II.4 Schalenmodell des Atomkerns

Wie gerade diskutiert wurde sind das Tröpfchen- und das Fermi-Gas-Modell statistische Modelle, die naturgemäß nur die globalen Eigenschaften eines statistischen Ensembles von Atomkernen beschreiben können, für individuelle Kerne aber weniger erfolgreich sind. Wie in Abschn. II.1 schon kurz erwähnt wurde, gibt es manchmal ziemlich erhebliche Abweichungen von diesem Durchschnittsverhalten, insbesondere für Nuklide mit einer magischen Protonen- oder Neutronenzahl, die auch müssen erklärt werden. Einige dieser besonderen Eigenschaften der "magischen Atomkernen" werden erstens in § II.4.1 dargelegt.

Zur Erklärung dieser Eigenschaften sieht es in Analogie zur Atomphysik passend aus, einen Kern als Menge von Protonen und Neutronen in unterschiedlichen Ein-Teilchen-Zuständen zu beschreiben. Dabei befinden sich die Nukleonen auf sukzessiven entarteten Energieniveaus, die als aufeinander folgende Protonen- bzw. Neutronenschalen können betrachtet werden. Somit handelt es sich um ein *Schalenmodell* des Kerns. Der Unterschied mit dem Fermi-Gas-Modell des vorigen Abschnitts liegt darin, dass die genaue Struktur des Energiespektrums jetzt explizit soll betrachtet werden. Dementsprechend spielt die Form des mittleren Potentials, das die Teilchen einschließt, nun eine Rolle, denn sie bestimmt die Reihenfolge des Energieniveaus (§ [I.4.2]). Die einfachsten Potentiale mit nur einer Ortsabhängigkeit können die experimentell gefundenen magischen Zahlen aber nicht reproduzieren und man muss ein zusätzliches Ingredienz einbauen, und zwar die Kopplung zwischen dem Spin jedes Nukleons und dessen Bahndrehimpuls [II.4.3]

II.4.1 Motivation für ein Schalenmodell

Während die Bethe-Weizsäcker Massenformel die Massen bzw. Bindungsenergien der stabilen Atomkerne erstaunlich gut wiedergibt, treten für Nuklide mit einer magischen Protonen- oder Neutronenzahl, d.h. $Z \in \{2, 8, 20, 28, 50, 82\}$ oder $N \in \{2, 8, 20, 28, 50, 82, 126\}$, relativ große Abweichungen auf, wie in Abb. [II.] zu sehen ist. Genauer sind die Bindungsenergien pro Nukleon solcher Atomkerne größer als das durch die Formel (II.2) durchschnittliche Verhalten, d.h. diese Kerne sind besonders stabil.

Diese erhöhte Stabilität der magischen Kerne spiegelt sich in weiteren Eigenschaften wider:



• Im Vergleich mit ihren unmittelbaren Nachbarn gibt es mehr stabile Isotope bzw. Isotone mit einer magischen Z bzw. N, s. Abb. [I.7]

• Die in Abb. [I.8] dargestellte kosmische Häufigkeit der Kerne mit magischer Z oder N ist höher als diejenige ihrer Nachbarn. Auf dieser Abbildung merkt man auch den Unterschied zwischen den Häufigkeiten von Nukliden mit gerader bzw. ungerader Protonenzahl Z.

Bemerkung: Doppelt magische Kerne sind oft an den Grenzen des Stabilitätsbereichs: ${}^{40}_{20}$ Ca ist der schwerste stabile Nuklide mit N = Z; bei ${}^{48}_{20}$ Ca ist der Neutronenüberschuss besonders hoch; ${}^{208}_{82}$ Pb ist der schwerste stabile Nuklide. Auch instabile doppelt magische Kerne — wie ${}^{48}_{28}$ Ni, Spiegelkern von ${}^{48}_{20}$ Ca mit einem extrem niedrigen $N/Z \simeq 0,71, {}^{78}_{28}$ Ni, mit $N/Z \simeq 1,79$, oder ${}^{100}_{50}$ Sn bzw. ${}^{132}_{50}$ Sn, die fast an den Proton- bzw. Neutron-drip lines sitzen — sind weniger instabil als ihre Nachbarn.

Neben diesen mit der Stabilität verknüpften Eigenschaften der magischen Kerne lassen sich noch ein paar Besonderheiten bei diesen Nukliden merken:

- Bei den magischen Protonenzahlen ändern sich die Parität der ug-Kerne sowie das Vorzeichen des elektrischen Quadrupolmoments (Abb. II.9); bei den magischen Neutronenzahlen ändert sich die Parität der gu-Kerne.
- Die Energie E^* der ersten angeregten Zustände nimmt bei den Kernen mit magischer Z oder N besonders hohe Werte an.

Z.B. gilt für den doppelt magischen $\frac{208}{82}$ Pb-Kern $E^* = 2,61$ MeV, während $E^* \approx 0,8-0,9$ MeV für die Blei-Isotope mit 202, 204, 206, 210 oder 212 Nukleonen, bei denen $N \neq 126$ ist.



Abbildung II.8 – Häufigkeiten der atomaren Elemente im Sonnensystem, abgeschätzt mithilfe von Meteoriten bzw. Beobachtungen der Sonnenphotosphäre. Daten aus Ref. **39**.



Abbildung II.9 – Elektrische Quadrupolmomente der stabilen ug-Kerne. Messdaten aus Ref. [40].

• Der Einfangsquerschnitt für Neutronen — d.h. der Wirkungsquerschnitt für den Prozess⁽²⁸⁾ $n + {}^{A}_{Z}()_{N} \rightarrow {}^{A+1}_{Z}()_{N+1}$ — ist besonders klein für Kerne mit magischer Neutronenzahl. Im Gegenteil zeigen Atomkerne mit N um eins kleiner als eine magische Zahl besonders große Wirkungsquerschnitte für Neutroneneinfang.

Beispielsweise ist $\sigma(n + {}^{137}_{56}\text{Ba}_{81} \to {}^{138}_{56}\text{Ba}_{82}) = 5, 1 \text{ b} \gg \sigma(n + {}^{138}_{56}\text{Ba}_{82} \to {}^{139}_{56}\text{Ba}_{83}) = 0, 35 \text{ b}$ oder $\sigma(n + {}^{207}_{82}\text{Pb}_{125} \to {}^{208}_{82}\text{Pb}_{126}) = 0, 7 \text{ b} \gg \sigma(n + {}^{208}_{82}\text{Pb}_{126} \to {}^{209}_{82}\text{Pb}_{127}) = 0,0005 \text{ b}.$

Die zwei letzteren Eigenschaften sind ähnlich entsprechenden chemischen Eigenschaften der Ele-

 $^{^{(28)}}$ Dabei wird der Produktkern $^{A+1}_{\ \ Z}(\)_{N+1}$ oft in einem angeregten Zustand oder sogar instabil sein.

mente bei den "magischen Zahlen" (2, 10, 18, 36, 54, 86) des atomaren Periodensystems: Wegen ihrer abgeschlossenen Valenzschalen haben die Edelgase, die eine "magische Elektronenzahl" besitzen, eine höhere Anregungsenergie als ihre Nachbarn; außerdem können sie nahezu keine chemische Verbindungen eingehen, d.h. die Valenzelektronen koppeln sich nicht zu den Elektronen anderer Atomen. Umgekehrt sind die Halogene (F, Cl, Br, I) — d.h. Elemente mit Elektronenzahl um eins kleiner als eine magische Zahl — sehr elektronegativ, um ihre Valenzschale abzuschließen.

Diese Analogie mit der Atomphysik suggeriert die Existenz von ähnlichen Schalen im Atomkern: die magischen Protonen- bzw. Neutronenzahlen sollen dann das Abschließen eines durch Protonen bzw. Neutronen besetzten Energieniveaus signalisieren.

II.4.2 Erste Versuche eines Schalenmodells des Atomkerns

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

II.4.2 a Mittleres Potential

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

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

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

Bemerkung: \hat{V}_{ij} beschreibt die Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen, und enthält somit das starke Nukleon–Nukleon Potential, das sich prinzipiell aus Streuexperimenten oder aus der Untersuchung des Deuterons gewinnen lässt, und einen elektromagnetischen Anteil: Coulomb-Abstoßung wenn *i* und *j* Protonen sind, sowie die Kopplung zwischen den magnetischen Dipolmomenten der zwei Nukleonen. \hat{V}_{ijk} entspricht echten Drei-Nukleonen-Kräften,⁽²⁹⁾ die in erster Näherung viel kleiner als die Zwei-Körper-Kräfte sind, für die Beschreibung bestimmter Kerne nötig sind — insbesondere, für sehr neutronenreiche Kerne wie ²⁴O [41] oder ⁴⁸Ca [42].

Bei Gl. (II.19) handelt es sich um den Hamilton-Operator eines Vielteilchenproblems, dessen exakte Lösung eine sehr komplizierte Aufgabe darstellt. In der Tat ist das Problem nur für sehr besondere Wahlen der Wechselwirkungsterme möglich. Stattdessen löst man in erster Näherung ein vereinfachtes Problem, das sich wie folgt erhalten lässt. Erstens wird \hat{H}_{Kern} umschrieben als

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

wobei $h_i \equiv T_i + V(\vec{r}_i)$ jetzt ein Einteilchen-Hamilton-Operator ist.

Die Umschreibung ist nur nützlich, wenn die zwei folgenden Bedingungen erfüllt sind:

⁽²⁹⁾Dabei handelt es sich um Kräfte, die sich nicht auf die Zwei-Körper-Kräfte zwischen allen Paaren reduzieren lassen.

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

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

Das Prinzip der Berechnung ist dann jenes des auch in der Atomphysik benutzten selbstkonsistenten Hartree–Fock-Verfahrens:⁽³⁰⁾

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

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

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

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

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

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

Bemerkungen:

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

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

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

* Eigentlich ist \hat{V}_{rest} ein Operator auf dem Hilbert-Raum des A-Teilchen-Problems und kann somit nicht als "klein" betrachtet werden. Was klein sein kann, sind die Matrixelemente von \hat{V}_{rest} zwischen bestimmten A-Teilchen-Zuständen, insbesondere zwischen den durch das Lösen des Problems ohne \hat{V}_{rest} erhaltenen Energie-Eigenzuständen. Diese Matrixelemente sollen klein gegenüber jene von $\sum_i \hat{h}_i$ sein, was möglicherweise nur in einem begrenzten Energiebereich gelten kann.⁽³¹⁾

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

⁽³⁰⁾Eine Einführung in die Grundlagen der Methode ist z.B. in Ref. 43 zu finden.

⁽³¹⁾Es kann auch passieren, dass die Eigenzustände von $\sum_i \hat{h}_i$ für gewisse Observablen schlechte Erwartungswerte liefern, die mit experimentellen Ergebnissen nicht passen.

44

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