

Nichtlineare Mesongleichung und Absättigung der Kernkräfte.

Von

P. MITTELSTAEDT.

Mit 9 Figuren im Text.

(Eingegangen am 19. Dezember 1953.)

Mit Hilfe der von SCHIFF und THIRRING vorgeschlagenen Differentialgleichung $\Delta\varphi(\mathbf{r}) - \mu^2\varphi(\mathbf{r}) - \lambda g^4\varphi^3(\mathbf{r}) = -g\rho(\mathbf{r})$ für die Potentialfunktion der Kernkräfte werden die Bindungsenergien der schweren und leichten Atomkerne bestimmt. Für die schweren Kerne wird das THOMAS-FERMI-Modell, für einige leichte (${}^4_2\text{He}$, ${}^{16}_8\text{O}$, ${}^{40}_{20}\text{Ca}$) das Schalenmodell verwandt. Die Kopplungskonstante g sowie die Konstante λ vor dem nichtlinearen Glied werden auf Grund eines genaueren Verfahrens als bei SCHIFF und MALENKA neu bestimmt. Bei der Berechnung der Bindungsenergie mit diesen Konstanten wird sowohl die Oberflächenenergie, als auch die COTLOMB-Energie vollständig berücksichtigt. Die gewonnenen Ergebnisse für die Bindungsenergie zeigen befriedigende Übereinstimmung mit den Werten der halbempirischen WEIZSÄCKER-BETHE-Formel. Die berechnete Dichte der Nukleonen sowie die Breite des Oberflächengebietes stehen in guter Übereinstimmung mit früheren Resultaten.

§ 1. Einleitung.

Die Bindungsenergie eines Nukleons im Kern läßt sich in ihrer Abhängigkeit vom Atomgewicht durch die halbempirische WEIZSÄCKER-BETHE-Formel darstellen. Die Energie eines Atomkernes mit der Gesamtnukleonenzahl A , und der Neutronenzahl Z , ist auf Grund dieser Überlegungen:

$$E(A) = -aA + bA^{\frac{2}{3}} + c \frac{(N-Z)^2}{A} + E_c. \quad (1)$$

Die Größen a , b und c sind Konstanten, die aus der Erfahrung entnommen werden, E_c ist die elektrostatische Abstoßungsenergie der Protonen.

In der folgenden Arbeit soll untersucht werden, wie diese Formel mit Hilfe theoretischer Überlegungen begründet werden kann, wenn man annimmt, daß die Potentialfunktion $\varphi(\mathbf{r})$ der Kernkräfte der von SCHIFF¹ und THIRRING² vorgeschlagenen nichtlinearen Differentialgleichung

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) - \varphi(\mathbf{r})\mu^2 - \lambda g^4\varphi(\mathbf{r})^3 = -g\rho(\mathbf{r}) \quad (2)$$

gehört. ($\rho(\mathbf{r})$) ist die klassische Dichte der Nukleonen, g und λ sind Konstanten.

¹ SCHIFF, I. J.: Phys. Rev. 84, I.

² THIRRING, W. E.: Z. Naturforsch. 1952, 63.

Sieht man zunächst einmal von dem zu $(N-Z)^2$ proportionalen Glied ab, beschränkt sich also auf Kerne mit gleicher Protonen- und Neutronenzahl ($N=Z$), und läßt weiterhin das Glied E_c beiseite, da es keine Schwierigkeiten bei der Interpretation bietet, so bleibt die Deutung von $E_b(A) = -aA + bA^{\frac{2}{3}}$ offen. Dieser Energieanteil muß für das Zusammenhalten der Kerne verantwortlich gemacht werden, und rührt wenigstens zum Teil von den anziehenden Kernkräften her. Das erste Glied in E_b wird als Volumenenergie, das zweite als Oberflächenenergie bezeichnet.

Die Tatsache, daß $\lim_{A \rightarrow \infty} \frac{E_b(A)}{A} = E_\infty$ ein endlicher Wert ist, daß also die Bindungsenergie pro Nukleon eine feste Grenze nicht überschreiten kann, wird als Absättigung der Energie bezeichnet. Durch Streuexperimente an Atomkernen ist weiterhin bekannt, daß der Radius $R(A)$ der (kugelförmig angenommenen) Kerne in Abhängigkeit vom Atomgewicht A befriedigend durch $R(A) = R_0 A^{\frac{1}{3}}$ dargestellt werden kann, wobei $R_0 \approx 1,4 \cdot 10^{-13}$ cm eine von A unabhängige Zahl ist. Daher hat die Dichte $\rho(r)$ der Nukleonen im Kern für alle A einen festen Wert. Diese Tatsache wird als Absättigung der Dichte bezeichnet. Die beiden Phänomene, die Absättigung der Energie und die der Dichte sind theoretisch nicht ohne weiteres zu interpretieren. Gibt man nämlich eine Anziehungskraft $V(r)$ zwischen den A Nukleonen vor, die der Einfachheit halber nur vom gegenseitigen Abstand r zweier Nukleonen abhängen möge, so ist, da $A(A-1)/2$ anziehende Nukleonpaare existieren, die gesamte potentielle Energie des Kernes die Summe der potentiellen Energien dieser $A(A-1)/2$ Summanden. Daher wächst die Bindungsenergie eines Kernes angenähert mit A^2 , und nicht, wie es die WEIZSÄCKER-BETHE-Formel fordert, proportional zu A an. Eine einfache Rechnung zeigt weiterhin, daß bei einer solchen Anziehungskraft die Dichte der Nukleonen nicht für alle Kerne eine konstante Größe, sondern im Widerspruch zur Erfahrung, linear mit dem Atomgewicht anwachsen würde.

Frühere Arbeiten^{1,2,3} haben versucht diese Schwierigkeiten dadurch zu lösen, daß an Stelle einer gewöhnlichen Anziehungskraft $V(r)$ eine Austauschkraft $V(r)P$ verwandt wurde, derart, daß der Operator P eine oder mehrere Koordinaten der beiden wechselwirkenden Teilchen miteinander vertauscht. Da ein solcher Koordinatenaustausch nur zwischen je zwei Teilchen stattfinden kann, stehen also nur jeweils zwei Partikel miteinander in Wechselwirkung, so daß insgesamt nur $A/2$ wechselwirkende Paare existieren. Dadurch wird das Anwachsen der

¹ MAJORANA, E.: Z. Physik, **82**, 137 (1933).

² WEIZSÄCKER, C. F. v.: Z. Physik **96**, 431 (1935).

³ FLÜGGE, S.: Z. Physik **96**, 499 (1935).

Bindungsenergie linear zum Atomgewicht, wie es die WEIZSÄCKER-BETHE-Formel fordert, richtig wiedergegeben. In den Arbeiten von v. WEIZSÄCKER¹ und FLÜGGE² sind daher solche Austauschkräfte verwandt worden, wobei für P der Vertauschungsoperator P_r der Ortskoordinaten gewählt wurde (MAJORANA-Kräfte³).

Verwendet man außer den Kräften mit Ortsaustausch auch solche, die Spin (P_s) und Isotopenspin (P_t) vertauschen, wählt also für die Kernpotentiale $W(r, s, t)$ den allgemeinen Ansatz

$$W(r, s, t) = WV(r) + MV(r)P_r + BV(r)P_s + HV(r)P_t$$

mit unbestimmten Koeffizienten W, M, B und H , so ergibt die Forderung der Absättigung der Energie zwischen den Faktoren die Beziehung

$$W \cdot \frac{M}{4} - \frac{H}{2} + \frac{B}{2} = 0. \quad (3)$$

Neuere Versuche über Proton-Neutron-Streuung bei hohen Energien gestatten es ebenfalls, Aussagen über die verschiedenen Anteile der Austauschkräfte zu machen. Danach ist

$$B = H = -0,134; \quad W = M = -0,634.$$

Daher entspricht die bei v. WEIZSÄCKER¹ gemachte Annahme reiner MAJORANA-Kräfte nicht den Tatsachen, ebenso wie die für gemischte Austauschkräfte gültige Koeffizientenbedingung³ wegen der Streuexperimente nicht erfüllt sein kann. Vielmehr folgt aus diesen Experimenten, daß etwa 50% der Kräfte gewöhnliche Kräfte sind. Bei einem so hohen Prozentsatz gewöhnlicher Kräfte kann jedoch keine Absättigung der Energie mehr erreicht werden.

Eine weitere Schwierigkeit in den genannten Arbeiten^{3,1} entstand dadurch, daß sich bei Vorgabe einer ortsabhängigen Austauschkraft, etwa $V(r) = a e^{-br}$ die Energie schwerer und leichter Kerne nicht gleichzeitig richtig darstellen lassen. Gibt man nämlich den Massendefekt eines schweren Kernes vor, so erhält man nämlich eine Relation $b_s = b_s(a)$ zwischen den beiden Konstanten a und b , jedoch eine andere Relation $b_l = b_l(a)$, wenn man den Massendefekt eines leichten Kernes vorgibt. Der Vergleich dieser beiden Funktionen⁴ ergibt, daß b_l etwa doppelt so groß wie b_s ist, so daß es also auch bei Vorgabe von Austauschkräften nicht möglich ist, mit einem Wertepaar a, b sowohl die leichten als auch die schweren Kerne richtig zu berechnen. Dies liegt, wie HEISENBERG⁴ gezeigt hat, zum Teil daran, daß die THOMAS-FERMI-Methode nicht für

¹ WEIZSÄCKER, C. F. v.: Z. Physik **96**, 431 (1935).

² FLÜGGE, S.: Z. Physik **96**, 499 (1935).

³ MAJORANA, E.: Z. Physik **82**, 137 (1933).

⁴ HEISENBERG, W.: Z. Physik **96**, 473 (1935).

alle Kerne mit der gleichen Berechtigung angewandt werden darf, da bei leichten Kernen Strukturunterschiede (Schalenmodell) eine wichtige Rolle spielen.

Da es aus den genannten Gründen nicht möglich ist, die Kernenergien mit Hilfe von Austauschkräften zu interpretieren, ist zur Erklärung der Absättigung in letzter Zeit ein anderer Weg beschritten worden. SCHIFF¹ und THIRRING² haben vorgeschlagen, nur gewöhnliche Kräfte anzunehmen, jedoch mit einem wesentlichen Unterschied im Hinblick auf die früheren Ansätze: Während früher stets angenommen wurde, daß sich die Gesamtenergie durch Addition der Energien der einzelnen Nukleonpaare gewinnen läßt, wird diese Eigenschaft der additiven Superponierbarkeit von Punktquellenpotentialen in den genannten Arbeiten aufgegeben. Mathematisch bedeutet dies, daß an Stelle einer linearen Differentialgleichung für die Potentialfunktion $\varphi(r)$ der Kernkräfte etwa die nichtlineare Differentialgleichung

$$\Delta \varphi(r) - \mu^2 \varphi(r) - \frac{\lambda g^4}{(\hbar c)^2} \varphi(r)^3 = -g \rho(r) \quad (4)$$

verwandt wird.

Wie SCHIFF gezeigt hat, liefert diese Differentialgleichung in der Tat Absättigung für Energie und Dichte. Die bei SCHIFF und MALENKA³ durchgeführten Rechnungen sind jedoch nur eine sehr schlechte Näherung an die wirklichen Verhältnisse, da dort sowohl die Oberflächen- als auch die COULOMB-Energie weggelassen worden sind. Das Variationsproblem im THOMAS-FERMI-Modell wurde daher nur an der Volumenenergie der Kernkräfte und dem volumenproportionalen Teil der kinetischen Energie durchgeführt. Da andererseits gerade der Oberflächen- und COULOMB-Anteil die Abhängigkeit der Bindungsenergie vom Atomgewicht A bewirken, so konnte bei SCHIFF noch kein Vergleich mit der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel vorgenommen werden. In der vorliegenden Arbeit sollen die Bindungsenergien der Atomkerne bei schweren Kernen mit dem THOMAS-FERMI-Modell, bei leichten Kernen mit dem Schalenmodell berechnet werden. Für die Kernkräfte werden dabei ausschließlich die von SCHIFF vorgeschlagenen Kräfte verwendet, wogegen Austauschkräfte völlig unberücksichtigt bleiben sollen. Dies ist wegen der gesicherten Existenz von etwa 50% Austauschkräften sicher keine gute Näherung, jedoch soll es hier darauf ankommen, die Absättigung bei Voraussetzung gewöhnlicher Kräfte im Sinne der SCHIFFSchen Ansätze zu verstehen.

Im Unterschied zu den obengenannten Arbeiten sollen hier jedoch sämtliche Energieanteile voll berücksichtigt werden, was nicht nur für

¹ SCHIFF, L. J.: Phys. Rev. **84**, I.

² THIRRING, W. E.: Z. Naturforsch. **1952**, 63.

³ MALENKA, B. J.: Phys. Rev. **86**, 68.

den Vergleich mit der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel von Bedeutung ist, sondern auch für die Bestimmung der Konstanten g und λ in der nichtlinearen Differentialgleichung.

SCHIFF¹ und MALENKA² hatten g und λ aus den experimentellen Daten mittels einer einfachen Rechnung erhalten, die sich aber nur auf die Volumenenergie bezog. Die Berücksichtigung der Oberflächen- und COULOMB-Energie im Variationsproblem der Gesamtenergie verändert jedoch die dort gewonnenen Werte ($g=6,32$, $\lambda=13,6$) stark. Mit den hier neu berechneten Werten g und λ werden dann die Bindungsenergien $E(A)$ und die Dichten für verschiedene Werte von A bestimmt, so daß ein direkter Vergleich mit der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel, sowie mit der Beziehung $R(A) = R_0 A^{\frac{1}{3}}$ möglich wird.

§ 2. Allgemeines.

Es sollen im folgenden die Methoden angegeben werden, mit denen die Bindungsenergien für die Atomkerne berechnet werden. Dabei sollen die leichten Kerne mit einem vereinfachten HARTREE-FOCK-Verfahren, wie es von HEISENBERG vorgeschlagen wurde, die schweren Kerne mit dem THOMAS-FERMI-Modell behandelt werden. Wir wollen uns stets auf solche Kerne spezialisieren, bei denen eine gleiche Protonen- und Neutronenzahl vorliegt. Auf das in der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel auftretende Glied $c \frac{(N-Z)^2}{A}$ soll in dieser Arbeit nicht eingegangen werden.

a) *Leichte Atomkerne.* Aus dem Schalenmodell des Atomkerns ist bekannt, daß man in einer guten Näherung die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators als Nukleonenwellenfunktion für kleine Kerne verwenden kann. Aus diesen Funktionen setzt sich dann die Gesamtwellenfunktion Φ des Kernes in erster Näherung als SLATER-Determinante zusammen.

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_P (-1)^P \prod_{i=1}^A \psi_i(P_i).$$

Mit P sind die Permutationen gemeint, die in den Index i in P_i überführen. ψ_i sind die Einteilchenwellenfunktionen, die von den Orts-, Spin- und Ladungsvariablen abhängen. Für die Raumabhängigkeit der Eigenfunktionen sollen die Funktionen des harmonischen Oszillators verwendet werden. Φ ist die in allen Koordinaten antisymmetrische und normierte Gesamtwellenfunktion. Bei den drei Kernen ${}^4_2\text{He}$, ${}^{16}_8\text{O}$ und ${}^{40}_{20}\text{Ca}$ treten bei Verwendung dieser Eigenfunktionen nur abgeschlossene Schalen auf, so daß die Rechnungen besonders einfach werden. Wir werden im folgenden (§ 5) nur auf diese Kerne eingehen.

¹ SCHIFF, L. J.: Phys. Rev. 84, I.

² MALENKA, B. I.: Phys. Rev. 86, 68.

Die Berechnung der Bindungsenergien erfolgt nach dem RITZschen Variationsverfahren. Aus dem HAMILTON-Operator des Gesamtsystems

$$H_G = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_1^A \Delta_i + H(r_1 \dots r_A) \quad (1)$$

[$H(r_1 \dots r_A)$ ist dabei die gesamte Wechselwirkungsenergie der Nukleonen, also COULOMB-Energien und Kernkraftenergie; M ist die Masse eines Nukleons] wird die Bindungsenergie nach der Formel

$$E = \text{Min} \langle \Phi^*, H_G \Phi \rangle \quad (2)$$

berechnet. Die Klammer $\langle \rangle$ bedeutet dabei die Integration über die Ortsvariablen sowie die Summation über Spin und Ladungsvariablen. Das Variationsproblem wird dabei in folgender Weise gelöst: Der in den Oszillatorwellenfunktionen auftretende unbestimmte Parameter α soll so festgelegt werden, daß $E(\alpha)$ ein Minimum wird. α hängt dabei mit der Frequenz ν und der Masse M des Oszillators durch $\alpha = \frac{M}{\hbar} \cdot 2\pi\nu$ zusammen. Es ist also das Problem $\frac{\partial}{\partial \alpha} E(\alpha) = 0$ zu lösen.

Für die Bindungsenergie der Kerne sind drei Anteile zu berechnen. Die kinetische Energie der Nukleonen, die COULOMB-Energie der Protonen und die potentielle Energie der Kernkräfte.

1. Die COULOMB-Energie der Protonen. Man hat hierzu den Erwartungswert der Wechselwirkungsenergie $e^2 \sum_{i < k} \frac{1}{|r_i - r_k|}$ zu berechnen. Dies ergibt

$$\begin{aligned} E_c &= \left\langle \Phi_P^*, e^2 \sum_{i < k} \frac{1}{|r_i - r_k|} \Phi_P \right\rangle \\ &= \frac{e^2}{2} \iint \frac{1}{|r - r'|} \left\{ \varrho_P(r) \varrho_P(r') - \frac{1}{2} [\varrho_P(r, r')]^2 \right\} dr dr'. \end{aligned}$$

Dabei ist $\varrho_P(r, r')$ die gemischte Dichte der Protonen. Sie entsteht aus den Einteilchenwellenfunktionen durch Summation über alle besetzten Zustände:

$$\varrho_P(r, r') = \sum_{\text{bes}} \psi_v^P(r) \psi_v^{*P}(r').$$

Die gewöhnliche Dichte ist dabei $\varrho_P(r) = \varrho_P(r, r)$.

2. Die kinetische Energie ist beim harmonischen Oszillator besonders einfach zu berechnen, da hier die mittlere kinetische Energie gleich der mittleren potentiellen Energie eines Teilchens ist. Die genaue Berechnung wird in §4 durchgeführt.

3. Die potentielle Energie der Kernkräfte. Um diesen Energieanteil zu bestimmen, gehen wir nicht von der Formel (2) aus, sondern von der

Differentialgleichung für die Potentialfunktion der Kernkräfte. Über die Potentialfunktion $\varphi(\mathbf{r})$ machen wir folgende Voraussetzungen: $\varphi(\mathbf{r})$ sei eine reelle skalare Funktion der Ortskoordinate allein, und gehorche der von SCHIFF¹ und THIRRING vorgeschlagenen Differentialgleichung

$$\Delta\varphi - \mu^2\varphi - \frac{\lambda g^4}{(\hbar c)^3} \varphi^3(\mathbf{r}) = -g\varrho(\mathbf{r}).$$

Die Kernkräfte, die zwischen den Nukleonen herrschen, sollen als ladungsunabhängig angesehen werden, so daß die Energie mit einer gemeinsamen Nukleonendichte $\varrho(\mathbf{r})$ berechnet werden kann. Ist $\varrho_P(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ die gemischte Protonendichte, $\varrho_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ die gemischte Neutronendichte, so ist

$$\varrho(\mathbf{r}) = \varrho_P(\mathbf{r}, \mathbf{r}) + \varrho_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}).$$

Die auftretenden Potentiale sollen näherungsweise statisch sein. Es wird also für die Kräfte von der Bewegung der Nukleonen abgesehen, so daß $\varphi(\mathbf{r})$ nicht von der Zeit abhängt.

Diejenigen Energieanteile, die durch den Einfluß der gemischten Dichten $\varrho_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ und $\varrho_P(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ entstehen, sollen hier vernachlässigt werden. Bei großen Kernen spielen diese Glieder keine große Rolle, bei leichten Kernen soll für diese Anteile in §5 eine einfache Abschätzung gemacht werden. Die zur Dichte $\varrho(\mathbf{r})$ gehörige Energie bestimmen wir auf folgende Weise: Die Differentialgleichung

$$\Delta\varphi - \mu^2\varphi - \frac{\lambda g^4}{(\hbar c)^3} \varphi^3 = -g\varrho(\mathbf{r})$$

läßt sich aus der LAGRANGE-Funktion

$$\mathfrak{L}(\mathbf{r}) = -\frac{(A\varphi)^2}{2} - \frac{\mu^2\varphi^2}{2} - \frac{\lambda g^4}{4(\hbar c)^3} \varphi^4 + g\varphi\varrho$$

herleiten. Für zeitlich konstante Lösungen ist hier die HAMILTON-Dichte

$$\mathfrak{H}(\mathbf{r}) = -\mathfrak{L}(\mathbf{r}).$$

Und daraus die potentielle Energie der Kernkräfte

$$E_{\text{pot}} = \int \left[\frac{(V\varphi)^2}{2} + \frac{\mu^2\varphi^2}{2} + \frac{\lambda g^4}{4(\hbar c)^3} \varphi^4 - g\varphi\varrho \right] d\mathbf{r}.$$

Zur Berechnung von E_{pot} soll stets von diesem Ausdruck ausgegangen werden. An Stelle der nichtlinearen Differentialgleichung soll hier stets von dem äquivalenten Variationsproblem $\frac{\delta}{\delta\varphi(\mathbf{r})} \mathfrak{H}(\mathbf{r}) = 0$ ausgegangen werden, das durch einen RITZschen Ansatz für $\varphi(\mathbf{r})$ gelöst werden soll. In $\varphi(\mathbf{r})$ treten dann noch einige unbestimmte Parameter auf, die so festgelegt werden sollen, daß E_{pot} ein Minimum wird.

¹ SCHIFF, L. J.: Phys. Rev. 84, I.

b) *Schwere Kerne.* Für schwere Kerne verwenden wir die THOMAS-FERMI-Methode. Um die Gesamtenergie in diesem Modell zu bestimmen, sind wieder die drei Anteile, kinetische Energie, COULOMB-Energie und Kernkraftenergie zu berechnen. Für die kinetische Energie eines Kernes mit der Protonendichte $\rho_P(r)$ und der Neutronendichte $\rho_N(r)$ erhält man

$$E_{\text{kin}} = \frac{\eta}{2} \int (\rho_P^{\frac{5}{3}} + \rho_N^{\frac{5}{3}}) d\tau + \chi \int \left[\frac{(\nabla \rho_P)^2}{\rho_P} + \frac{(\nabla \rho_N)^2}{\rho_N} \right] d\tau.$$

Bei gleicher Protonen- und Neutronendichte ($N=Z$ und $\rho/2 = \rho_P = \rho_N$) und Kugelsymmetrie dieser Dichten erhält man

$$E_{\text{kin}} = 4\pi\eta \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{5}{3}} \int_0^\infty \rho(r)^{\frac{5}{3}} r^2 dr + 4\pi\chi \int_0^\infty \frac{(\nabla \rho)^2}{\rho} r^2 dr$$

dabei ist

$$\chi = \frac{\hbar}{8M} \quad \eta = \frac{8\pi\hbar^2}{5M} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}},$$

wobei M die Masse eines Nukleons ist. Die COULOMB-Energie der Protonen mit der Dichte $\rho_P(r)$ bestimmen wir im folgenden stets mit der Formel

$$E_c = 8\pi^2 e^2 \int_0^\infty \rho_P(r) \psi(r) r^2 dr,$$

wobei die Potentialfunktion der Differentialgleichung

$$\Delta\psi(r) = +e\rho_P(r)$$

gehört. Es soll hier ebenso wie bei den Kernkräften der den gemischten Dichten entsprechende Energieausdruck weggelassen werden.

Die potentielle Energie bestimmen wir ebenso wie bei leichten Kernen aus der HAMILTON-Funktion

$$E_P = \int \left[\frac{(\nabla\varphi)^2}{2} + \frac{\mu^2 \varphi^2}{2} + \frac{\lambda}{4} \frac{g^4}{(\hbar c)^3} - g\varphi\rho \right] d\tau.$$

$\varphi(r)$ ist dabei wieder durch die obengenannte nichtlineare Differentialgleichung definiert. An Stelle dieser Differentialgleichung soll auch hier wieder das Variationsproblem $\frac{\delta \mathfrak{H}(r)}{\delta \varphi(r)} = 0$ mit einem geeigneten RITZschen Ansatz für $\varphi(r)$ gelöst werden. Die in diesem RITZschen Ansatz auftretenden Parameter $P_1 \dots P_k$ sollen wieder so bestimmt werden, daß $E_{\text{pot}}(P_1 \dots P_k)$ zum Minimum wird.

§ 3. Die nichtlineare Differentialgleichung.

Wir werden im folgenden stets eine kugelsymmetrische Dichteverteilung der Nukleonen annehmen. Damit ist $\varphi(r) = \varphi(r)$. Die nichtlineare Differentialgleichung für $\varphi(r)$ verwenden wir hier in der von

MALENKA angegebenen Form. Sie lautet dann:

$$\varphi''(r) + 2 \frac{\varphi'(r)}{r} - \mu^2 \varphi(r) - \frac{\lambda g^4}{(\hbar c)^3} \varphi^3 = -g \varrho(r)$$

und die HAMILTON-Funktion

$$H = 4\pi \int_0^\infty \left[\frac{\varphi'^2}{2} + \frac{\mu^2 \varphi^2}{2} + \frac{\lambda}{4} \frac{g^4}{(\hbar c)^3} \varphi^4 - g \varphi \varrho \right] r^2 dr. \quad (1)$$

Im Unterschied zu linearen Differentialgleichungen für $\varphi(r)$ existiert hier keine GREENSche Funktion $G(r, r')$, derart, daß $\varphi(r) = \int G(r, r') \varrho(r') dr'$ wobei $G(r, r')$ unabhängig von $\varrho(r)$ ist. Es ist daher auch die potentielle Energie der Nukleonen $E_{\text{pot}} = H$ nicht in der Form

$$E_{\text{pot}} = \sum_i \sum_k V(i, k)$$

darstellbar, wobei $V(i, k)$ die Wechselwirkungsenergie von jeweils zwei Nukleonen bedeutet. Die Energie setzt sich also nicht mehr additiv aus den 2-Körperenergien zusammen.

In den folgenden Rechnungen werden wir oft an Stelle von $\varphi(0) = \varphi_0$ die dimensionslose Variable $\zeta = \frac{g^2 \sqrt{\lambda}}{\mu (\hbar c)^{\frac{3}{2}}} \varphi_0$ verwenden. g und λ sind dabei die in der Differentialgleichung auftretenden Konstanten. Dabei ist $\mu^{-1} = 1,4 \cdot 10^{-13}$ cm. Die anderen beiden Größen werden später aus den experimentellen Daten bestimmt. Die Maßeinheiten wollen wir von jetzt ab so festlegen, daß $\hbar = c = \mu = 1$ ist. Die Einheit der Energie ist damit 140,4 MeV. Die endgültigen Ergebnisse für die Energiewerte werden wir jedoch stets in MeV angeben.

Um eine qualitative Übersicht über die potentielle Energie zu bekommen, nehmen wir für die Dichtefunktion zunächst Rechtecksform an, also

$$\varrho(r) = \begin{cases} \varrho_0 & r \leq R \\ 0 & r > R, \end{cases}$$

wobei ϱ_0 noch der Normierungsbedingung

$$\frac{4\pi R^3}{3} \varrho_0 = A$$

gehört. A ist dabei die Gesamtnukleonenzahl. Für große A folgt dann angenähert aus der Differentialgleichung, wenn man dort $\varphi'(0)$ und $\varphi''(0)$ gegenüber $\varphi(0)$ vernachlässigt:

$$\varphi_0 + \lambda g^4 \varphi_0^3 = g \varrho_0.$$

Diese Beziehung wird für große Kerne oft verwandt werden (§4).

Im Sinne der THOMAS-FERMI-Methode muß nun die Dichte dadurch festgelegt werden, daß die gesamte Bindungsenergie, also die Summe aus potentieller Energie der Kernkräfte, kinetischer Energie der Nukleonen und COULOMB-Energie der Protonen als Funktion der Dichte ein Minimum wird. Wegen des ungenauen Ansatzes für $\rho(r)$ können wir hier nur die volumenproportionale Energie diskutieren. Mit

$$\rho_0 = \frac{1}{g^3 \sqrt{\lambda}} (\zeta + \zeta^3)$$

und (1) erhält man für die Volumenenergie der Kernkräfte

$$\frac{H_v}{A} = - \frac{(2\zeta + 3\zeta^3)}{4g \sqrt{\lambda}} (1 + \zeta^2).$$

Um die gesamte Volumenenergie zu erhalten, muß noch der volumenproportionale Anteil der kinetischen Energie hinzukommen. Eliminiert man wieder ρ_0 durch ζ , so ist

$$\frac{E_v}{A} = - \frac{1}{4g \sqrt{\lambda}} \frac{2\zeta + 3\zeta^3}{1 + \zeta^2} + \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{5}{3}} \frac{\eta}{g^2 \lambda^{\frac{1}{3}}} (\zeta + \zeta^3)^{\frac{5}{3}}. \quad (2)$$

Im THOMAS-FERMI-Modell muß nun das Minimum dieses Ausdruckes (2) in bezug auf ρ_0 oder was dasselbe ist, in bezug auf ζ gesucht werden. Im Gegensatz zu dem mit einer beliebigen Zweikörperkraft berechneten Ausdruck der Energie hat E_v/A ein Minimum in bezug auf ζ . Diese Eigenschaft ist entscheidend für die Absättigung. Bei Verwendung einer linearen Differentialgleichung für die Potentialfunktion, erhält man wegen der Existenz einer GREENSchen Funktion für die Volumenenergie stets einen Ausdruck der Form

$$\frac{E_v}{A} = - \text{const } \rho_0 + \eta \rho_0^{\frac{5}{3}}$$

der offensichtlich nur ein Maximum hat, niemals aber, wie es physikalisch gefordert werden muß, ein Minimum.

Die beiden in der Differentialgleichung auftretenden Konstanten g und λ sollen durch die Erfahrungswerte festgelegt werden. MALENKA¹ hatte in einer einfachen Abschätzung $g = 6,32$ $\lambda = 13,6$ erhalten. Wir werden im folgenden eine etwas genauere Bestimmung dieser Größen angeben, wobei aber auch die COULOMB-Energie der Protonen sowie die Oberflächenenergie noch weggelassen werden soll. Eine endgültige Bestimmung dieser Größen wird dann in §4 durchgeführt werden.

Es wird sich zeigen, daß $\zeta \gg 1$. Dann erhält man in erster Näherung für die Volumenenergie:

$$\frac{E_v}{A} = - \frac{3\zeta}{4g \sqrt{\lambda}} + \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{5}{3}} \frac{\eta}{g^2 \lambda^{\frac{1}{3}}} (\zeta^2 + 0,66).$$

¹ MALENKA, B. I.: Phys. Rev. 86, 68.

Das Minimum dieses Ausdruckes ist

$$\frac{E_v^{\min}}{A} = -\frac{9}{64} \frac{2^{\frac{3}{2}}}{\eta \lambda^{\frac{3}{2}}} + 0,66 \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\eta}{g^2 \lambda^{\frac{3}{2}}}$$

und wird bei

$$\zeta_{\min} = \frac{3 \cdot 2^{\frac{3}{2}}}{4} \frac{g}{\eta \lambda^{\frac{3}{2}}}$$

angenommen. Dem entspricht eine Dichte von

$$\rho_0^{\min} = \frac{3 \cdot 2^{\frac{3}{2}}}{4} \frac{1}{g^2 \lambda^{\frac{3}{2}} \eta} + \frac{3^3}{4^2} \frac{1}{\lambda \eta^{\frac{3}{2}}}.$$

Wir wollen nun fordern, daß E_v^{\min}/A mit dem Volumenanteil der Energie in der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel übereinstimmt, und ρ_0^{\min} mit dem

experimentell bekannten Wert der Kerndichte, wenn man für den Radius $R(A) = R_0 A^{\frac{1}{3}}$ ($R_0 = 1,4 \cdot 10^{-13}$ cm) setzt. Durch diese beiden Bedingungen sind die Zahlenwerte von g und λ eindeutig festgelegt. Für jeden Wert E_v/A erhält man eine Kurve $g = g_{E_v}(\lambda)$ mit E_v als Kurvenparameter, für jedes ρ_0 ebenfalls eine Kurve mit dem Kurvenparameter ρ_0 . Das gesuchte Wertepaar ist durch den Schnittpunkt zweier solcher Kurven gegeben. In Fig. 1 sind für drei verschiedene Werte E_v sowie für drei Werte die entsprechenden Kurven in der g - λ -Ebene dargestellt. E_2 und ρ_2 entsprechen dabei den wirklichen Werten. Der Schnittpunkt liegt bei:

$$g = 8,48 \quad \lambda = 11,12.$$

Diese Werte können jedoch nicht als endgültig betrachtet werden. Oberflächen und COULOMB-Energie sind beide im Variationsproblem nicht berücksichtigt worden, wodurch quantitativ die Ergebnisse sehr verfälscht werden. Durch die abstoßende Wirkung der COULOMB-Energie sowie der Oberflächenenergie würde bewirkt, daß das Minimum der Energie bei sehr viel kleineren Werten der Dichte eintritt. Dadurch wiederum würden die Konstanten g und λ wesentlich anders ausfallen. Eine genaue Diskussion dieser Zusammenhänge wird in §4 durchgeführt werden.

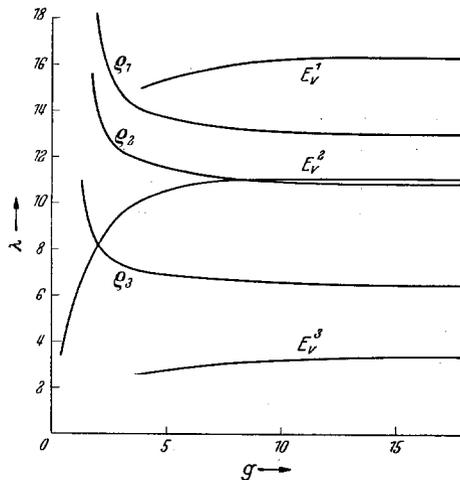


Fig. 1. Verlauf der Funktionen

$$g = g_{\rho_0}(\lambda) \quad g = g_{E_v}(\lambda)$$

für verschiedene Werte der Parameter ρ_0 und E_v .

§ 4. Die Bindungsenergien der schweren Kerne.

Im folgenden Abschnitt sollen die Bindungsenergien der schweren Kerne nach der in § 2 dargestellten THOMAS-FERMI-Methode bestimmt werden, wobei aber im Gegensatz zu § 3 sowohl die Oberflächenenergie als auch die COULOMB-Energie voll berücksichtigt werden soll. Die Bindungsenergie $E(A)$ wird dabei folgendermaßen berechnet: Die kinetische Energie der Nukleonen ist nach § 2

$$E_{\text{kin}} = \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{3}{2}} \eta \int \varrho(\mathbf{r})^{\frac{3}{2}} d\mathbf{r} + \chi \int \frac{(V\varrho)^2}{\varrho} d\mathbf{r} = \int T(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

wobei $\varrho(\mathbf{r})$ die Nukleonendichte bedeutet. Dazu kommt noch die COULOMB-Energie $E_c(\varrho_P(\mathbf{r}))$ der Protonen und die potentielle Energie $E_{\text{pot}}(\varrho(\mathbf{r}), \varphi(\mathbf{r}))$ der Kernkräfte. Das allgemeine Variationsproblem

$$\frac{\delta}{\delta \varrho} E(\varrho) = \frac{\delta}{\delta \varrho} [E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} + E_c] = 0$$

werden wir angenähert dadurch lösen, daß wir für $\varrho(\mathbf{r})$ einen geeigneten RITZschen Ansatz machen, wobei $\varrho(\mathbf{r})$ noch von drei weiteren Parametern ϱ_0, α und n abhängt, die so eingerichtet werden sollen, daß $E(\varrho_0, \alpha, n)$ zum Minimum wird. Es wird also das Extremalproblem

$$\frac{\partial E}{\partial \varrho_0} = \frac{\partial E}{\partial \alpha} = \frac{\partial E}{\partial n} = 0$$

gelöst werden. Die Dichte gehorcht dabei noch der Normierungsbedingung

$$\int \varrho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = A.$$

Die potentielle Energie der Kernkräfte bestimmen wir aus der HAMILTON-Funktion

$$H = \int \mathfrak{H}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \left[\frac{(V\varphi)^2}{2} + \frac{\varphi^2}{2} + \frac{\lambda g^4}{4} \varphi^4 - g\varphi\varrho \right] d\mathbf{r},$$

wobei $\varphi(\mathbf{r})$ der Differentialgleichung $\Delta\varphi(\mathbf{r}) - \varphi(\mathbf{r}) - \lambda g^4 \varphi^3(\mathbf{r}) = -g\varrho(\mathbf{r})$ gehorcht. An Stelle der Differentialgleichung lösen wir das äquivalente Variationsproblem $\frac{\delta}{\delta \varphi} \mathfrak{H}(\mathbf{r}) = 0$ indem wir für $\varphi(\mathbf{r})$ einen RITZschen Ansatz machen, der noch drei freie Parameter φ_0, α, n enthält, so daß die gesuchte Energie E_{pot} durch das Minimum von $H(\varphi_0, \alpha, n)$, also durch

$$\frac{\partial H}{\partial \varphi_0} = \frac{\partial H}{\partial \alpha} = \frac{\partial H}{\partial n} = 0$$

gegeben ist. Da E_{kin} und E_c die Größe φ_0 nicht enthalten, so lassen sich die beiden Variationsprobleme gemeinsam behandeln, indem

$$E = E(\varphi_0, \varrho_0, \alpha, n) = E_{\text{pot}}(\varphi_0, \alpha, \varrho_0, n) + E_{\text{kin}}(\varrho_0, \alpha, n) + E_c(\varrho_0, \alpha, n)$$

in Abhängigkeit von $\varphi_0, \varrho_0, \alpha, n$ zum Minimum gemacht wird. Als Ansätze für $\varphi(r)$ und $\varrho(r)$ wählen wir

$$\varrho(r) = \varrho_0 e^{-\alpha r^n} \quad \varphi(r) = \varphi_0 e^{-\alpha r^n}. \tag{1}$$

Dabei ist Kugelsymmetrie des Kernes angenommen. Dabei sind $\varrho(r)$ und $\varphi(r)$ einander überall proportional angenommen, was in einer gewissen Näherung für große Kerne immer der Fall sein wird. Für den Parameter n ist nur der Bereich $1 < n < \infty$ brauchbar. Für $n = 2$ erhält man eine GAUSS-Kurve, für $n \rightarrow \infty$ nimmt die Kurve Rechteckgestalt an, so daß diese Funktionen besonders geeignet erscheinen sowohl schwere als auch leichte Kerne damit zu beschreiben (Fig. 2).

Das Problem $E(\varrho_0, \varphi_0, \alpha, n)$ in Abhängigkeit von $\varrho_0, \varphi_0, \alpha$ und n zum Minimum zu machen, vereinfachen wir noch durch Elimination von zwei Variablen. Wegen der Normierungsbedingung der Dichte

$$4\pi \int_0^\infty \varrho_0 e^{-\alpha r^n} r^2 dr = \frac{4\pi \varrho_0}{n} a^{-\frac{3}{n}} \Gamma\left(\frac{3}{n}\right) = A \tag{2}$$

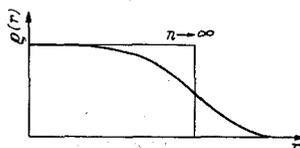


Fig. 2. Qualitativer Verlauf der Ansätze für die Dichtefunktion.

kann α aus dem Energieausdruck eliminiert werden.

Ist weiterhin bei schweren Kernen Dichte und Potentialverteilung im Mittelpunkt des Kernes ($r = 0$) genügend flach, so kann man $\varphi'(0)$ und $\varphi''(0)$ gegenüber $\varphi(0)$ vernachlässigen. Es gilt dann wegen der Differentialgleichung in $r = 0$

$$\varphi_0 + \lambda g^4 \varphi_0^3 = g \varrho_0. \tag{3}$$

Eine numerische Abschätzung zeigt, daß für hinreichend großes n diese Beziehung keinen großen Fehler bringt. Für n werden sich aber bei schweren Kernen Werte $n \approx 10$ ergeben, so daß diese Näherung begründet ist. Bei leichten Kernen wird (§ 5) von dieser Näherung kein Gebrauch gemacht werden.

Bei der Berechnung der Bindungsenergie muß noch die elektrostatische Energie der Protonen bestimmt werden. Nimmt man

$$\varrho_P = \varrho_0 \frac{Z}{A} e^{-\alpha r^n} = \frac{\varrho_0}{2} e^{-\alpha r^n}$$

als Protonendichte an, so ist die Energie E_c für große n in erster Näherung

$$E_c = \frac{3}{20} \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{3}} A^{\frac{1}{3}} \varrho_0^{\frac{1}{3}} e^2.$$

Führt man statt φ_0 noch die dimensionslose Variable $\zeta = g^2 \sqrt{\lambda} \varphi_0$ ein, so ergibt sich mit den Ansätzen (1) und der Relation (3) für $E(n, \zeta, \alpha)$

der Ausdruck.

$$\begin{aligned}
 E(n, \zeta, \alpha) = & \frac{1}{g^4 \lambda} \left\{ \frac{\zeta^2 \pi n}{2} (2\alpha)^{-\frac{1}{n}} \Gamma\left(2 + \frac{1}{n}\right) + \frac{2\pi \zeta^2}{n} (2\alpha)^{-\frac{3}{n}} \Gamma\left(\frac{3}{n}\right) + \right. \\
 & + \frac{\pi \zeta^4}{n} (4\alpha)^{-\frac{3}{n}} \Gamma\left(\frac{3}{n}\right) - \frac{4\pi \zeta}{n} (2\alpha)^{-\frac{3}{n}} (\zeta + \zeta^3) \Gamma\left(\frac{3}{n}\right) \left. \right\} + \\
 & + \frac{4\pi \eta}{n} \left(\frac{5\alpha}{3}\right)^{-\frac{3}{n}} \Gamma\left(\frac{3}{n}\right) \frac{(\zeta + \zeta^3)^{\frac{3}{2}}}{g^5 \lambda^{\frac{10}{3}}} + 4\pi \chi \alpha^{-\frac{1}{n}} \frac{(n+1)}{n} \Gamma\left(\frac{1}{n}\right) \frac{(\zeta + \zeta^3)}{g^3 \sqrt{\lambda}} + \\
 & + \frac{3}{20} \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}} A^{\frac{3}{2}} e^2 \frac{(\zeta + \zeta^3)^{\frac{1}{2}}}{g \lambda^{\frac{1}{2}}}.
 \end{aligned}$$

Dabei ist entsprechend (3)

$$\varrho_0 = \frac{1}{g^3 \sqrt{\lambda}} (\zeta + \zeta^3)$$

gesetzt worden. Die ersten vier Glieder in $E(n, \zeta, \alpha)$ rühren von der potentiellen Energie der Kernkräfte E_{pot} her, das 5. und 6. Glied von der kinetischen Energie der Nukleonen, das 7. von der COULOMB-Energie der Protonen. Um nun mit Hilfe von (2) α aus der Energie E zu eliminieren, und um eine einfachere Abhängigkeit von n zu erhalten, machen wir einige Näherungen. Wir setzen dabei voraus, daß n groß gegen 1 sei. Dann ist

$$n \Gamma\left(2 + \frac{1}{n}\right) \approx n + 0,43$$

die Normierungsbedingung lautet dann

$$\frac{4\pi \alpha^{-\frac{3}{n}}}{3} \varrho_0 \left(1 - \frac{1,71}{n}\right) = A$$

und

$$x^{-\frac{3}{n}} \approx \left(1 - \frac{3 \ln x}{n}\right) \quad x^{-\frac{1}{n}} \approx \left(1 - \frac{\ln x}{n}\right).$$

Mit Hilfe dieser Näherungen ergibt sich für $E(n, \zeta)$, wobei jetzt α durch (2) eliminiert ist

$$\begin{aligned}
 E(n, \zeta) = & - \frac{(\frac{1}{2})^{\frac{3}{2}} \eta}{g^2 \lambda^{\frac{3}{2}}} \left\{ \frac{(2\zeta + 3\zeta^3)}{(1 + \zeta^2) 4\pi \eta (\frac{1}{2})^{\frac{3}{2}} \lambda^{\frac{3}{2}}} - (\zeta + \zeta^3)^{\frac{3}{2}} \right\} A + \\
 & + n A^{\frac{1}{2}} \left\{ \frac{\pi}{2} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\zeta^2}{g^3 \lambda^{\frac{3}{2}} (\zeta + \zeta^3)^{\frac{3}{2}}} + 4\pi \chi \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{(\zeta + \zeta^3)^{\frac{3}{2}}}{g^2 \lambda^{\frac{3}{2}}} \right\} + \\
 & + \frac{A}{n} \left\{ \frac{3 \ln 2\zeta}{g \sqrt{\lambda}} - \frac{3 \ln 2\zeta}{2g \sqrt{\lambda} (1 + \zeta^2)} - \frac{3 \ln 4\zeta^3}{4g \sqrt{\lambda} (1 + \zeta^2)} - \frac{3 \ln (\frac{1}{2})^{\frac{3}{2}} \eta (\zeta + \zeta^3)^{\frac{3}{2}}}{g^2 \lambda^{\frac{3}{2}}} \right\} - \\
 & - \frac{\pi}{2} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\ln 2\zeta^2}{g^3 \lambda^{\frac{3}{2}} (\zeta + \zeta^3)^{\frac{3}{2}}} A^{\frac{1}{2}} + \frac{3}{20} \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}} A^{\frac{3}{2}} \frac{e^2}{g \lambda^{\frac{1}{2}}} (\zeta + \zeta^3)^{\frac{1}{2}}.
 \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck muß nun in bezug auf n und zum Minimum gemacht werden. Aus der Variation nach n erhält man mit

$$\frac{\partial E(n, \zeta)}{\partial n} = 0$$

für $n(\text{min})$

$$n = A^{\frac{1}{3}} \frac{\left\{ \frac{3 \ln 2\zeta}{g\sqrt{\lambda}} - \frac{3 \ln 2\zeta}{2g\sqrt{\lambda}(1+\zeta^2)} - \frac{3 \ln 4}{4g\sqrt{\lambda}} \frac{\zeta^3}{(1+\zeta^2)} - \frac{3 \ln^{\frac{5}{2}}(\frac{1}{2})^{\frac{5}{2}} \eta (\zeta + \zeta^3)^{\frac{5}{2}}}{g^2 \lambda^{\frac{3}{2}}} \right\}^{\frac{1}{2}}}{\left\{ \left(\frac{\pi}{2}\right) \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\zeta^2}{g^3 \lambda^{\frac{3}{2}} (\zeta + \zeta^3)^{\frac{3}{2}}} + 4\pi \chi \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{(\zeta + \zeta^3)^{\frac{3}{2}}}{g^2 \lambda^{\frac{3}{2}}} \right\}^{\frac{1}{2}}}$$

geometrisch hängt n mit der Neigung der Dichteverteilung im Wendepunkt zusammen. Nach der angegebenen Formel nimmt n mit $A^{\frac{1}{3}}$ zu. Die Dichteverteilung nähert sich also mit wachsendem A der Rechtecksgestalt, wie es physikalisch auch zu erwarten ist. Setzt man $n = n_{\text{min}}$ in $E(n, \zeta)$ ein, so hängt E nur noch von ζ ab. Man erhält:

$$E(\zeta) = - \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{\eta}{g^2 \lambda^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{g(2\zeta + 3\zeta^3)}{4\pi \eta (\frac{1}{2})^{\frac{5}{2}} \lambda^{\frac{3}{2}} (1 + \zeta^2)} - (\zeta + \zeta^3)^{\frac{5}{2}} \right] A - \\ - \frac{\pi}{2} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\ln 2\zeta^2}{g^3 \lambda^{\frac{3}{2}} (\zeta + \zeta^3)^{\frac{3}{2}}} A^{\frac{1}{3}} + \left(\frac{3}{20}\right) \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{e^2}{g \lambda^{\frac{3}{2}}} (\zeta + \zeta^3)^{\frac{1}{2}} A^{\frac{2}{3}} + \\ + 2 \left[\frac{3 \ln 2\zeta}{g\sqrt{\lambda}} - \frac{3 \ln 2\zeta}{2g\sqrt{\lambda}(1+\zeta^2)} - \frac{3 \ln 4\zeta^3}{4g\sqrt{\lambda}(1+\zeta^2)} - \frac{3 \ln^{\frac{5}{2}}(\frac{1}{2})^{\frac{5}{2}} \eta (\zeta + \zeta^3)^{\frac{5}{2}}}{g^2 \lambda^{\frac{3}{2}}} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ \times \left[\left(\frac{\pi}{2}\right) \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{g^3 \lambda^{\frac{3}{2}} (\zeta + \zeta^3)^{\frac{3}{2}}} \frac{\zeta^2}{(\zeta + \zeta^3)^{\frac{3}{2}}} + 4\pi \chi \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{(\zeta + \zeta^3)^{\frac{3}{2}}}{g^2 \lambda^{\frac{3}{2}}} \right]^{\frac{1}{2}} A^{\frac{2}{3}}.$$

Das zu $A^{\frac{1}{3}}$ proportionale Glied lassen wir als eine Korrektur höherer Ordnung weg, dann hat die Energie die Form

$$E = -\alpha A + \beta A^{\frac{2}{3}} + \gamma A^{\frac{1}{3}}$$

wie es asymptotisch für große A sein muß. Das Minimum bezüglich der Variablen ζ ist numerisch bestimmt worden. Vor der endgültigen Berechnung der Bindungsenergien müssen jedoch noch die Konstanten g und λ festgelegt werden. Die Konstanten sollen dabei so eingerichtet werden, daß die berechneten Energiewerte möglichst gut mit den experimentell bekannten Anteilen der Energie in der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel übereinstimmen. Es ist daher für verschiedene g - λ -Werte beim Atomgewicht $A = 216$ das Minimum der Energie $E(\zeta)$ numerisch berechnet worden. Dabei konnten die auftretenden Energieanteile der Volumenenergie E_v , der Oberflächenenergie E_0 , der COULOMB-Energie E_c und der Gesamtenergie E unmittelbar mit den entsprechenden Gliedern der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel verglichen werden. In der g - λ -Ebene sind in Fig. 3 die drei Funktionen

$$g = g_E(\lambda) \quad g = g_{E_0}(\lambda) \quad g = g_{E_c}(\lambda)$$

graphisch dargestellt.

Dabei bedeutet z.B. $g = g_{E_v}(\lambda)$ die Gesamtheit aller Wertepaare g und λ , für die das berechnete Minimum von $E(\zeta)$ denselben Wert für die Volumenenergie liefert, den man auch für $A = 216$ aus der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel erhält. Auf die vierte mögliche Funktion $g = g_{E_0}(\lambda)$ ist verzichtet worden, weil die entsprechende Kurve außerhalb des berechneten Bereiches fallen würde. Qualitativ ist jedoch auch diese Kurve

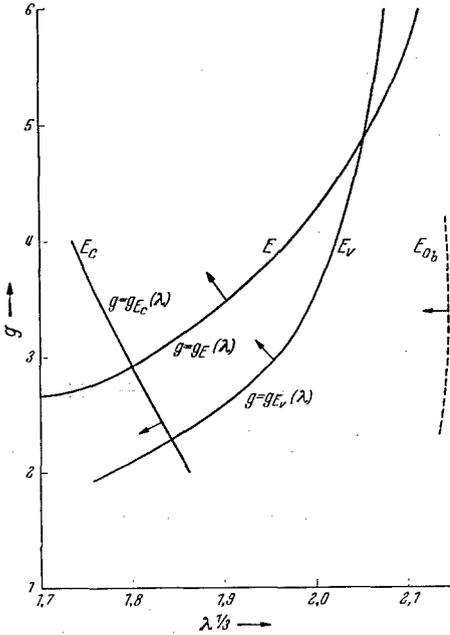


Fig. 3. Verlauf der Funktionen $g = g_E(\lambda)$, $g = g_{E_0}(\lambda)$, $g = g_{E_v}(\lambda)$.

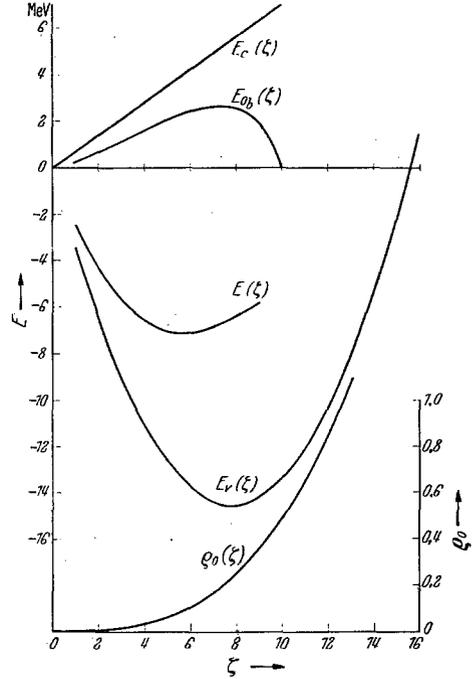


Fig. 4. Darstellung der Bindungsenergie E , der einzelnen Energieanteile E_C , E_{0b} und E_v sowie der Dichte ρ_0 in Abhängigkeit von ζ .

angegeben. Eine Kurve, die der Dichte im Mittelpunkt entspricht, ist überflüssig, da die COULOMB-Energie gerade immer dann den richtigen Wert annimmt, wenn auch die Dichte den richtigen Wert annimmt, und umgekehrt. Die Fig. 3 zeigt, daß es unmöglich ist, g und λ so zu bestimmen, daß mehr als zwei Energieanteile gleichzeitig mit den entsprechenden Gliedern der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel übereinstimmen. Wir wählen für die folgende Rechnung den Schnittpunkt der Kurven $g = g_{E_C}(\lambda)$ und $g = g_E(\lambda)$, bei dem also Gesamtenergie, COULOMB-Energie und damit auch die Dichte mit dem Wert der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel übereinstimmen. Dieser Punkt ist dadurch vor den anderen Schnittpunkten (g_{E_v} mit g_{E_C} und g_{E_v} mit g_E) ausgezeichnet, daß Dichte und Gesamtenergie unmittelbar durch das Experiment gegeben sind,

während die Aufspaltung der Energie in die andern Anteile nicht genau bekannt ist. Der genannte Schnittpunkt liegt bei

$$g = 2,908 \quad \lambda = 5,832$$

Oberflächen- und Volumenenergie sind beide in diesem Punkt (absolut) größer als es die WEIZSÄCKER-BETHE-Formel verlangt. Die Pfeile an den verschiedenen Kurven in Fig. 3 geben an in welcher Richtung für die betreffende Kurvenschar der entsprechende Kurvenparameter (hier der Energiewert) zunimmt.

Die hier berechneten Werte ($g = 2,908, \lambda = 5,832$) weichen stark von den in §3 bestimmten Werten ($g = 8,48; \lambda = 11,12$) ab. Dies rührt wesentlich her von dem jetzt mitberücksichtigten Einfluß von Oberflächen- und COULOMB-Energie. Das Minimum der Energie wird nämlich durch Berücksichtigung von E_c und E_0 zu kleineren Werten von ζ und damit zu kleineren Werten von ϱ_0 verschoben.

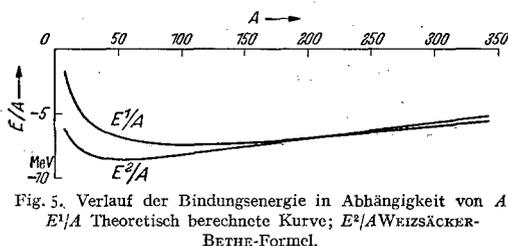


Fig. 5. Verlauf der Bindungsenergie in Abhängigkeit von A . E^1/A Theoretisch berechnete Kurve; E^2/A WEIZSÄCKER-BETHE-Formel.

In Fig. 4 sind für $g = 8,48, \lambda = 11,12$ die verschiedenen Energieanteile bei $A = 216$ in Abhängigkeit von ζ dargestellt. In demselben Diagramm ist auch die Dichte $\varrho_0(\zeta)$ aufgetragen. Mit dem Wertepaar $g = 2,908, \lambda = 5,832$ sind nun für verschiedene Atomgewichte A die Bindungsenergien berechnet worden. Diese Werte, sowie die Aufteilung in die einzelnen Energieanteile ist in Tabelle 1 angegeben. Um nun einen direkten Vergleich mit der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel zu erreichen, ist die in Tabelle 1 angegebene Funktion $E(A)/A$ in Fig. 5 graphisch dargestellt, wobei zum Vergleich die entsprechenden Werte der WEIZSÄCKER-BETHE-Kurve mit eingezeichnet sind, die der Funktion

$$\frac{E}{A}(A) = -14,638 + 15,345 A^{-\frac{1}{2}} + 0,150195 A^{\frac{2}{3}} \text{ [MeV]}$$

entsprechen.

Tabelle 1.

A	$-E_v/A$	$-E_c/A$	$-E_0/A$	$-E/A$
8	13,01	0,434	10,68	1,888
16	15,18	0,797	10,29	4,095
27	16,9	1,29	10,11	5,5
40	16,9	1,684	8,872	6,351
64	17,38	2,401	7,9	7,038
125	17,38	3,751	6,352	7,276
216	17,38	5,402	5,293	6,684
343	16,90	7,057	4,336	5,514

Der Vergleich zwischen beiden Kurven zeigt, daß die berechnete Bindungsenergie für große A gut mit den Werten der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel übereinstimmt, daß aber die Abweichungen der beiden Kurven voneinander um so größer werden, je kleiner A wird. Diese Tatsache, daß nämlich die berechneten Bindungsenergien stets kleiner sind als die experimentellen, wird vermutlich an der grundsätzlichen Ungenauigkeit der THOMAS-FERMI-Methode bei kleinen Teilchenzahlen sowie an den hier gemachten Näherungen liegen, da die berechneten Näherungswerte von E immer oberhalb des wirklichen Minimums liegen müssen. Außerdem trägt der Verlauf

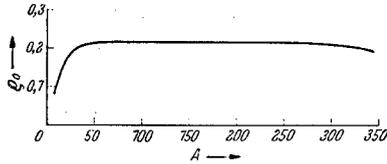


Fig. 6. Verlauf der Funktion $\rho_0(A)$.

der Dichtefunktion $\rho_0 = \rho_0(A)$ zu diesem Verhalten bei. In Fig. 6 ist ρ_0 in Abhängigkeit von A dargestellt, wie es sich aus dem Variationsverfahren berechnet. Es zeigt sich, was gut mit der Erfahrung übereinstimmt, daß $\rho_0(A)$ für fast alle Kerne den gleichen Wert hat. Erst

bei sehr großen A verringert E_c die Dichte, während bei sehr kleinem A E_0 den Wert von ρ_0 verringert. Die starke Abnahme von ρ_0 nach kleinen A -Werten zu bewirkt auch eine Abnahme der Volumenenergie E_v , woraus wiederum das Verhalten von $E(A)/A$ bei kleinen A -Werten verstanden werden kann (Fig. 5).

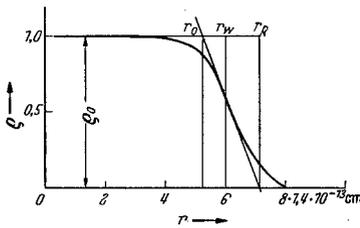


Fig. 7. Verlauf der Funktion $\rho = \rho(r)$.

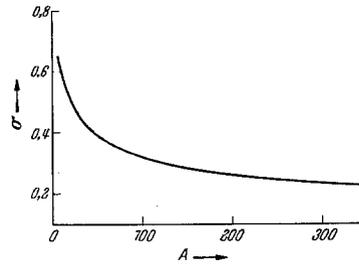


Fig. 8. Verlauf der Funktion $\sigma = \sigma(A)$.

Es soll nun noch die Gestalt der Dichtefunktion $\rho(r)$ näher diskutiert werden. Die in der Form $\rho(r) = \rho_0 e^{-\alpha r^n}$ auftretenden Parameter n , ρ_0 und α sind von A abhängig. Der Parameter n , der geometrisch die Neigung im Wendepunkt darstellt, nimmt mit wachsendem Atomgewicht ständig zu, so daß sich $\rho(r)$ für schwere Kerne der Rechtecksgestalt nähert (Tabelle 2). Durch die relativ großen Werte von n bei schweren Kernen, ist auch die oben gemachte Annahme $n \gg 1$ näherungsweise gerechtfertigt. Um einen Vergleich mit früheren Arbeiten (v. WEIZSÄCKER) zu ermöglichen, soll noch die Breite der Oberflächenschicht im Verhältnis zum ganzen Kern bestimmt werden. [Fig. 7 zeigt die

Dichte $\varrho(r)$.] Die Tangente im Wendepunkt r_w schneidet die Geraden $\varrho = \varrho_0$ und $\varrho = 0$ in r_0 und r_R . Wir wollen $r_R - r_0$ als Breite der Oberfläche definieren, und

$$\sigma = \frac{r_R - r_0}{r_R}$$

als das Verhältnis der Oberflächenbreite zum gesamten Kernradius r_R .

Aus $\varrho(r) = \varrho_0 e^{-\alpha r^n}$ folgt $\sigma = \sigma(n) = \frac{e}{n} \frac{n-1}{n}$. Für einige A -Werte ist $\sigma(n)$ in Tabelle 2 angegeben, für $A \rightarrow \infty$ geht $\sigma(n) \rightarrow 0$. Im Bereich der experimentell vorkommenden Kerne ist also im Durchschnitt etwa $\frac{1}{3}$ des Kernradius zur Oberflächenschicht gehörig. Früher hatte v. WEIZSÄCKER mit einem anderen RITZschen Ansatz für die Dichte ein der Größe σ entsprechendes Verhältnis für Pb(203) berechnet und 0,214 erhalten. Dieser Kern ist hier nicht berechnet worden, jedoch ergibt die graphische Interpolation (Fig. 8) etwa den Wert 0,265. Qualitativ stimmt also dieses Ergebnis mit dem von v. WEIZSÄCKER gefundenen gut überein.

Tabelle 2.

A	$\varrho_0(A)$	$n(A)$	$\sigma(A)$
8	0,0822	3,142	0,628
27	0,1915	4,713	0,4646
64	0,2166	6,284	0,3686
125	0,2166	7,855	0,30387
216	0,2166	9,426	0,25834
343	0,1915	10,997	0,2259

$\varrho_0(A)$ ist in μ^3 angegeben. $\mu^{-1} = 1,4 \cdot 10^{-13}$ cm.

§5. Die Bindungsenergien der leichten Kerne.

Mit Hilfe der in §2 beschriebenen Methode zur Energiebestimmung bei leichten Kernen, sollen die Bindungsenergien für ${}^4_2\text{He}$, ${}^{16}_8\text{O}$ und ${}^{40}_{20}\text{Ca}$ berechnet werden. Nimmt man für die Einteilchenwellenfunktionen die Funktionen des harmonischen Oszillators, so treten bei diesen drei Kernen nur abgeschlossene Schalen auf. Die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators lauten

$$\psi_n(x, y, z) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\alpha}{2} r^2} \frac{H_{n_x}(\sqrt{2\alpha} x) H_{n_y}(\sqrt{2\alpha} y) H_{n_z}(\sqrt{2\alpha} z)}{\sqrt{n_x! n_y! n_z!}}$$

wobei $n = n_x + n_y + n_z$, so daß für jedes n $f(n) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$ Zustände existieren. Der Parameter α ist zunächst unbestimmt und soll später so festgelegt werden, daß die Gesamtenergie der Kerne ein Minimum wird. α hängt mit der Masse M und der Frequenz ν des Oszillators durch

$\alpha = \frac{M}{\hbar} 2\pi \nu$ zusammen. $H_n(x)$ sind die HERMITESCHEN Polynome. Die hier gebrauchten lauten

$$H_0(x) = 1 \quad H_1(x) = x \quad H_2(x) = x^2 - 1.$$

Wegen der 4fachen Besetzung aller Zustände mit Protonen und Neutronen von verschiedenem Spin ergibt sich folgendes Schema: [$z(n)$ ist dabei die Anzahl der Zustände.]

$$\begin{array}{llll} n = 0 & f(n) = 1 & z(n) = 4 & \sum z(n) = 4 \\ n = 1 & f(n) = 3 & z(n) = 12 & \sum z(n) = 16 \\ n = 2 & f(n) = 6 & z(n) = 24 & \sum z(n) = 40. \end{array}$$

Durch Summation über alle besetzten Zustände entsteht die gemischte Dichte

$$\varrho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_v \psi_v(\mathbf{r}) \psi_v(\mathbf{r}')$$

und daraus mit $\varrho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = \varrho(\mathbf{r})$ die gewöhnliche Dichte. Es soll hier stets die Gesamtnukleonendichte betrachtet werden. Führt man die Neutronendichte $\varrho_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ und die Protonendichte $\varrho_P(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ein, so ist hier wegen $N = Z$

$$\varrho_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \varrho_P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{2} \varrho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad \varrho_N(\mathbf{r}) = \varrho_P(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \varrho(\mathbf{r}).$$

Für die hier betrachteten drei Kerne ist:

$$\begin{array}{ll} n = 0 & \varrho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 4 \left(\frac{\alpha_0}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\alpha_0}{2}(r_1^2 + r_2^2)} \\ n = 1 & \varrho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 4 \left(\frac{\alpha_1}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\alpha_1}{2}(r_1^2 + r_2^2)} \{1 + 2\alpha_1(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2)\} \\ n = 2 & \varrho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 4 \left(\frac{\alpha_2}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\alpha_2}{2}(r_1^2 + r_2^2)} \left\{ \frac{5}{2} - \alpha_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + 2\alpha_2^2(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2)^2 \right\}. \end{array}$$

Zur Berechnung der Bindungsenergien müssen drei Anteile bestimmt werden, die potentielle Energie der Kernkräfte $E_p^{(i)}(\alpha_i)$, die kinetische Energie der Nukleonen, $E_{\text{kin}}^{(i)}(\alpha_i)$ und die COULOMB-Energie der Protonen. Die Gesamtenergie $E^{(i)}(\alpha_i) = E_p^{(i)}(\alpha_i) + E_{\text{kin}}^{(i)}(\alpha_i) + E_c^{(i)}(\alpha_i)$ hängt somit von α_i ab. Dieser Parameter wird so eingerichtet, daß $E^{(i)}(\alpha_i)$ ein Minimum wird, es wird also das Extremalproblem $\frac{\partial}{\partial \alpha_i} E^{(i)}(\alpha_i) = 0$ gelöst.

1. Die potentielle Energie der Kernkräfte.

Die HAMILTON-Funktion

$$E_p^{(i)} = \int \mathfrak{H}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \left[\frac{(V\varphi_i)^2}{2} + \frac{\varphi_i^2}{2} + \frac{\lambda g^4}{4} \varphi_i^4 - g \varphi_i \varrho_i \right] d\mathbf{r}$$

bestimmen wir dadurch, daß wir für $\varphi(r)$ einen Ritzschen Ansatz machen, und dann das Variationsproblem

$$\frac{\delta}{\delta \varphi} \mathfrak{H}(r) = 0$$

lösen, das der Differentialgleichung äquivalent ist. Wir verwenden dabei ebenso wie bei schweren Kernen nur die gewöhnlichen Dichten. Die Energieanteile, die den gemischten Dichten entsprechen, werden am Schluß dieses Paragraphen näher diskutiert. Als Ritzsche Ansätze für

$$\varrho_i(r) \text{ und } \varphi_i(r) \text{ wählen wir } \left[\varrho_{i0} = 4 \left(\frac{\alpha_i}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \right]$$

$$\begin{aligned} n = 0 & \quad \varrho_0(r) = \varrho_{00} e^{-\alpha_0 r^2} & \quad \varphi_0(r) = \varphi_{00} e^{-\beta_0 r^2} \\ n = 1 & \quad \varrho_1(r) = \varrho_{10} e^{-\alpha_1 r^2} [1 - 2\alpha_1 r^2] & \quad \varphi_1(r) = \varphi_{10} e^{-\beta_1 r^2} [1 + 2\beta_1 r^2] \\ n = 2 & \quad \varrho_2(r) = \varrho_{20} e^{-\alpha_2 r^2} \left[\frac{5}{2} - 2\alpha_2^2 r^4 \right] & \quad \varphi_2(r) = \varphi_{20} e^{-\beta_2 r^2} \left[\frac{5}{2} + 2\beta_2^2 r^4 \right]. \end{aligned}$$

Bei diesem Ansatz werden sich Dichte und Potential qualitativ nicht wesentlich unterscheiden. φ_{i0} und ϱ_{i0} sind dabei noch unbestimmte Parameter, die durch das Extremalproblem festgelegt werden sollen. An Stelle von φ_{i0} werden wir ebenso wie bei schweren Kernen $\zeta_i = g^2 \sqrt{\lambda} \varphi_{i0}$ verwenden. Die bei schweren Kernen gebrauchte Beziehung $g^3 \sqrt{\lambda} \varrho_0 = \zeta + \zeta^3$ lassen wir hier weg, da sie nur asymptotisch für große A richtig ist¹.

Die Energie $E_P^{(i)}$ lautet damit

$$\begin{aligned} E_P^{(0)} &= \frac{3\varphi_{00}^2}{4} \sqrt{\frac{\pi^3}{2\beta_0}} + \frac{\varphi_{00}^2}{2} \left(\frac{\pi}{2\beta} \right)^{\frac{3}{2}} + \lambda g^4 \frac{\varphi_{00}^4}{32} \left(\frac{\pi}{\beta_0} \right)^{\frac{3}{2}} - g \varphi_{00} \varrho_{00} \left(\frac{\pi}{\alpha_0 + \beta_0} \right)^{\frac{3}{2}} \\ E_P^{(1)} &= \frac{57}{16} \varphi_{10} \sqrt{\frac{\pi^3}{2\beta_1}} + \frac{31}{8} \varphi_{10}^2 \left(\frac{\pi}{2\beta} \right)^{\frac{3}{2}} + 0,6215 \lambda g^4 \varphi_{10} \left(\frac{\pi}{\beta_1} \right)^{\frac{3}{2}} - \\ & \quad - g \varphi_{10} \varrho_{10} \left\{ 4 \left(\frac{\pi}{\alpha_1 + \beta_1} \right)^{\frac{3}{2}} + \frac{15 \alpha_1 \beta_1 \pi^{\frac{3}{2}}}{(\alpha_1 + \beta_1)^{\frac{7}{2}}} \right\} \\ E_P^{(2)} &= 10,14 \varphi_{20}^2 \sqrt{\frac{\pi^3}{2\beta_2}} + 15,2 \varphi_{20} \left(\frac{\pi}{2\beta} \right)^{\frac{3}{2}} + 5,533 \left(\frac{\pi}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}} \lambda g^4 \varphi_{20}^2 - \\ & \quad - g \varphi_{20} \varrho_{20} \left\{ \frac{25 \pi^{\frac{3}{2}}}{4 (\alpha_2 + \beta_2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{75}{4} \frac{\alpha_2^2 + \beta_2^2}{(\alpha_2 + \beta_2)^{\frac{5}{2}}} + \frac{945 \alpha_2^2 \beta_2^2}{(\alpha_2 + \beta_2)^{\frac{11}{2}}} \right\}. \end{aligned}$$

2. Die kinetische Energie E_{kin} berechnet man am einfachsten aus der mittleren kinetischen Energie eines Teilchens, die beim harmonischen Oszillator gleich der mittleren potentiellen Energie ist

$$\overline{\varepsilon}_{\text{kin}}^{(n)} = \overline{\varepsilon}_{\text{pot}}^{(n)} = \frac{\hbar^2}{2M} \alpha_i \left(\frac{3}{2} + n \right).$$

¹ Die Verwendung dieser Relation bringt an sich keinen sehr großen Fehler, die Rechnung mit den exakten Formeln führt hier jedoch ebenso schnell zum Ziel. Bei Helium z.B. ergibt sich mit der genannten Relation für die Bindungsenergie $E = 55,96$ MeV, während die exakte Formel $E = 58,016$ MeV ergibt.

Die Gesamte kinetische Energie erhält man durch Summation über alle N Teilchen des Kerns, wobei aber diese Summe noch mit $(N-1)/N$ zu multiplizieren ist, da die Bewegung des Schwerpunktes für die kinetische Kernenergie keine Rolle spielt. Für die hier betrachteten Kerne erhält man dann die in Tabelle 3 angegebenen Werte.

3. Die COULOMB-Energie der Protonen enthält zwei Anteile, wenn man die gemischten Dichten mitberücksichtigt

$$E_c^{(1)} = + \frac{e^2}{2} \iint \varrho_P(\mathbf{r}) \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \varrho_P(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'$$

$$E_c^{(2)} = - \frac{e^2}{4} \iint \varrho_P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \varrho_P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'.$$

Daraus ergibt sich unter Verwendung der angegebenen Dichteaussdrücke die COULOMB-Energie für die verschiedenen Kerne (Tabelle 3).

Tabelle 3.

	$n=0$	$n=1$	$n=2$
E_{kin}	$\frac{9}{4} \frac{\hbar^2}{M} \alpha_0$	$\frac{135}{8} \frac{\hbar^2}{M} \alpha_1$	$\frac{117}{2} \frac{\hbar^2}{M} \alpha_1$
$E_c^{(1)}$	$4e^2 \sqrt{\frac{\alpha_0}{2\pi}}$	$51e^2 \sqrt{\frac{\alpha_1}{2\pi}}$	$\left(274 + \frac{1}{16}\right) e^2 \sqrt{\frac{\alpha_2}{2\pi}}$
$E_c^{(2)}$	$-2e^2 \sqrt{\frac{\alpha_0}{2\pi}}$	$-\frac{19}{2} e^2 \sqrt{\frac{\alpha_1}{2\pi}}$	$-\left(29 + \frac{1}{32}\right) e^2 \sqrt{\frac{\alpha_2}{2\pi}}$

Die Gesamtenergie eines Kernes

$$E_i(\alpha_i, \beta_i, \varphi_{i0}) = E_{\text{pot}}^{(i)}(\varphi_{i0}, \alpha_i, \beta_i) + E_{\text{kin}}^{(i)}(\alpha_i) + E_c^{(i)}(\alpha_i)$$

hängt somit von den Variablen α_i , β_i und φ_{i0} ab, wenn wir wieder ϱ_{i0} durch α_i ausdrücken. Die beiden Variationsprobleme, die Lösung der nichtlinearen Differentialgleichung (Variation nach φ_{i0} und β_i) und das RITZsche Verfahren zur Bestimmung der Eigenfunktionen (Variation nach α_i), können hier gemeinsam dadurch behandelt werden, daß $E_i(\alpha_i, \beta_i, \varphi_{i0})$ in bezug auf alle drei Variablen zum Minimum gemacht wird. Dies ist möglich, da $E_{\text{kin}}^{(i)}$ und $E_c^{(i)}$ von φ_{i0} und β_i nicht abhängen. Führt man die oben definierte dimensionslose Variable ζ_i statt φ_{i0} ein, so läßt sich die Energie der betrachteten Kerne in der Form

$$E_i(\alpha_i, \beta_i, \zeta_i) = \zeta_i^4 A_i(\beta_i) + \zeta_i^2 B_i(\beta_i) - \zeta_i C_i(\alpha_i, \beta_i) + D_i(\alpha_i)$$

schreiben. Die Funktionen A_i , B_i , C_i und D_i hängen dann nur noch von α_i und β_i ab und sind in Tabelle 4 explizit angegeben.

Tabelle 4.

	${}^4_2\text{He} (n=0)$	${}^{16}_8\text{O} (n=2)$	${}^{40}_{20}\text{Ca} (n=2)$
$g^4 \lambda A (\beta)$	$\frac{1}{32} \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{\beta^{\frac{3}{2}}}$	$0,6215 \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{\beta^{\frac{3}{2}}}$	$5,533 \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{\beta^{\frac{3}{2}}}$
$g^4 \lambda B (\beta)$	$\frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi^3}{2\beta}} + \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{2\beta}\right)^{\frac{3}{2}}$	$\frac{57}{16} \sqrt{\frac{\pi^3}{2\beta}} + \frac{31}{8} \left(\frac{\pi}{2\beta}\right)^{\frac{3}{2}}$	$10,14 \sqrt{\frac{\pi^3}{2\beta}} + 15,2 \left(\frac{\pi}{2\beta}\right)^{\frac{3}{2}}$
$\frac{g}{4} \sqrt{\lambda} C (\alpha, \beta)$	$\left(\frac{\alpha}{\alpha + \beta}\right)^{\frac{3}{2}}$	$4 \left(\frac{\alpha}{\alpha + \beta}\right)^{\frac{3}{2}} + \frac{15\alpha^{\frac{3}{2}}\beta}{(\alpha + \beta)^{\frac{3}{2}}}$	$\frac{25}{4(\alpha + \beta)^{\frac{3}{2}}} + \frac{75}{4} \frac{\alpha^2 + \beta^2}{(\alpha + \beta)^{\frac{3}{2}}} + \frac{945\alpha^2\beta^2}{(\alpha + \beta)^{\frac{3}{2}}}$
$D (\alpha, \beta)$	$\frac{9\alpha}{4M} + 2e \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}$	$\frac{135}{8} \frac{\alpha}{M} + \frac{83e^2}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}$	$\frac{117}{2} \frac{\alpha}{M} + e^2 \left(245 + \frac{1}{32}\right) \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}$

Das Minimum bezüglich ζ kann explizit angegeben werden¹. Es liegt bei

$$\zeta_{\min} = \left\{ \frac{C}{8A} + \sqrt{\left(\frac{C}{8A}\right)^2 + \left(\frac{B}{6A}\right)^{\frac{8}{3}}}\right\}^{\frac{3}{2}} + \left\{ \frac{C}{8A} - \sqrt{\left(\frac{C}{8A}\right)^2 + \left(\frac{B}{6A}\right)^{\frac{8}{3}}}\right\}^{\frac{3}{2}}$$

Das Minimum von

$$E(\zeta_{\min}, \alpha, \beta) = E_{\min(\zeta)}(\alpha, \beta)$$

bezüglich der Variablen α und β ist numerisch bestimmt worden. Die Werte der Energie im Minimum sind für die drei betrachteten Kerne in Tabelle 5 angegeben. Es sind dort in der ersten Zeile die berechneten Energien E/A , bezogen auf ein Nukleon angegeben. Zum Vergleich ist noch die Energie E_{st} angegeben, die man nach dem statistischen Modell (§4) erhält und die experimentell bekannten Bindungsenergien E_{exp} . Schließlich sind noch diejenigen Werte E_w aufgeführt, die man mit der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel erhält.

Für die Konstanten g und λ sind dieselben Werte gewählt worden, wie bei der Berechnung der schweren Kerne (§4), also $g = 2,908$ und $\lambda = 5,832$.

Tabelle 5.

	${}^4_2\text{He}$	${}^{16}_8\text{O}$	${}^{40}_{20}\text{Ca}$
E/A	-14,5665	-13,6689	-13,71
E_{st}/A	-0,321	-4,095	-6,3513
E_{exp}/A	-6,935	-7,72725	-8,4255
E_w/A	-4,60	-7,594	-8,386

¹ Die Variation nach ζ tritt hier an Stelle der bei schweren Kernen verwandten Relation

$$e_0 = \frac{1}{g^3 \sqrt{\lambda}} (\zeta + \zeta^3).$$

Die Konstanten g und λ waren so bestimmt worden, daß die gewonnenen Energiewerte im statistischen Modell bei $A = 216$ mit den Werten der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel übereinstimmten. Die mit denselben Werten berechneten Absolutwerte der Energien der leichten Kerne liegen im statistischen Modell unter den experimentellen und im Schalenmodell weit über den experimentellen Werten. Die Abweichungen im statistischen Modell werden von der grundsätzlichen Ungenauigkeit der THOMAS-FERMI-Methode bei kleinen Teilchenzahlen herrühren, die entgegengesetzten Abweichungen im Schalenmodell können vermutlich durch folgende Ursachen erklärt werden:

1. Die wirklichen Kerne entsprechen weder dem Schalenmodell, noch dem statistischen Modell, vielmehr wird die Wirklichkeit in einer Mischung beider Modellvorstellungen gesucht werden müssen. Dem entspricht, daß die experimentellen Energiewerte in allen Fällen zwischen den Werten des Schalenmodells und den Werten des statistischen Modells liegen.

2. Zur Berechnung der potentiellen Energie der Kernkräfte wurde nur die gewöhnliche Dichte $\rho(r)$ verwendet, was besonders bei kleinen Teilchenzahlen nur eine sehr schlechte Näherung an die wirklichen Verhältnisse darstellt. Der Fehler, der durch die Vernachlässigung der gemischten Dichte entsteht, bewirkt, daß die berechnete Bindungsenergie zu groß ausfällt. Besonders leicht ist dies zu sehen, wenn ein Zweikörperpotential $V(1, 2)$ wirksam ist, denn dann ist bei WIGNER-Kräften

$$E_{\text{pot}} = -\frac{1}{2} \iint V(1, 2) \{ \rho(1) \rho(2) - \frac{1}{4} \rho(1, 2)^2 \} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2,$$

wobei $\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ die gemischte Dichte darstellt. Im allgemeinen Fall der hier verwandten Kräfte ist eine solche Darstellung nicht möglich, jedoch werden die qualitativen Zusammenhänge dieselben sein.

3. Ein grundsätzlicher Fehler, der der Rechnung anhaftet, ist dadurch entstanden, daß nur WIGNER-Kräfte verwandt wurden, dagegen keinerlei Austauschkräfte, deren Existenz aber durch das Experiment gesichert ist. Eine Abschätzung des Einflusses solcher Potentiale auf die Bindungsenergien ist jedoch sehr schwierig, und soll hier nicht diskutiert werden.

Es soll nun noch der unter 2. erwähnte Fehler genauer untersucht werden. Eine Berechnung der potentiellen Energie in der Weise, wie sie bei Existenz einer GREENSchen Funktion (lineare Differentialgleichung der Potentialfunktion) geschieht, ist hier nicht möglich. Um trotzdem eine Abschätzung derjenigen Energieanteile zu erhalten, die (bei einer linearen Differentialgleichung) dem Ausdruck

$$\iint V(1, 2) \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

entsprechen, machen wir folgende Überlegung: Bei Existenz eines Potentials $V(1, 2)$ ist die Energie

$$E_{\text{pot}} = E_k + E_A \\ = -\frac{1}{2} \iint V(1, 2) \varrho(r_1) \varrho(r_2) dr_1 dr_2 + \frac{1}{8} \iint V(1, 2) |\varrho(r_1, r_2)|^2 dr_1 dr_2.$$

Die E_k entsprechende Energie haben wir bisher direkt aus der HAMILTON-Funktion bestimmt. Für den E_A entsprechenden Ausdruck gibt es jedoch kein so einfaches Berechnungsverfahren. In einfachen Fällen läßt sich das Verhältnis der Austauschenergie E_A zur gewöhnlichen Energie angeben. Allgemein ist

$$E_{\text{pot}} = E_k \left(1 + \frac{E_A}{E_k} \right) = C \cdot E_k.$$

Wir wollen nun annehmen, daß das Verhältnis von Austauschenergie und klassischer Energie im Falle eines Potentials $V(1, 2)$ und im Falle des SCHIFFSchen Kraftansatzes übereinstimmen. Dann läßt sich auch beim SCHIFFSchen Kraftansatz die potentielle Energie aus der klassischen Energie E_k mit $E_{\text{pot}} = C E_k$ berechnen. E_k wurde für ${}^4_2\text{He}$, ${}^{16}_8\text{O}$ und ${}^{40}_{20}\text{Ca}$ direkt aus der HAMILTON-Funktion bestimmt. Für den Faktor C soll der Wert genommen werden, der sich bei Existenz eines Potentials $V(1, 2)$ ergibt. Bei He läßt sich wegen $\varrho(1) \varrho(2) = |\varrho(1, 2)|^2$ C unabhängig von $V(1, 2)$ exakt angeben. Es ist $C = 0,75$. Für die anderen Kerne kann man C nicht exakt bestimmen, ohne weitere Voraussetzungen zu machen. Mit wachsender Teilchenzahl nähert sich jedoch C asymptotisch einem Wert $C_\infty(\varrho_\infty, V)$, der noch von der Dichte ϱ_∞ des unendlich großen Kernes¹ sowie von der genauen Gestalt des Wechselwirkungspotentiales $V(1, 2)$, nicht aber von der Teilchenzahl selbst abhängig ist. Dem Ansteigen der Nukleonendichte von leichten zu schweren Kernen (vgl. auch Fig. 5) mit dem Grenzwert ϱ_∞ entspricht dabei ein Anwachsen von C nach C_∞ ². Es muß daher zwischen den drei C -Werten die Relation

$$0,75 = C_{\text{He}} < C_0 < C_{\text{Ca}} < C_\infty$$

bestehen. Für He erhält man aus dem bisher berechneten Wert $E_k = -134,734 \text{ MeV}$ die neue Bindungsenergie $E = -24,532 \text{ MeV}$, was mit

¹ Diese Bezeichnung ist an sich nur gerechtfertigt, wenn man die Kernkräfte unter Ausschluß der COULOMB-Kräfte diskutiert, da wegen dieser Anteile ein unendlich großer Kern nicht existieren kann. In dem hier diskutierten Zusammenhang bedeutet ϱ_∞ die Dichte, die in Fig. 6 etwa zwischen $A = 40$ und $A = 300$ angenommen wird.

² Für eine spezielle Art von Mehrkörperkräften sind die Werte von $\frac{E_A}{E_K} = 1 - C_\infty$ bei Annahme der experimentellen Kerndichte von S. D. DRELL und K. H. HUANG [Phys. Rev. **91**, 1527 (1953)] bestimmt worden. Für die dort betrachteten Zweikörperkräfte betrug der Anteil der Austauschenergie 19%.

dem experimentellen Wert von $E_{\text{exp}} = -27,74$ MeV wesentlich besser als der bisher berechnete Wert von $-58,266$ MeV übereinstimmt. Da für O und Ca der Wert C nicht genau berechnet werden kann, soll C umgekehrt aus den experimentellen Energiewerten bestimmt werden. Diese Größen C_O und C_{Ca} sollen dann daraufhin untersucht werden, ob sie die oben genannte Ungleichung erfüllen. Es ergibt sich $C_{He} = 0,75$, $C_O = 0,831$, $C_{Ca} = 0,854$, was offenbar mit der Ungleichung verträglich ist. Eine graphische Darstellung dieser drei C -Werte widerspricht auch nicht der Forderung, daß $C = C(A)$ asymptotisch gegen C_∞ strebt (Fig. 9), wobei sich hier für $C_\infty \approx 0,85$ ergibt. Die Abweichungen der berechneten Energie vom Experiment läßt sich daher auch bei $^{16}_8\text{O}$ und $^{40}_{20}\text{Ca}$ ebenso wie bei ^4_2He qualitativ aus der Vernachlässigung der Austauschenergien verstehen.

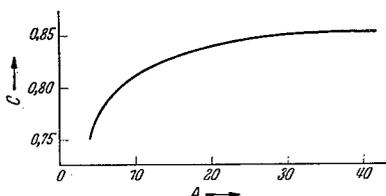


Fig. 9. Verlauf der Funktion $C = C(A)$.

Zusammenfassung.

In der Arbeit von SCHIFF¹ war zur Deutung der Absättigung der Kernkräfte eine nichtlineare Potentialgleichung für die Potentialfunktion vorgeschlagen worden. Die beiden, zunächst unbestimmten Parameter g und λ wurden von SCHIFF¹ und MALENKA² dadurch bestimmt, daß Übereinstimmung von Dichte und Volumenenergie der Kernkräfte mit dem Experiment gefordert wurde. Dabei ist nicht berücksichtigt worden, daß die Dichte durch ein Variationsproblem bestimmt ist (THOMAS-FERMI-Modell), wodurch diese Abschätzung nur sehr ungenaue Werte liefert. Es ergab sich $g = 6,32$, $\lambda = 13,6^2$.

Im Gegensatz dazu wurde hier (§3) der Wert von g und λ zunächst durch Berücksichtigung des Variationsproblems an der Volumenenergie der Kernkräfte allein berechnet. Es ergab sich dabei

$$g = 8,48 \quad \text{und} \quad \lambda = 11,12.$$

Eine weitere wesentliche Verbesserung dieser Bestimmung wurde (§4) dadurch erzielt, daß im Variationsproblem neben der Volumenenergie der Kernkräfte auch Oberflächenenergie und COULOMB-Energie berücksichtigt wurden. Besonders die COULOMB-Energie verändert die Werte der Konstanten g und λ stark. Die Gesamtenergie hängt dann wegen der Berücksichtigung der beiden Energieanteile vom Atomgewicht A ab, weshalb die Bestimmung der Konstanten in der Weise erfolgte, daß Übereinstimmung der berechneten Dichte und der berechneten Gesamtenergie bei $A = 216$ gefordert wurde. Diese Rechnung

¹ SCHIFF, I. J.: Phys. Rev. **84**, I.

² MALENKA, B. I.: Phys. Rev. **86**, 68.

wurde durch Vorgabe einer geeigneten Dichteverteilung (RITZscher Ansatz) mit dem THOMAS-FERMI-Modell durchgeführt. Es ergab sich $g = 2,908$ und $\lambda = 5,832$.

Mit Hilfe dieser Werte wurde dann (§4) die Bindungsenergie für verschiedene A -Werte berechnet, so daß ein direkter Vergleich mit der WEIZSÄCKER-BETHE-Formel möglich war. Es zeigte sich dabei, daß bei den schweren Kernen die Energie gut mit den experimentellen Daten übereinstimmt, daß aber bei Benutzung der THOMAS-FERMI-Approximation die Abweichungen immer größer werden, je kleiner A wird. Die Dichte im Mittelpunkt des Kernes ist dabei in weiten Bereichen ($40 < A < 300$) nahezu konstant und gleich dem experimentellen Wert. Für Werte $A < 40$ nimmt die Dichte wegen dem zunehmenden Einfluß der Oberflächenenergie ab, für $A > 300$ wegen der COULOMBSchen Abstoßung der Protonen.

Die Gestalt der Dichtefunktion ist für verschiedene A -Werte genau bestimmt worden. Dabei zeigte sich, daß die Breite der Oberflächenschicht bei schweren Kernen etwa ein Drittel des Kernradius einnimmt.

Da für leichte Kerne das THOMAS-FERMI-Modell unbefriedigende Resultate bringt, wurde für einige leichte Kerne Energie und Dichte mit dem Schalenmodell bestimmt (§5). Unter Annahme derselben Konstanten g und λ wie bei schweren Kernen, und bei Verwendung der Oszillatoreigenfunktionen als Einteilchenwellenfunktionen wurde die Bindungsenergie für die ersten drei abgeschlossenen Schalen (${}^4_2\text{He}$, ${}^{16}_8\text{Ca}$, ${}^{40}_{20}\text{Ca}$) bestimmt. Dabei wurde jedoch wegen prinzipieller Schwierigkeiten in der Energiebestimmung nur die gewöhnliche klassische Energie berechnet, nicht aber die Austauschenergie. Der Beitrag der Austauschintegrale ist jedoch bei leichten Kernen ziemlich groß, so daß die Ergebnisse durch diese Vernachlässigung stark verfälscht werden. Es konnte jedoch mit einer einfachen qualitativen Abschätzung gezeigt werden, daß die Berücksichtigung der Austauschenergien gute Übereinstimmung mit dem Experiment liefert.

Damit ist sowohl bei schweren Kernen (THOMAS-FERMI-Modell) als auch bei leichten Kernen (Schalenmodell) befriedigende Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment erreicht.

Zum Schluß möchte ich Herrn Professor HEISENBERG für die Anregung zu dieser Arbeit, sowie für ständige fördernde Kritik herzlich danken. Herrn Professor BIERMANN danke ich für die freundliche Erlaubnis, die elektronische Rechenmaschine G1 für die umfangreichen numerischen Rechnungen benutzen zu dürfen.

Göttingen, Max-Planck-Institut für Physik.