

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

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

Im Fall des dreidimensionalen Oszillatorpotentials (II.23) findet man äquidistante Ein-Teilchen-Niveaus mit der Energie $\tilde{\varepsilon}_{nl} = [2(n-1) + \ell + \frac{3}{2}]\hbar\omega$, wobei $\omega^2 \equiv 2V_0/mR^2$. Der Entartungsgrad der Niveaus wächst schnell: auf dem N -ten Niveau ($N \in \mathbb{N}$) sitzen alle mögliche (n, ℓ) -Zustände mit $2(n-1) + \ell = N$ und jeder (n, ℓ) -Zustand ist wie oben $2(2\ell + 1)$ -mal entartet. Die daraus folgenden

magischen Zahlen sind dann 2, 8, 20, 40, 70, 112, 168... Die Reihenfolge der Energieniveaus des dreidimensionalen harmonischen Oszillators ist in der Tabelle II.3 bzw. in Abb. II.11 dargestellt. Dabei kann man merken, dass alle Zustände auf einem gegebenen Niveau dieselbe Parität besitzen, und zwar abwechselnd positiv und negativ.

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

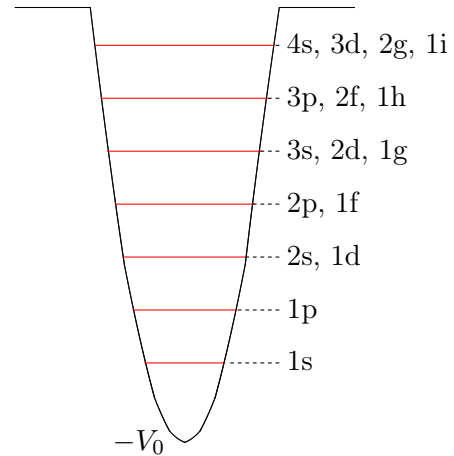


Abbildung II.11: Energieniveaus im Oszillatorpotential.

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

Die übliche Herleitung der Energieniveaus des eindimensionalen harmonischen Oszillators beruht auf der Nutzung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \hat{a}^\dagger und \hat{a} .⁽³⁵⁾ Die Umschreibung des Potentials (II.23) in kartesischen Koordinaten als Summe dreier unabhängigen eindimensionalen Oszillatoren liefert dann sofort die Eigenzustände und Eigenenergien des dreidimensionalen Oszillators.

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

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

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

Der Grund des Scheiterns bei den höheren Zahlen lässt sich aus der Analysis der drei obigen einfachen Potentiale (II.22)–(II.24) ahnen. Somit wird das Problem wahrscheinlich durch den großen Entartungsgrad $2(2\ell + 1)$ der (n, ℓ) -Niveaus verursacht. Zum Beispiel kommt in allen drei Modellen nach dem 2s-Niveau das 14-mal entartete 1f-Niveau vor, was das Auftauchen der magischen Zahl 28 verhindert. Andere „natürliche“ Potentialforme könnten hierbei nicht weiter helfen, solange die Entartung der Zustände mit denselben (n, ℓ) nicht aufgehoben wird.

II.4.3 Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung

Das Problem des richtigen Abschließens der Nukleonenschale wurde unabhängig voneinander einerseits durch Maria Goeppert-Mayer [49, 50], andererseits durch J. Hans D. Jensen und seine Mitarbeiter [51] gelöst. Ihre Idee war, die Entartung der (n, ℓ) -Zustände durch die Einführung eines zusätzlichen Beitrags zum Ein-Teilchen-Potential aufzuheben.

⁽³⁵⁾Diese Herleitung ist in jedem Lehrbuch der Quantenmechanik zu finden, z.B. in Cohen-Tannoudji [47, Kap. V], Fließbach [44, Kap. 34] oder Messiah [48, Kap. 12].

Die Natur dieses zusätzlichen Terms wurde noch einmal durch die Analogie zur Atomphysik suggeriert: In der Atomhülle ergibt die Kopplung zwischen dem Spin und dem Bahndrehimpuls eines Elektrons die geringe „Feinstruktur“-Aufspaltung dessen Energieniveaus. Die durch die Kernkräfte verursachte Aufspaltung der Nukleonen-Energieniveaus erwies sich erstaunlicherweise als verhältnismäßig viel größer. Somit kann diese Kopplung das Niveauschema erheblich modifizieren.

Bezeichnet man das kugelsymmetrische Ein-Teilchen-Potential von § II.4.2 als $V_c(r)$, so lautet das neue zu betrachtende effektive Potential

$$\hat{V}(r) = V_c(r) + V_{s.o.}(r) \hat{L} \cdot \hat{S}, \tag{II.30}$$

wobei \hat{L} bzw. \hat{S} der Bahndrehimpuls- bzw. der Spin-Operator des Nukleons ist. Die Radialfunktion $V_{s.o.}(r)$ bestimmt die Stärke der Kopplung zwischen Spin und Bahndrehimpuls. Ein üblicher Ansatz für $V_{s.o.}(r)$ in Berechnungen ist, in Analogie zum „Thomas“-Term in der Atomhülle,⁽³⁶⁾

$$V_{s.o.}(r) \propto \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr}, \tag{II.31}$$

wobei die Proportionalitätskonstante negativ ist. Abbildung II.12 stellt diese Abhängigkeit im Fall eines Woods-Saxon-Potentials $V_c(r)$ dar: $V_{s.o.}$ ist relativ klein im inneren Teil des Atomkerns und trägt vor allem am Kernrand bei. Dabei ist das Ziel, die tiefstliegenden Niveaus wenig zu stören, um die magischen Zahlen 2, 8, 20 im neuen Energieschema zu erhalten.

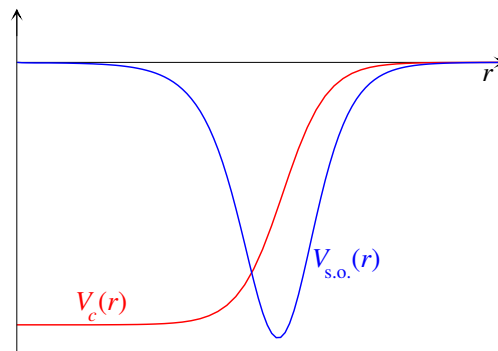


Abbildung II.12 – Woods-Saxon Potential (II.24) zusammen mit dem durch Gl. (II.31) gegebenen entsprechenden Radialterm des Spin-Bahn Potentials.

Nach Einführung des zusätzlichen $(\hat{L} \cdot \hat{S})$ -Terms kommutieren \hat{L} und \hat{S} nicht mehr mit dem neuen Hamilton-Operator, sodass ihre Erwartungswerte nicht mehr Konstanten der Bewegung sind. Dementsprechend lassen sich die Eigenzustände nicht mehr durch die Quantenzahlen m_ℓ und m_s charakterisieren. Ein neuer vollständiger Satz kommutierender Observablen ist dann⁽³⁷⁾

$$\{\hat{h}, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z\},$$

wobei $\vec{J} \equiv \vec{L} + \vec{S}$ der Gesamtdrehimpuls des Nukleons ist. Der mit \hat{J}^2 bzw. \hat{J}_z assoziierte Eigenwert wird durch eine neue Quantenzahl j bzw. m_j charakterisiert und beträgt $j(j + 1)\hbar^2$ bzw. $m_j\hbar$.

Die Kopplung des Bahndrehimpulses \hat{L} und des Spins \hat{S} führt je nach ihren relativen Orientierungen zu zwei möglichen Werten der *Gesamtdrehimpulsquantenzahl* j :

- wenn der Nukleonspin parallel zu seinem Drehimpuls ist, gilt $j = \ell + \frac{1}{2}$; daher kann m_j die $2\ell + 2$ verschiedenen Werte $-\ell - \frac{1}{2}, \dots, \ell + \frac{1}{2}$ annehmen.
- wenn \vec{S} und \vec{L} antiparallel sind, ergibt sich $j = \ell - \frac{1}{2}$; dann gibt es 2ℓ mögliche Werte für m_j .

⁽³⁶⁾Die Spin-Bahn Kopplung der Elektronhülle wird durch die Bewegung des Elektrons im elektrischen Feld des Atomkerns verursacht: das rotierende Elektron spürt ein Magnetfeld, zu dem sein Spin koppelt. Der daraus folgende Spin-Bahn-Term lässt sich im Rahmen der Quantenelektrodynamik berechnen, vgl. z.B. Ref. [52], Kap, IV § 33].

⁽³⁷⁾Die Bemerkung der Fußnote 32 bleibt hier auch gültig: alle Nukleonen haben den Spin $s = \frac{1}{2}$.

Die Energie des auf den Wert 1 normierten Eigenzustands $|n, \ell, j, m_j\rangle$ lautet

$$\langle n, \ell, j, m_j | \hat{h} | n, \ell, j, m_j \rangle = \langle n, \ell, j, m_j | \hat{V}_c | n, \ell, j, m_j \rangle + V_{s.o.} \langle n, \ell, j, m_j | \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} | n, \ell, j, m_j \rangle,$$

wobei der Beitrag des V_c -Terms in erster Näherung derselbe bleibt ($\tilde{\varepsilon}_{n\ell}$), wie in § II.4.2 schon berechnet wurde, und hängt somit nur von n und ℓ ab. Die durch den Spin-Bahn-Kopplungsterm induzierte Verschiebung des Energieniveaus für die beiden Fälle $j = \ell + \frac{1}{2}$ und $j = \ell - \frac{1}{2}$ lässt sich mithilfe der Beziehung $\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$ leicht berechnen:

$$\begin{aligned} \langle n, \ell, j, m_j | \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} | n, \ell, j, m_j \rangle &= \frac{1}{2} [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)] \hbar^2 \langle n, \ell, j, m_j | n, \ell, j, m_j \rangle \\ &= \begin{cases} +\frac{1}{2} \hbar^2 \ell & \text{für } j = \ell + \frac{1}{2}, \\ -\frac{1}{2} \hbar^2 (\ell + 1) & \text{für } j = \ell - \frac{1}{2}. \end{cases} \end{aligned}$$

Daher ist die Ein-Teilchen-Energie jetzt gegeben durch

$$\tilde{\varepsilon}_{nlj} \simeq \tilde{\varepsilon}_{n\ell} + \begin{cases} +\frac{1}{2} \hbar^2 \ell \langle V_{s.o.} \rangle_{n\ell} & \text{für } j = \ell + \frac{1}{2}, \\ -\frac{1}{2} \hbar^2 (\ell + 1) \langle V_{s.o.} \rangle_{n\ell} & \text{für } j = \ell - \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (\text{II.32})$$

wobei $\langle V_{s.o.} \rangle_{n\ell}$ den Erwartungswert im $n\ell$ -Zustand des radialen Anteils des Spin-Bahn-Terms bezeichnet.

Experimentell gilt für diesen Radialanteil $V_{s.o.}(r) < 0$, was natürlich zu einem ebenfalls negativen Erwartungswert führt. Deshalb liegen die Zustände mit höherer Gesamtdrehimpulsquantenzahl $j = \ell + \frac{1}{2}$ energetisch niedriger – d.h. sie sind stärker im Potential gebunden – als diejenigen mit kleinerer $j = \ell - \frac{1}{2}$. Dies stellt das gegenseitige Verhalten zur Wirkung der Spin-Bahn Kopplung in der Elektronenhülle eines Atoms dar.

Aus Gl. (II.32) ergibt sich die Aufspaltung der Energieniveaus mit $j_+ = \ell + \frac{1}{2}$ und $j_- = \ell - \frac{1}{2}$ bei festen Werten von n und ℓ :

$$\Delta\varepsilon \equiv \tilde{\varepsilon}_{nlj_-} - \tilde{\varepsilon}_{nlj_+} \propto 2\ell + 1.$$

Diese Aufspaltung wächst daher mit zunehmender Bahndrehimpulsquantenzahl ℓ des Nukleons. Zur Kennzeichnung der neuen j -Abhängigkeit der Energieniveaus wird die Quantenzahl j der bisher benutzten Schreibweise als tiefgestellter Index beigefügt.

Beispielsweise wird die 1f-Schale durch die Spin-Bahn-Kopplung in zwei Niveaus aufgespalten: mit der höheren Energie kommt das 6-mal entartete $1f_{5/2}$ -Niveau vor; tiefer liegt das stärker gebundene $1f_{7/2}$ -Niveau mit 8 Zuständen. Somit wird 28 zu einer magischen Zahl! Ebenfalls führt die Aufspaltung der 1g- und 1h-Niveaus in $1g_{7/2}$ und $1g_{5/2}$ bzw. $1h_{7/2}$ und $1h_{9/2}$ zu den magischen Zahlen 50 und 82, wie in Abb. II.13 gezeigt wird.

Durch die Einführung unterschiedlicher Potentialtiefen $V_0^{(p)}$ und $V_0^{(n)}$ im mittleren Potential und nach Berücksichtigung des zusätzlichen Coulomb-Potentials für die Protonen treten unterschiedliche Energieniveaus für Protonen und Neutronen auf. Beispielsweise werden die Ordnungen der $1g_{7/2}$ und $2d_{5/2}$ in den beiden Reihen umgetauscht. Die ungleichen Potentiale können außerdem wie in Abb. II.13 möglicherweise zu unterschiedlichen magischen Zahlen bei den höchstliegenden Niveaus führen.

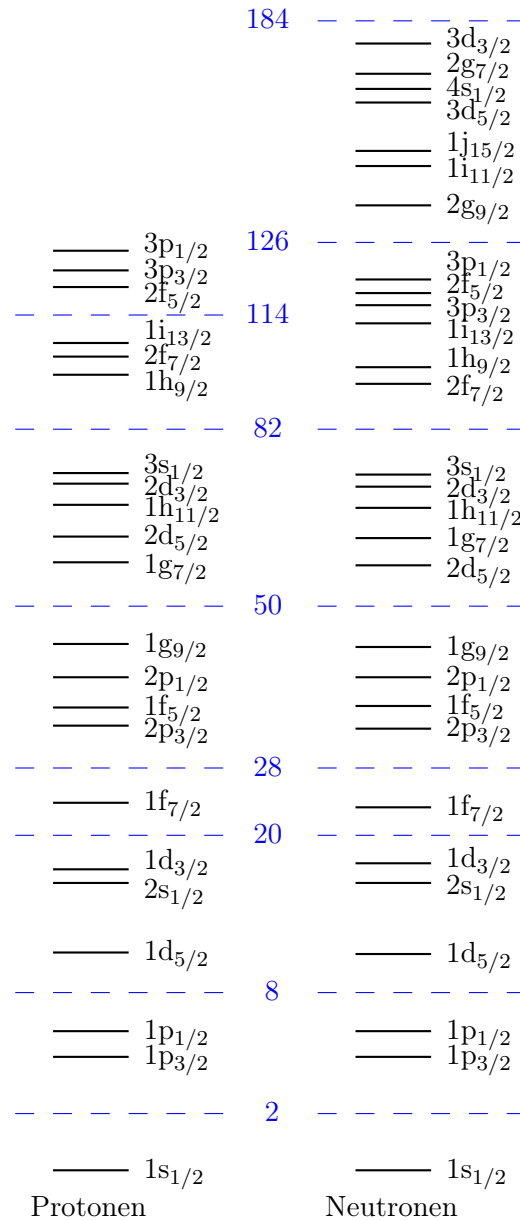


Abbildung II.13 – Einteilchen-Energieniveaus in einem realistischen Woods–Saxon Potential unter Berücksichtigung der Spin-Bahn Kopplung.

II.4.4 Vorhersagen des Einteilchen-Schalenmodells des Atomkerns

II.4.4 a Kernspin und Parität im Grundzustand

Im Grundzustand des Atomkerns sind zunächst die tiefsten Nukleonenschalen völlig besetzt, so dass nur das höchste gefüllte Energieniveau möglicherweise nicht voll ist. Die abgeschlossenen j -Schalen, die $2j + 1$ Protonen bzw. Neutronen enthalten, liefern keinen Beitrag weder zum Gesamtdrehimpuls des Kerns noch zu seiner Parität:

- Die Projektionen $J_z = -j\hbar, (-j + 1)\hbar, \dots, (j - 1)\hbar, j\hbar$ des Gesamtdrehimpulses der verschiedenen Nukleonen der Schale kompensieren sich gegenseitig, und tragen deshalb nicht zu J_{Kern} bei.

- Da $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ halbzahlig ist, ist die Zahl $2j + 1$ der Nukleonen auf der Schale gerade, sodass das Produkt der individuellen Paritäten $(-1)^\ell$ der Nukleonen insgesamt $+1$ ergibt.

Dieses Ergebnis führt sofort zu den folgenden Vorhersagen:

- Atomkerne, deren letzte besetzte Protonen- und Neutronenschalen abgeschlossen sind, haben

Spin und Parität $J_{\text{Kern}}^{\text{P}} = 0^+$.

Experimentell stimmt das: z.B. $J_{\text{Kern}}^{\text{P}}(^{16}_8\text{O}) = 0^+$.

- Wegen der angenommenen Unabhängigkeit der Nukleonen im Potential haben die ug- bzw. gu-Kerne, bei denen es nur ein Proton bzw. Neutron außerhalb einer abgeschlossenen j -Schale gibt, genau den Spin und die Parität dieses ungepaarten Nukleons.
Experimentell stimmt das auch: z.B. ist für $^{17}_8\text{O}$, mit einem einzelnen Neutron auf der $1d_{5/2}$ -Schale, $J_{\text{Kern}}^{\text{P}} = \frac{5}{2}^+$.
- Analog bestimmt ein einzelnes isoliertes *Loch*, entsprechend einem fehlenden Nukleon, Spin und Parität der ug- oder gu-Kerne, bei denen ein einziges Proton bzw. Neutron auf der letzten besetzten Schale fehlt.
Abermals stimmt das mit den Messdaten: z.B. $J_{\text{Kern}}^{\text{P}}(^{15}_8\text{O}) = \frac{1}{2}^-$, mit einem Loch in der Neutronen- $1p_{1/2}$ -Schale.

Bei Kernen mit teilweise gefüllten Schalen kann das Einzelteilchen-Schalenmodell nicht weiter helfen. Experimentelle Beobachtungen und das Berücksichtigen der Restwechselwirkung V_{Rest} — entsprechend einer Abweichung vom Ein-Teilchen-Problem — motivieren einen zusätzlichen Ansatz:

Sobald zwei Protonen bzw. zwei Neutronen in der gleichen Schale gebunden sind, koppeln sie zum energetisch bevorzugten Zustand mit Gesamtdrehimpuls $\vec{J}_1 + \vec{J}_2 = \vec{0}$.

Dieser Ansatz erlaubt weitere Vorhersagen:

- gg-Kerne haben Spin und Parität $J_{\text{Kern}}^{\text{P}} = 0^+$; diese Vorhersage ist experimentell bestätigt.⁽³⁸⁾
- ug- und gu-Kerne haben den Spin und die Parität des ungepaarten Nukleons $J_{\text{Kern}}^{\text{P}} = j^{(-1)^{\ell}}$. Dies stimmt auch sehr gut mit den experimentellen Ergebnissen (s. Ref. [24] oder Ref. [8, Experimente 56-57]), bis auf Abweichungen bei Kernen mit $150 \lesssim A \lesssim 200$.

Bemerkung: Der oben eingeführte Ansatz reicht nicht aus, um Vorhersagen für den Spin und die Parität eines uu-Kerns zu erlauben. Um die gemessenen Eigenschaften zu erklären ($J_{\text{Kern}}^{\text{P}}(^2_1\text{H}) = 1^+$, $J_{\text{Kern}}^{\text{P}}(^6_3\text{Li}) = 1^+$, $J_{\text{Kern}}^{\text{P}}(^{10}_5\text{B}) = 3^+$, $J_{\text{Kern}}^{\text{P}}(^{14}_7\text{N}) = 1^+$ für die stabilen Nuklide) werden in der Literatur die sog. starke und schwache *Nordheim Regeln* eingeführt (vgl. z.B. Ref. [5]).

⁽³⁸⁾ ... was natürlich ist, denn der zugrunde liegende Ansatz basiert auf den experimentellen Fakten!