieser Beimischung, und damit ein Maß für die Stärke der Tensorkomponenten in der Wechselwirkung. Für realistische NN Wechselwirkungen liegt P_D im Bereich zwischen 3 und 6 Prozent.

Eine Darstellung der resultierenden Wellenfunktionen $\langle r|\Psi, {}^3S_1 \rangle$ und $\langle r|\Psi, {}^3D_1 \rangle$ als Funktion des Relativabstandes zwischen Proton und Neutron im Deuteron findet sich in der Abb. 4.3. Diese Funktionen stammen aus Rechnungen mit verschiedenen an die Streuphasen angefitteten Modelle der NN Wechselwirkung.

Die Tatsache, dass das Maximum der Wellenfunktion auch im Fall $L = 0$ nicht bei $r = 0$ lokalisiert ist, reflektiert die Repulsion der NN Wechselwirkung bei kurzen Abständen. Das Variationsprinzip führt dazu, dass der Betrag der Wellenfunktion in den Bereichen repulsiver Wechselwirkung reduziert ist. Man sieht aber auch, dass unterschiedliche Modelle der NN Wechselwirkung unterschiedliche Wellenfunktionen für das Deuteron liefern und das, obwohl sie alle an die experimentellen Streudaten der NN Streuung angefittet sind.

Entsprechende Unterschiede erkennt man auch, wenn man die Beiträge zur Gesamtenergie des Deuterons

$$\begin{aligned}
 E_{Deuteron} &= \langle \Psi|T|\Psi \rangle + \langle \Psi|V|\Psi \rangle \\
 &= \underbrace{\langle \Psi, {}^3S_1|T|\Psi^3S_1 \rangle}_{T_S} + \underbrace{\langle \Psi, {}^3D_1|T|\Psi^3D_1 \rangle}_{T_D} + \underbrace{\langle \Psi, {}^3S_1|V|\Psi^3S_1 \rangle}_{V_{SS}} + \\
 &\quad + 2 \underbrace{\langle \Psi, {}^3S_1|V|\Psi^3D_1 \rangle}_{V_{SD}} + \underbrace{\langle \Psi, {}^3D_1|V|\Psi^3D_1 \rangle}_{V_{DD}} \quad (4.1.9)
 \end{aligned}$$

in die verschiedenen Anteile aufteilt. Dies ist, wiederum für verschiedene Modelle der NN Wechselwirkung, die alle den experimentellen Wert für die Gesamtenergie von -2.22 MeV reproduzieren, in der Tabelle von Abb. 4.4 aufgeführt. Man sieht also, dass die NN Wechselwirkung durch die experimentellen Daten des Deuterons und der NN Streuung nicht eindeutig festgelegt ist.

Local and non-local NN interactions

$$\Psi_{\text{Deuteron}} = \Psi(^3S_1) + \Psi(^3D_1)$$

Energy of the deuteron:

one number originating from different sources

$$-2.22 = T_S + T_D + V_{SS} + V_{DD} + 2 V_{SD}$$

	T_S	T_D	V_{SS}	V_{DD}	$2 V_{SD}$
CDBo	9.79	5.69	-4.77	1.34	-14.27
V18	11.31	8.57	-3.96	0.77	-18.94
Nijm1	9.66	7.91	-1.35	2.37	-20.82
Nijm2	12.11	8.10	-5.40	0.59	-17.83
Reid	12.61	9.53	-0.47	4.55	-28.45

Zustandsgleichung nuklearer Materie, Basel
2001 Folie 1

Abbildung 4.4: *Energie des Deuterons in verschiedenen Modellen der NN Wechselwirkung*

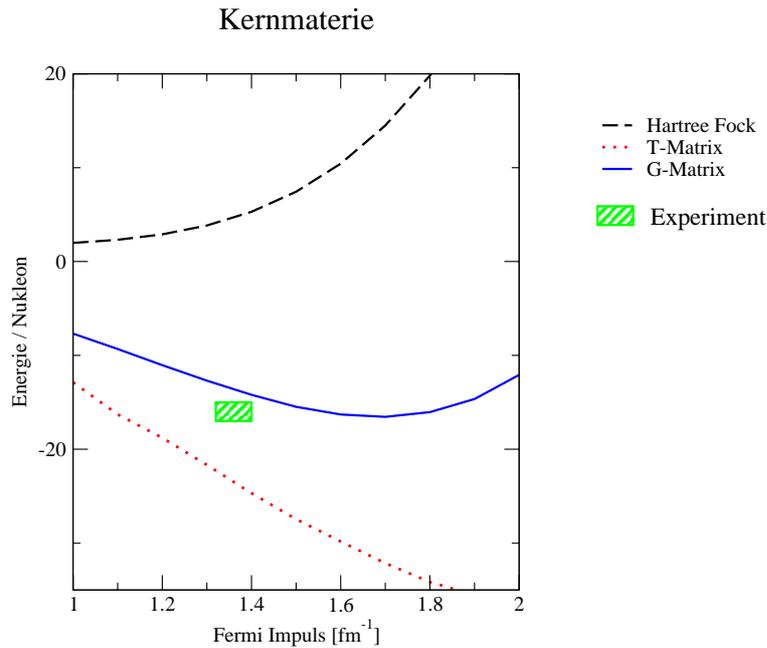


Abbildung 4.5: Berechnete Energie pro Nukleon für Kernmaterie als Funktion des zugehörigen Fermiimpulses k_F . Dargestellt sind die Ergebnisse von Hartree-Fock Rechnungen und Rechnungen, bei denen V durch die \mathcal{T} -Matrix, bzw. die G -Matrix ersetzt sind.

4.2 Kernstruktur mit realistischen Wechselwirkungen

Mit dem im vorhergehenden Abschnitt diskutierten realistischen Modellen einer Nukleon-Nukleon Wechselwirkung kann man nun versuchen, das Vielteilchenproblem der Kernphysik von A wechselwirkenden Nukleonen in optimaler Weise zu lösen, wobei mit der NN Wechselwirkung der Hamiltonoperator ohne eine weitere Parameteranpassung fest vorgegeben ist. Wie bereits in dem Abschnitt über die Kernmaterie 3.2 diskutiert, eignet sich dieses hypothetische Modell der unendlich ausgedehnten Kernmaterie als ein erstes, einfaches Testbeispiel.

Die einfachste Näherung für ein solches System von wechselwirkenden Fermionen ist die Hartree-Fock Näherung. Berechnet man aber für eine solche realistische Wechselwirkung die Energie in der Hartree-Fock Näherung für unterschiedliche Dichten, so sind die Ergebnisse sehr enttäuschend. Als Beispiel sind entsprechende Ergebnisse, berechnet mit der sogenannten CDBONN Wechselwirkung³ in der schwarzen gestrichelten Kurve von Abb. 4.5 als Funktion des Fermiimpulses k_F , der ja gemäß (3.2.37) die

³siehe R. Machleidt, F. Sammarruca, and Y. Song, Phys. Rev. C **53**, R1483 (1996)

	T_{kin}/A [MeV]	E/A [MeV]
CDBONN	23.01	4.64
V18	23.01	30.34
NIJM1	23.01	12.08
Reid	23.01	176.2

Tabelle 4.1: *Kinetische Energie pro Nukleon, T_{kin}/A , und Energie pro Nukleon berechnet in der Hartree-Fock Näherung für Kernmaterie bei $k_F = 1.36 \text{ fm}^{-1}$ für verschiedene Modelle der NN Wechselwirkung*

Nukleonendichte repräsentiert. Man sieht, dass die berechnete Energie für alle betrachteten Dichten positiv ist: Atomkerne wären also nach dieser Rechnung nicht gebunden. Außerdem ergibt sich kein Sättigungspunkt, da die Funktion Energie als Funktion der Dichte kein Minimum aufweist.

Auch andere realistische Modelle für die NN Wechselwirkung liefern keine negativen Werte für die Energie in dieser Hartree-Fock Näherung. Zum Beleg sind in der Tabelle 4.1 die Werte für die kinetische Energie pro Nukleon (siehe (3.2.39)) und die Energie pro Nukleon berechnet für den empirischen Wert der Sättigungsdichte von Kernmaterie ($k_F = 1.36 \text{ fm}^{-1}$) für verschiedene Modelle einer realistischen Wechselwirkung aufgelistet. All diese NN Wechselwirkungen reproduzieren die NN Streuphasen und die Eigenschaften des Deuterons, führen aber in der Hartree-Fock Näherung zu ganz unterschiedlichen, aber stets positiven Energien für die Kernmaterie. Dabei sind die Unterschiede zwischen den Wechselwirkungen zum Teil dramatisch und reichen von 4.6 MeV im Fall des CDBONN bis hinauf zu 176 MeV im Fall des sogenannten Reid soft-core Potentials,

Die Ursache für diese fehlende Bindungsenergie in der Hartree-Fock Näherung sind die starken repulsiven Komponenten kurzer Reichweite in einer realistischen NN Wechselwirkung, die sich aus den NN Streuphasen herleiten (siehe Diskussion im vorhergehenden Abschnitt). Die Hartree-Fock Näherung beschreibt die Kernmaterie als ein System von Nukleonen, die sich unabhängig voneinander im mittleren Einteilchenpotential bewegen. Die resultierenden Einteilchenwellenfunktionen sind ebene Wellen und das bedeutet, dass die Relativwellenfunktionen für die verschiedenen Partialwellen wie eine ebene Welle, durch sphärische Besselfunktionen gegeben sind.

Für die Partialwellen mit $L = 0$ bedeutet dies, dass die Amplitude der Relativwellenfunktionen bei Abstand $r = 0$, also dort wo die NN Wechselwirkung repulsiv ist, maximal ist. Dies führt natürlich zu sehr repulsiven Werten für die Matrixelemente von V und damit zu den positiven Energien der Kernmaterie.

Eine verbesserte Vielteilchentheorie der Kernmaterie sollte berücksichtigen, dass sich

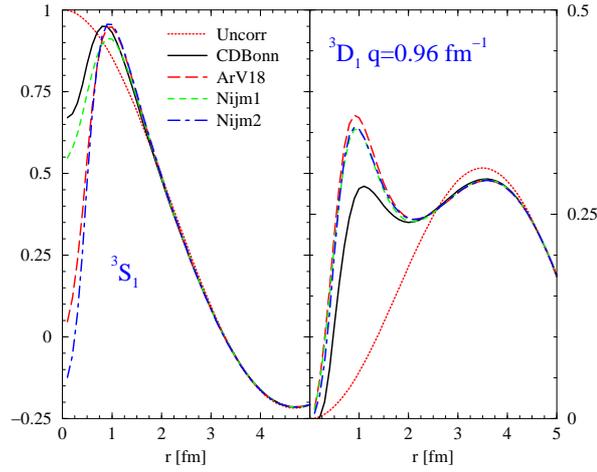


Abbildung 4.6: Relativwellenfunktionen für Protonen und Neutronen in den Partialwellen 3S_1 und 3D_1 (rechter Teil). Dargestellt sind die Relativwellenfunktionen in der Hartree-Fock Näherung (Uncorr) und mit Korrelationen berechnet für verschiedene Modelle der NN Wechselwirkung

die Nukleonen nicht so nahe kommen, dass sie dem repulsiven Anteil der NN Wechselwirkung ausgesetzt sind. Es müssen also NN Korrelationen berücksichtigt werden, die über die Hartree-Fock Näherung hinausgehen. Eine erste Möglichkeit besteht darin, die 2-Teilchen Gleichungen in der Form der Lippman Gleichung (4.1.3)

$$|\Psi\rangle = |\Phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\eta} V |\Psi\rangle . \quad (4.2.10)$$

zu lösen. Eine Verbesserung ergibt sich dadurch, dass man bei der Lösung dieses 2-Teilchenproblems berücksichtigt, dass sich die wechselwirkenden Nukleonen nicht im Vakuum bewegen, sondern im Feld der anderen Nukleonen. Dies bedeutet, dass der Hamiltonoperator H_0 einen entsprechende Korrektur für die gebundenen Teilchen enthalten sollte, $H_0 \rightarrow \tilde{H}_0$. Außerdem muss das Pauli Prinzip berücksichtigt werden in der Form, dass der korrelierte Anteil in der Gleichung für $|\Psi\rangle$ keine Komponenten zulässt, die mit dem Pauli Prinzip nicht verträglich sind. Dies führt zu

$$|\tilde{\Psi}\rangle = |\Phi\rangle + \frac{Q}{W - \tilde{H}_0 + i\eta} V |\tilde{\Psi}\rangle . \quad (4.2.11)$$

Dabei unterdrückt der Pauli Operator Q solche Zustände, die durch die anderen Nukleonen im Medium besetzt sind. Damit wird aber die infinitesimale Größe $i\eta$ überflüssig, der Energienenner als Differenz der Energien von den 2 wechselwirkenden Nukleonen W , also Energien unterhalb der Fermilante, und Eigenwerten von \tilde{H}_0 , also Nukleonen oberhalb der Fermikante, keine Pole aufweist. Ergebnisse für solche Relativfunktionen

mit Korrelationen sind in der Abb. 4.6 dargestellt. Dabei handelt es sich um die Partialwellen, ${}^3S_1 - {}^3D_1$, also den Partailwellen des Deuterons, sodass Abb. 4.6 sozusagen die Wellenfunktionen der Deuteronen im nuklearen Medium darstellt.

Man sieht, dass die Relativwellenfunktionen in der 3S_1 Partialwelle bei sehr kleinen Abständen r im Vergleich zur Relativwellenfunktion ohne Korrelationen unterdrückt ist, bei mittleren Abständen, dort wo die NN Wechselwirkung attraktiv ist, eine größere Amplitude aufweist und schliesslich bei großen Abständen zur unkorrelierten Wellenfunktion "ausheilt". Es gibt also keine von 0 verschiedenen Streuphase, da dies mit dem Pauli Prinzip in Konflikt käme (siehe Diskussion oben).

Die Verstärkung der Amplitude bei mittleren Abständen und der Mechanismus des "Ausheilens" bei großen Abständen ist auch in der 3D_1 Partialwelle deutlich. Hier fehlt die Unterdrückung bei kurzen Abständen, da die unkorrelierte D Welle hier bereits stark unterdrückt ist.

Anstatt die korrelierten Wellenfunktionen zu berechnen kann man natürlich analog zum Fall der freien Nukleonen die \mathcal{T} Matrix berechnen

$$\mathcal{T} = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\eta} \mathcal{T},$$

bzw. mit Berücksichtigung der Mediumeffekte die sogenannte Bethe-Goldstone Gleichung

$$G(W) = V + V \frac{Q}{W - \tilde{H}_0} G. \quad (4.2.12)$$

Mit dieser G -Matrix berechnet man dann die Einteilchenenergien wie in der Hartree-Fock Näherung

$$\varepsilon_i = \langle i|T|i \rangle + \sum_{j \leq F} \langle ij|G(W_{ij})|ij \rangle_A, \quad (4.2.13)$$

wobei die Energie der wechselwirkenden Nukleonen, die sogenannte Startenergie W_{ij} gegeben ist durch die Summe der Einteilchenenergien

$$W_{ij} = \varepsilon_i + \varepsilon_j.$$

In dieser sogenannten Brueckner Hartree Fock Näherung sind also die Lösung der Bethe-Goldstone Gleichung (4.2.12) und die Berechnung der Einteilchenenergien in einem selbstkonsistenten Verfahren auszuführen. Dies führt insbesondere für endliche Atomkerne, bei denen ja außerdem noch die Einteilchenzustände und der zugehörige Pauli Operator Q zu bestimmen ist, zu einem erheblichen Mehraufwand.

Ergebnisse von solchen Brueckner Hartree Fock Rechnungen in Kernmaterie sind ebenfalls in der Abb. 4.5 dargestellt. Dabei bezeichnet die rot gepunktete Linie Ergebnisse, bei denen die Mediumeffekte in der G -Matrix vernachlässigt sind, also G durch \mathcal{T} genähert ist. In dieser T-Matrix Näherung erhält man negative Energien, also eine gebundene Kernmaterie. Man erhält aber auch hier keinen Sättigungspunkt, die Energie

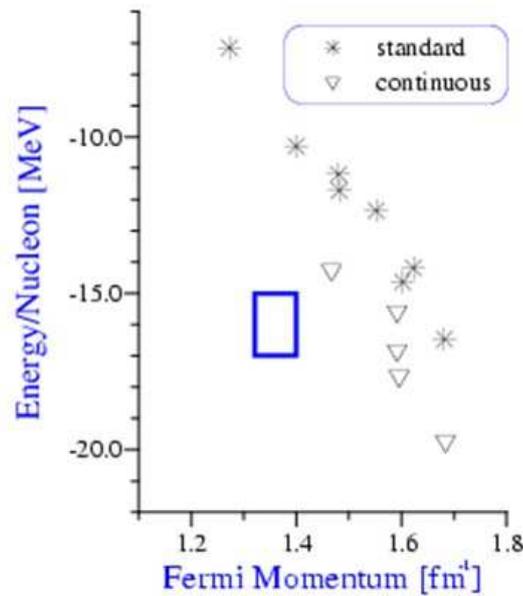


Abbildung 4.7: Ergebnisse für den Sättigungspunkt von Kernmaterie in der Brueckner Hartree Fock Näherung, berechnet mit unterschiedlichen NN Wechselwirkungen

pro Nukleon wird mit wachsendem k_F immer attraktiver, das System kollabiert also zu hohen Dichten.

Erst nach Berücksichtigung der Mediumeffekte in G erhält man negative Energien und ein Minimum, also einen echten Sättigungspunkt der Kernmaterie (siehe durchgezogene blaue Linie in Abb. 4.5). Für das hier benutzte CDBONN Potential ergibt sich ein Wert für die Energie, der ungefähr mit dem experimentellen Wert übereinstimmt. Allerdings liegt der Sättigungspunkt bei einer Dichte, die etwa doppelt so groß ist, wie der empirische Wert.

Dieses Ergebnis lässt sich auch nicht verbessern, wenn man Rechnungen mit unterschiedlichen realistischen NN Wechselwirkungen durchführt. Dies ist in Abb. 4.7 dargestellt, in der für unterschiedliche realistische NN Wechselwirkungen, die Sättigungspunkte dargestellt sind, die man jeweils in der Brueckner Hartree Fock Näherung erzielt. Die berechneten Sättigungspunkte bilden ein Cluster, das aber nicht den experimentellen Wert umfasst. So gibt es Wechselwirkungen, die wie das CDBONN Potential ungefähr die richtige Energie liefern, aber dies bei einer Dichte, die viel zu groß ist. Andere Wechselwirkungen liefern ungefähr den richtigen Wert für den Sättigungspunkt, aber dann eine Energie, die signifikant höher liegt als der empirische Wert. Man nennt dieses Cluster auch die *Coester Bande* nach Fritz Coester, der bereits sehr früh auf die-

ses Phänomen hingewiesen hat⁴. Eine ähnliche Bande ergibt sich auch bei Rechnungen für endliche Kerne⁵.

Viele Versuch wurden unternommen, dieses Ergebnis durch eine weitere Verbesserung der Vielteilchentheorie zu korrigieren. Dabei ergaben sich jedoch allenfalls kleinere Effekte, die auch in der Regel nur zu einer Verschiebung innerhalb der Coester Bande führt.

Offensichtlich gibt es hier Grenzen für eine mikroskopische, parameterfreie Beschreibung des nuklearen Vielteilchensystems, auf der Basis von NN Wechselwirkungen, die im Vakuum und im Medium identisch sind.

Aus diesem Dilemma kommt man heraus, wenn man die Möglichkeit von 3-Teilchen Wechselwirkungen zwischen den Nukleonen akzeptiert, wie sie ja auch schon im Fall des Skyrme Modells einer effektiven Wechselwirkung betrachtet wurden.

Ein anderer Ausweg ist die Berücksichtigung von relativistischen Effekten, wie wir sie am Beispiel des einfachen Walecka Modells im Abschnitt 3.4 diskutiert haben. Dabei verändern sich die Dirac Spinoren der Nukleonen im Medium, was zu einer Veränderung der Matrixelemente von Ein Boson Austausch Potentialen im Medium führt. Diese relativistischen Effekte führen also zu unterschiedlichen Matrixelementen von V im Medium im Vergleich zum Vakuum. In der Tat führen solche relativistischen Brueckner Hartree Fock Rechnungen, man spricht auch von Dirac Brueckner Hartree Fock Rechnungen, zu Ergebnissen, die mit dem experimentellen Wert für den Sättigungspunkt übereinstimmen⁶. Gleichzeitig liefern solche Rechnungen auch sehr gute Beschreibungen für endliche Atomkerne und lösen insbesondere das Problem eines konsistenten Spin-Bahn Terms im Schalenmodell.

Die Frage 3-Teilchen Wechselwirkungen oder relativistische Effekte zur erfolgreichen Beschreibung von Atomkernen wird aktuell intensiv diskutiert.

⁴F. Coester, S. Cohen, B. D. Day and C. M. Vincent, Phys. Rev. C1, 769 (1970)

⁵K. W. Schmid, H. Müther and R. Machleidt, Nucl. Phys. A 530, 14 (1991)

⁶E.N.E. van Dalen and H. Müther, "Relativistic Description of Finite Nuclei Based on Realistic NN Interactions", Phys. Rev. C84, 024320 (2011)