

Ergebnisse der Tieftemperaturforschung¹

XVIII. Die Atom- und Elektronenwärme des Platins zwischen 10° und 273° K

Von K. CLUSIUS, C. G. LOSA und P. FRANZOSINI

Aus dem Physikalisch-Chemischen Institut der Universität Zürich
(Z. Naturforsch. **12 a**, 34–38 [1957]; eingegangen am 5. Oktober 1956)

An einem 205 g schweren Platinzyylinder wird die Atomwärme konstanten Druckes C_p zwischen 10° K und 0° C gemessen. Die Normalentropie bei 25° C ergibt sich zu 9,95 Clausius. Unterhalb von 16° K lässt sich die Atomwärme als die Summe der Gitterwärme C_g , die dem T^3 -Gesetz folgt, und der Elektronenwärme C_e , die linear mit T verläuft, darstellen:

$$\text{Platin: } C_p = C_v = C_g + C_e = 464,5 (T/221)^3 + 15,8 \cdot 10^{-4} T.$$

KOK und KEESOM fanden für den Koeffizienten des linearen Gliedes bei Heliumtemperaturen $16,1 \cdot 10^{-4}$ und RAYNE erhielt ihn unterhalb von 1° K zu $16,5 \cdot 10^{-4}$. Oberhalb von 20° K verursacht die Elektronenwärme einen starken Abfall der DEBYESCHEN Θ -Werte, wenn diese aus den auf C_v korrigierten C_p -Werten unmittelbar berechnet werden; diese Θ -Werte verschwinden bei $T_0 = 245^\circ$. Benutzt man den bei Helium- und Wasserstofftemperaturen gültigen Wert von $16 \cdot 10^{-4} T$ für die Elektronenwärme γT auch bei höheren Temperaturen, so steigen die für die Gitterwärme $C_g = C_v - C_e$ berechneten Θ_g -Werte nach hohen Temperaturen abnorm an. Dies deutet darauf hin, daß die Elektronenwärme zu groß angesetzt ist. Dagegen folgt aus einer von CLUSIUS-BÜHLER aufgestellten Formel $\gamma = 10 \cdot 10^{-4}$, ein Wert, mit dem Θ_g zwischen 90° K und der Raumtemperatur temperaturunabhängig wird und zwischen 238 und 240° zu liegen kommt. Platin verhält sich hinsichtlich seiner Elektronenwärme offenbar genau so wie sein leichteres Homologe, das Palladium, das auch einen temperaturabhängigen γ -Wert hat.

Kürzlich beschrieben wir eingehender die Möglichkeit, die Elektronenwärme der Übergangselemente zwischen 0° C und der Temperatur der flüssigen Luft nachzuweisen². Dabei wurden unveröffentlichte Messungen unserer Arbeitsgruppe am Platin erwähnt, welche gut zu den vorgebrachten Ansichten paßten. Platin ist ein interessantes Untersuchungsobjekt, weil sich bei Heliumtemperaturen eine große Elektronenwärme nachweisen lässt^{3,4}. Sonst sind aber die Kenntnisse der Atomwärmen dieses Elements noch unzureichend. Nur SIMON und ZEIDLER haben 19 Werte zwischen 17,5 und 121° K und weitere 5 Werte zwischen 198,2° und 208,3° K angegeben⁵.

In der vorliegenden Arbeit teilen wir die neuen Messungen mit, welche die bestehenden Lücken ausfüllen helfen. Dabei werden wir zeigen, daß sich auch im Äquipartitionsgebiet die Elektronenwärme des Platins stark bemerkbar macht.

Versuchsanordnung

Das Platin (205,735 g) war uns von der Firma W. C. Heraeus, Hanau a. M., als ein Zylinder von 37,8 mm Länge und 18,2 mm Durchmesser freundlichst zur Verfügung gestellt worden. Für dieses Entgegen-

kommen, das die Untersuchung erst ermöglichte, möchten wir allen beteiligten Herren bestens danken. Die spektroskopische Analyse zeigte eine Reinheit von 99,94% an. Das Material enthielt außer 0,01% Pd und 0,03% Rh nur noch Spuren Fe, während Spuren von Ag, Cu, Ca und Mg an der Grenze der Nachweisbarkeit lagen. In den Zylinder war zur Aufnahme des 0,05 mm dicken, seideisolierten Heizdrahts aus Konstantan eine feine Nut mit V-Profil von 1,5 mm Steigung eingeschnitten. Die Heizwicklung wurde mit Japanlack und dünnstem Seidenpapier bedeckt, auf welches 0,06 mm dicker Bleidraht aufgewickelt wurde. Das Bleithermometer wurde mit O₂- und H₂-Dampfdruckthermometern geeicht und der Eispunkt zu 273,16° K angenommen. Die Abweichung vom Sollwert betrug bei 20° K etwa 1° und wurde mit der NERNSTSCHEN α -Regel berücksichtigt. Am oberen und unteren Ende des Zylinders verhinderte ein mit 3 Spitzen versehener Eisendraht die Berührung des Versuchskörpers mit dem kupfernen Schutzmantel. Die Wärmekapazität für Cu-, Fe- und Pb-Drähte wurde ebenso wie für den Lack rechnerisch berücksichtigt. Zwei verschiedene Wicklungen wurden benutzt, deren Ergebnisse gut übereinstimmen. Die Heizdrähte hatten 275 bzw. 293 Ohm, die Bleidrähte 544 bzw. 565 Ohm Widerstand bei 0° C.

Zur Berechnung der Temperatur wurde zwischen 20° und 85° K die alte Tabelle Pb (1929) herangezogen⁶, oberhalb dieser Temperatur die Tabelle der Physikalisch-Technischen Reichsanstalt. Es ist dringend zu wün-

¹ K. CLUSIUS u. W. EICHENAUER, Ergebnisse der Tieftemperaturforschung. XVII. T^3 - und Pseudo- T^3 -Gebiet beim Lithiumfluorid. Z. Naturforsch. **11 a**, 715 [1956].

² K. CLUSIUS u. H. H. BÜHLER, Z. Naturforsch. **10 a**, 930 [1955].

³ J. A. KOK u. W. H. KEESOM, Physica **3**, 1035 [1936]; Commun. Leid. 245 a.

⁴ J. RAYNE, Phys. Rev. **95**, 1428 [1954].

⁵ F. SIMON u. W. ZEIDLER, Z. phys. Chem. **123**, 383 [1926].

⁶ K. CLUSIUS u. J. V. VAUGHEN, Z. Kälteindustrie **36**, 215 [1929].



$T^\circ \text{ K}$	$\frac{W}{W_0}$	$\frac{1}{W_0} \frac{dW}{dT} 10^3$
21	0,03162	3,48
20	0,02820	3,39
19	0,02488	3,25
18	0,02170	3,12
17	0,01865	2,98
16	0,01575	2,82
15	0,01301	2,65
14	0,01048	2,42

* Sprungpunkt

$T^\circ \text{ K}$	$\frac{W}{W_0}$	$\frac{1}{W_0} \frac{dW}{dT} 10^3$
13	0,00818	2,18
12	0,00615	1,88
11	0,00442	1,59
10	0,00297	1,30
9	0,00183	0,97
8	0,00102	0,63
7,22 *	0,00062	0,38

Tab. 1. Widerstandsverhältnis und Temperaturkoeffizient des Widerstandes W bei $T^\circ \text{ K}$ zum Widerstand W_0 bei 0° C für Pb (1954).

Meßreihe	$T^\circ \text{ abs.}$	$C_p \text{ (cal)}$
II/4	10,63	0,0685
V/6	10,81	0,0715
V/1	11,18	0,0774
II/11	11,23	0,0794
II/5	12,27	0,0962
V/7	12,24	0,0986
II/1	12,88	0,1098
V/2	12,95	0,1154
II/12	13,29	0,1185
II/6	13,89	0,1384
V/8	14,14	0,1445
II/2	14,38	0,1470
V/3	14,57	0,1513
II/13	15,33	0,1811
II/7	15,61	0,1964
II/3	16,19	0,2082
V/9	16,24	0,2088
V/4	16,62	0,2226
II/14	17,54	0,2560
II/8	17,60	0,2594
V/11	18,01	0,2752
V/10	18,59	0,3008
V/5	18,84	0,3129
II/9	19,65	0,3448
II/15	19,78	0,3520
II/16	21,00	0,4124
V/12	21,07	0,4206
II/10	21,63	0,4430
II/17	23,66	0,5756
V/13	24,04	0,5969
II/18	26,88	0,7919
V/14	27,52	0,8387
II/19	30,69	1,098
V/15	31,58	1,148
II/20	34,86	1,408
V/16	35,89	1,486
II/21	39,42	1,776

Meßreihe	$T^\circ \text{ abs.}$	$C_p \text{ (cal)}$
V/17	40,78	1,868
II/22	43,47	2,089
V/18	45,02	2,197
II/23	47,13	2,360
V/19	49,70	2,552
II/24	50,83	2,623
V/20	53,58	2,793
II/25	54,22	2,843
I/1	57,08	3,016
II/26	57,62	3,059
V/22	62,33	3,322
I/3	62,69	3,335
I/7	62,91	3,346
II/28	65,26	3,468
I/4	65,82	3,491
I/8	66,71	3,533
I/9	71,13	3,736
I/10	75,67	3,920
I/11	80,24	4,096
I/12	85,00	4,234
IV/8	87,34	4,297
I/13	89,56	4,392
IV/9	92,22	4,455
I/14	94,21	4,496
IV/10	97,18	4,585
I/15	98,75	4,656
IV/11	101,97	4,684
IV/1	102,05	4,686
I/16	103,45	4,752
IV/12	107,04	4,795
I/17	108,05	4,852
IV/2	109,21	4,855
IV/13	111,97	4,928

Meßreihe	$T^\circ \text{ abs.}$	$C_p \text{ (cal)}$
I/18	112,83	4,963
IV/3	113,66	4,980
IV/14	117,24	4,992
I/19	117,49	5,012
IV/4	118,43	5,067
IV/15	122,36	5,129
I/20	122,45	5,131
IV/5	122,78	5,126
I/21	127,36	5,176
IV/16	127,74	5,185
IV/6	132,17	5,279
I/22	132,77	5,269
IV/17	133,00	5,264
IV/7	136,60	5,308
I/23	138,04	5,350
IV/18	138,83	5,347
I/24	143,43	5,423
IV/19	144,32	5,399
I/25	148,65	5,454
IV/20	150,34	5,470
I/26	154,23	5,538
IV/21	156,11	5,507
I/27	158,59	5,540
IV/22	162,36	5,581
I/28	165,34	5,606
IV/23	168,15	5,640
I/29	170,74	5,659
IV/24	174,35	5,672
I/30	176,72	5,721
IV/25	180,05	5,717
I/31	182,67	5,718
IV/26	186,34	5,742
I/32	188,25	5,780
IV/27	191,84	5,785
I/33	194,37	5,798
IV/28	198,17	5,797
I/34	200,01	5,802

Meßreihe	$T^\circ \text{ abs.}$	$C_p \text{ (cal)}$
VI/1	201,39	5,793
III/2	203,25	5,840
IV/29	203,78	5,850
I/35	206,16	5,860
VI/2	206,87	5,876
III/3	209,59	5,854
I/36	211,78	5,887
VI/3	213,33	5,911
III/4	215,32	5,881
III/14	217,33	5,890
I/37	217,85	5,898
VI/4	218,87	5,930
III/5	221,78	5,938
III/15	223,09	5,913
VI/5	225,39	5,951
III/6	227,56	5,952
III/16	229,54	5,953
VI/6	230,99	5,986
III/7	235,13	5,990
III/17	235,45	5,995
VI/7	237,31	6,028
III/18	242,20	6,020
III/8	242,37	6,033
VI/8	242,82	6,012
III/19	247,95	6,008
III/9	248,21	6,003
VI/9	249,58	6,053
III/20	254,85	6,068
III/10	254,95	6,087
VI/10	255,16	6,080
III/21	260,65	6,080
III/11	260,69	6,093
VI/11	261,67	6,101
VI/12	267,04	6,100
III/12	267,18	6,092
III/22	267,83	6,065
III/13	273,53	6,168
III/23	273,71	6,138

Tab. 2. Atomwärme von Platin (gemessen wurden 205,7354 g = 1,0546 g-Atome; Atomgewicht = 195,09).

Meßreihe	Bad
I	am 15. 7. 55, flüssige Luft
II	am 17. 7. 55, fester und flüssiger H_2
III	am 21. 7. 55, festes CO_2

Reihe I, II, III mit 1. Wicklung;

Meßreihe	Bad
IV	am 19. 6. 56, flüssige Luft
V	am 30. 6. 56, fester und flüssiger H_2
VI	am 5. 7. 56, festes CO_2

Reihe IV, V, VI mit 2. Wicklung.

schen, daß eines der großen Kälteinstitute eine neue einheitliche Tabelle für den Bleiwiderstand im gesamten Temperaturbereich unterhalb 0°C ausarbeitet, die modernen Ansprüchen Rechnung trägt.

Unterhalb 20° wurden folgende Werte zugrunde gelegt, die auf die Leidener Schule zurückgehen⁷:

Ergebnisse

1. Die Ergebnisse sind in Tab. 2 zusammengestellt. Für 0°C finden wir C_p zu $6,119 \text{ cal/}^\circ$. Dieser Wert stimmt innerhalb von $\pm 1\%$ mit den Resultaten anderer Beobachter überein. Mit Ausnahme von GAEDES Angabe handelt es sich dabei um die Auswertung mittlerer spez. Wärmen:

		C_p für $273,16^\circ\text{K}$
1900	BEHN ⁸	6,204
1902	GAEDE ⁹	6,061
1918	WÜST, MEUTHEN und DURRER ¹⁰	6,083
1936	JAEGER und Mitarbeiter ¹¹	6,121

Bei 20°K liegen die Werte von KEESEM – KOK etwa 5,6%, die von SIMON – ZEIDLER um 3,5% tiefer als unsere Ergebnisse. Doch verringert sich die Diskrepanz mit steigender Temperatur rasch, so daß im Gebiet der flüssigen Luft weitgehende Übereinstimmung herrscht. Ob die Unterschiede auf den sicher verschiedenen Reinheitsgrad oder die thermisch-mechanische Vorbehandlung des Platins zurückgehen, läßt sich nicht mit Sicherheit angeben. Jedenfalls benützte SIMON gezogene Drähte und KEESEM gewalzte Bleche, also mechanisch stark deformiertes Material, während uns ein kompakter, warm geschmiedeter Block zur Verfügung stand, der keine wesentliche Kaltbearbeitung erfahren hatte.

2. Zur Umrechnung der Atomwärme C_p auf C_v wurde zunächst die Beziehung

$$C_p - C_v = \frac{\alpha^2 V_0^2 T}{V \chi} \approx \frac{\alpha^2 V T}{\chi} \quad (1)$$

bei 0°C exakt ausgewertet. Setzt man für den linearen Ausdehnungskoeffizienten $\alpha(0^\circ\text{C}) = 8,84 \cdot 10^{-6}$ ein¹² und für die kubische Kompressibilität

$\chi(0^\circ\text{C}) = 3,57 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{kg}$, so folgt mit der röntgenographischen Dichte $d(0^\circ\text{C}) = 21,46$ und dem neuerdings empfohlenen Atomgewicht 195,09

$$C_p - C_v = \frac{(3 \cdot 8,84)^2 \cdot 10^{-12} \cdot 195,09 \cdot 273,2}{3,57 \cdot 10^{-7} \cdot 21,46 \cdot 42,69} = 0,115 \text{ cal/}^\circ. \quad (2)$$

Die Temperaturabhängigkeit von $C_p - C_v$ wurde durch die Formel berücksichtigt:

$$C_p - C_v = A C_p^2 T = \frac{0,115}{6,119^2 \cdot 273,2} C_p^2 T = 1,12 \cdot 10^{-5} C_p^2 T. \quad (3)$$

Diese Korrektur ist einer Unsicherheit unterworfen, die vom Einfluß der Vorgeschichte des Materials herrührt und auf den Wert der Kompressibili-

$T^\circ \text{ abs.}$	C_p	$C_p - C_v$	C_v	$\theta(C_v)$	C_e	$C_v - C_e$	$\theta(C_v - C_e)$
10	0,060	—	0,060	198	0,0106	0,0494	(211)
15	0,172	—	0,172	209	0,015	0,157	(215)
20	0,361	—	0,361	216	0,020	0,341	221
25	0,662	—	0,662	218	0,025	0,637	221
30	1,027	—	1,027	219	0,030	0,997	222
35	1,419	0,001	1,418	222	0,035	1,383	224
40	1,812	0,001	1,811	224	0,040	1,771	226
45	2,201	0,002	2,199	225	0,045	2,154	228
50	2,566	0,004	2,562	226	0,050	2,512	229
60	3,187	0,007	3,180	228	0,060	3,120	232
70	3,686	0,011	3,675	229	0,070	3,605	234
80	4,065	0,015	4,050	232	0,080	3,970	238
90	4,386	0,019	4,367	232	0,090	4,277	241
100	4,649	0,024	4,625	231	0,100	4,525	242
110	4,884	0,030	4,854	228	0,110	4,744	241
120	5,073	0,035	5,038	224	0,120	4,918	240
130	5,240	0,040	5,200	218	0,130	5,070	238
140	5,366	0,045	5,321	212	0,140	5,181	237
150	5,468	0,050	5,418	208	0,150	5,268	238
160	5,560	0,055	5,505	202	0,160	5,345	238
170	5,642	0,061	5,581	195	0,170	5,411	238
180	5,708	0,066	5,642	188	0,180	5,462	239
190	5,767	0,071	5,696	180	0,190	5,506	240
200	5,827	0,076	5,751	168	0,200	5,551	239
210	5,878	0,081	5,797	155	0,210	5,587	239
220	5,923	0,086	5,837	140	0,220	5,627	240
230	5,966	0,091	5,875	121	0,230	5,645	240
240	6,010	0,097	5,913	91	0,240	5,673	238
250	6,046	0,102	5,944	50	0,250	5,694	238
260	6,078	0,108	5,970	—	0,260	5,710	240
273,2	6,119	0,115	6,004	—	0,273	5,731	240

Tab. 3. Atomwärme des Platins in cal/g Atom° zwischen 10° und $273,2^\circ\text{K}$. Die Elektronenwärme wurde zu $10 \cdot 10^{-4} T$ angesetzt.

⁷ P. VAN DER LEEDEN, Thesis for the Doctorate, Leiden 1940.

— W. J. DE HAAS, J. DE BOER u. G. J. VAN DEN BERG, *Physica* **1**, 115 [1933/34]; *Commun. Leid.* 233 b. — G. J. VAN DEN BERG, *Physica* **14**, 111 [1948/49]; *Commun. Leid.* 247.

⁸ U. BEHN, *Ann. Phys.*, Lpz. (4) **1**, 264 [1900].

⁹ W. GAEDE, *Phys. Z.* **4**, 106 [1902/03].

¹⁰ F. WÜST, A. MEUTHEN u. R. DURRER, *Forschungsarb. Gebiete Ingenieurwesens* Heft **204**, 28 [1918].

¹¹ F. M. JAEGER u. Mitarb., *Rec. Trav. chim.* **55**, 500 [1936].

¹² Ausdehnungskoeffizient, Kompressibilität und Dichte wurden aus den Literaturwerten in Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie, Platin, Teil B, 1942, Verlag Chemie, S. 26/45, ausgewählt.

tät sowie der thermischen Ausdehnung etwa $\pm 5\%$ ausmachen dürfte. Da aber sogar in dem Bereich zwischen flüssiger Luft und dem Eispunkt die Elektronenwärme C_e 5- bis 2,4-mal größer ist als die Korrektur $(C_p - C_v)$, so wird C_e dadurch entsprechend weniger beeinflußt, d. h. nur um $\pm 1\%$ bis $\pm 2\%$.

Ausgeglichene Werte für die Atomwärmen C_p und C_v sowie für die oberhalb der Temperatur des flüssigen Wasserstoffs auftretende Elektronenwärme $C_e = 10 \cdot 10^{-4} T$ und die daraus folgenden DEBYE-schen charakteristischen Temperaturen Θ und Θ_g sind in Tab. 3 zusammengestellt.

Normalentropie von Platin

Aus unseren Messungen ergibt sich die Normalentropie bei 25°C graphisch zu $9,95 \pm 0,02$ CLAUSSIUS. Dieser Wert weicht nur wenig von der in den letzten Jahren gebräuchlichen Zahl ab:

		Entropie in cal/ $^\circ\text{g-Atom}$
1917	LEWIS und GIBSON ¹³	10,0
	EASTMAN ¹⁴ (2 verschiedene Berechnungsarten)	{ 10,2 9,3
1923	SHERMAN ¹⁵	9,98
1932	KELLEY ¹⁶	10,0
1932/36	diese Arbeit	$9,95 \pm 0,02$
1956		

Zur Elektronenwärme des Platins

Tiefe Temperaturen. Unter der üblichen Annahme, daß die Gitterwärme C_g und die Elektronenwärme C_e sich additiv verhalten, ergibt sich im Bereich des T^3 -Gesetzes:

$$C_v = C_g + C_e = 464,5 (T/\Theta_g^*)^3 + \gamma T. \quad (4)$$

Der Koeffizient γ der Elektronenwärme wird in einem $C_v/T - T^2$ -Diagramm als Ordinatenabschnitt erhalten. Diese Darstellung ist gleichzeitig eine qualitative Kontrolle für die Berechtigung der Zerlegung 4. Auf Abb. 1 sind unsere Ergebnisse zwischen $10,6$ und $16,2^\circ\text{K}$ in einem solchen Diagramm aufgetragen, aus dem sich die Beziehung

$$\gamma = C_v/T - (464,5/\Theta_g^*) T^2 \quad (4a)$$

¹³ G. N. LEWIS u. G. E. GIBSON, J. Amer. Chem. Soc. **39**, 2581 [1917].

¹⁴ E. D. EASTMAN, J. Amer. Chem. Soc. **45**, 83 [1923].

mit $\gamma = 15,8 \cdot 10^{-4}$ und $\Theta_g = 221^\circ\text{K}$ ablesen läßt. Oberhalb von 16°K ist eine derartige lineare Darstellung der C_v/T -Werte nicht mehr möglich.

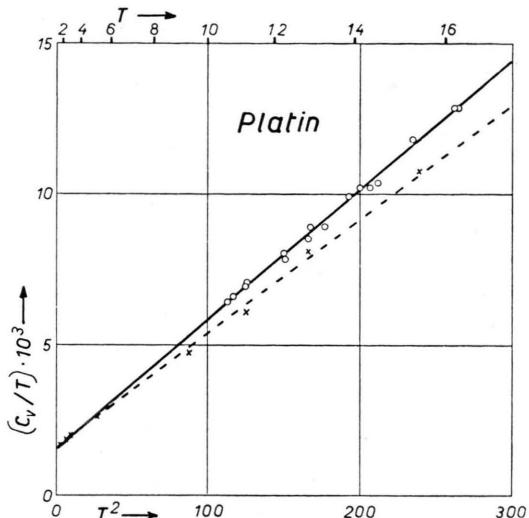


Abb. 1. Atomwärmen von Platin im $C_v/T - T^2$ -Diagramm (Kreise). Die im Gebiet des festen und flüssigen H_2 beobachteten Daten fallen auf eine Gerade [Gl. (4) und (4a)]. Die Werte von KOK und KEESOM (Kreuze) liegen tiefer, liefern aber praktisch den gleichen γ -Wert für die Elektronenwärme als Ordinatenabschnitt.

Der so erhaltene Koeffizient für die Elektronenwärme stimmt gut mit den bei Heliumtemperaturen gefundenen Werten überein:

	KOK und KEESOM ³	RAYNE ⁴	diese Arbeit
$\gamma \cdot 10^4$	16,1	16,5	15,8

Mittlere Temperaturen. Auf Abb. 2 ist der DEBYE-sche Θ -Wert für die beobachtete Atomwärme konstanten Volumens C_v verzeichnet, wobei die ausgezogene Kurve durch die Meßpunkte gelegt ist. Platin zeigt danach die gleiche Erscheinung wie die bisher genauer untersuchten Metalle der Übergangselemente; die Θ -Werte fallen mit steigender Temperatur steil ab.

Wir führen dieses Verhalten wiederum auf den Einfluß der Elektronenwärme zurück, für die nun allerdings ein anderer Wert als bei tiefen Temperaturen einzusetzen ist. Benutzt man nämlich den im Helium- und Wasserstoffgebiet beobachteten γ -Wert von $16 \cdot 10^{-4}$ oberhalb von 90°K , so findet man

¹⁵ J. SHERMAN, Chem. Rev. **11**, 136 [1932].

¹⁶ K. KELLEY, Bull. Bur. Mines **350**, 38, 57 [1932]; **394**, 42 [1936].

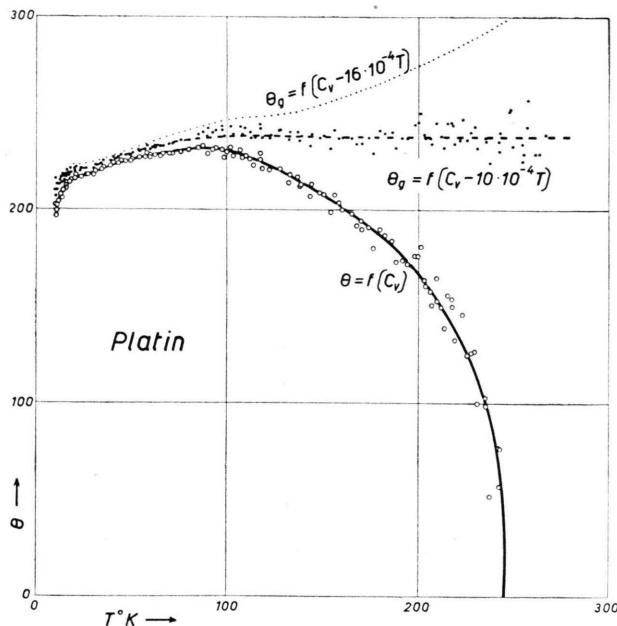


Abb. 2. Die ausgezogene Kurve gibt den Verlauf der DEBYE-schen charakteristischen Temperatur Θ wieder, wenn die unmittelbar beobachteten Werte für C_v eingesetzt werden. Die punktierte, ansteigende Kurve gilt für die Θ_g -Werte, die zu einer Gitterwärme $C_g = C_v - 16 \cdot 10^{-4} T$ gehören; die Elektronenwärme ist dabei mit dem aus dem He, H₂-Gebiet folgenden γ -Wert berechnet. Die gestrichelte Kurve zeigt dagegen, daß Θ_g keine merkliche Temperaturabhängigkeit mehr besitzt, wenn $\gamma = 10 \cdot 10^{-4}$ gesetzt wird.

für den Verlauf von Θ_g die punktierte Kurve, welche abnorm ansteigt. Sie führt bei Zimmertemperatur auf eine charakteristische Temperatur von 320° für Platin, die wohl sicher erheblich zu hoch ist. Bei noch höheren Temperaturen würde die Unstimmigkeit noch krasser werden. Denn nicht nur aus der Atomwärme, auch aus Messungen der elektrischen Leitfähigkeit erhält man Θ -Werte, die zwischen 220 und 240° liegen¹⁷, und ganz ähnlich verhält es sich mit charakteristischen Temperaturen, die aus der thermischen Ausdehnung folgen¹⁸. Wenn auch die Art der theoretischen Berechnung aus Leitfähigkeit und Ausdehnung manchem Einwand ausgesetzt ist, so ist die praktische Brauchbarkeit dieser Θ -Werte doch empirisch erwiesen.

Für das Temperaturgebiet über 90°K läßt sich nun ein passender γ -Wert aus der früher angegebenen Formel²

$$\gamma = \frac{3 R \Theta_g^2}{20 T_0^3} \left[1 - \frac{1}{28} \left(\frac{\Theta_g}{T_0} \right)^2 \right] \quad (5)$$

¹⁷ W. MEISSNER u. B. VOIGT, Ann. Phys., Lpz. (5) 7, 925 [1930].

¹⁸ E. GRÜNEISEN, Ann. Phys., Lpz. (4) 55, 379 [1918].

ermitteln, in der außer der Gaskonstanten R die Temperatur $T_0 = 245^\circ$ auftritt, bei der Θ verschwindet. Für Θ_g setzt man den Θ -Wert bei $\Theta/T = 4,25$ ein und erhält so $\Theta_g = 225^\circ$ K. Mit diesen Daten ergibt sich γ zu $10 \cdot 10^{-4}$. Für die Gitterwärme C_g bleibt dann der Betrag $(C_v - 10 \cdot 10^{-4} T)$ übrig. Die zugehörigen Θ_g -Werte sind in Abb. 2 eingezeichnet und durch eine gestrichelte Kurve verbunden. Danach ergibt sich oberhalb von 90°K ein praktisch konstanter Θ_g -Wert von 238 bis 240°.

Platin besitzt also im Äquipartitionsgebiet einen kleineren γ -Wert als bei tiefen Temperaturen. Es verhält sich darin genau so wie sein leichteres Homologe, das Palladium¹⁹. Unseres Erachtens ist dies ein Hinweis auf eine erhebliche Temperaturabhängigkeit der Elektronenwärme bei diesen beiden Elementen. Selbstverständlich muß man erwarten, daß der bei Heliumtemperaturen gültige Grenzwert von γ mit steigender Temperatur stetig abnimmt und sich nicht etwa sprunghaft ändert. In diesem Sinne ist der hier benutzte γ -Wert von $10 \cdot 10^{-4}$ für das Gebiet zwischen flüssiger Luft und Zimmertemperatur als eine Art interpolatorischer Mittelwert zu betrachten, den wir nur deshalb gebrauchen, weil gegenwärtig weder die theoretischen noch experimentellen Unterlagen ausreichen, um die wirkliche Temperaturfunktion von γ aufzustellen.

Es bleibt die Frage offen, ob die Temperaturabhängigkeit von γ beim Palladium und Platin nur deshalb hervortritt, weil es sich um große Elektronenwärmenden handelt, oder ob die speziellen Eigenschaften dieser Elemente einen solchen Nachweis überhaupt erleichtern. Um hierfür weitere Unterlagen zu erhalten, haben wir uns jetzt dem Studium der Atomwärmenden Mangan und Vanadin zugewandt, die beide bei Heliumtemperaturen große Elektronenwärmenden besitzen.

Der eine von uns — C. G. LOSA — dankt dem Consejo Superior de Investigaciones Científicas und der Comisaría de Protección Escolar y Asistencia Social (Madrid) für die Gewährung von Studien-Stipendien. Weiter dankt P. FRANZOSINI für ein Stipendium des Collegio Ghislieri (Pavia). Die Deutsche Forschungsgemeinschaft überließ uns eine Präzisionsmeßbrücke, und der Schweizerische Nationalfond stellte namhafte Mittel für Untersuchungen bei tiefen Temperaturen zur Verfügung. Auch diesen beiden Institutionen danken wir vielmals für ihre Hilfe.

¹⁹ K. CLUSIUS u. L. SCHACHINGER, Z. Naturforschg. 2a, 90 [1947].

Kernhydrodynamik und Deutung der Energiebreite der Kern- γ -Resonanzen

VON KARL WILDERMUTH UND HANS WITTERN

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität München
(Z. Naturforschg. **12 a**, 39–59 [1957]; eingegangen am 22. August 1956)

Stöße zwischen den einzelnen Nukleonen im Kern werden als Ursache der Dämpfungsbreite der Kern- γ -Resonanzen angesehen. Auf Grund dieser Vorstellung wird die Energiebreite ΔE solcher Schwingungszustände mit Hilfe der in einer Arbeit von WILD¹ entwickelten Kernhydrodynamik ausgerechnet. Es ergibt sich für einen hypothetischen Kern vom Atomgewicht $A=260$ $\Delta E=6,42$ MeV und ein korrigierter Wert $\Delta E=5,55$ MeV. Für die Anwendung auf reale Kerne gilt näherungsweise $\Delta E=6,42 \cdot (260/A)^{2/3}$ MeV bzw. $\Delta E=5,55 \cdot (260/A)^{2/3}$ MeV.

Die Deutung der γ -Anregung in einer Reihe von (γ , n)-Kernreaktionen als Dipolschwingung der Protonengesamtheit gegenüber der Neutronengesamtheit wurde zuerst von GOLDHABER und TELLER² vorgeschlagen.

STEINWEDEL und JENSEN³ führten eine Berechnung der Resonanzfrequenzen und der Wirkungsquerschnitte im Rahmen einer klassischen Hydrodynamik durch. Diese Autoren behandelten den Kern als ein Zweiflüssigkeitensystem, dessen Komponenten einzeln kompressibel sind, während die Gesamtdichte jedoch konstant bleibt. Die Randbedingung einer starren Kernoberfläche – von der Kopplung mit den Oberflächenschwingungen kann abgesehen werden – liefert die experimentell bestätigte Abhängigkeit der Resonanzfrequenz vom Atomgewicht A :

$$\omega \sim A^{-1/3}.$$

Zahlenmäßig liegen die berechneten Frequenzen etwa 25% zu tief.

Unter Berücksichtigung der Austauschkräfte zwischen den Nukleonen erzielte WILD¹ eine Verbesserung der Resultate. Die Frequenzen weichen nunmehr nur noch etwa 5% von den experimentellen Werten ab.

Die Frage nach dem Zustandekommen der Dämpfungsbreite der Resonanzlinien blieb in beiden Theorien unbeantwortet. Die Dämpfungskonstante wurde vielmehr als eine phänomenologische Größe in die Theorie übernommen.

Modellvorstellungen für den Dämpfungsprozeß wurden in einer Arbeit von WILDERMUTH⁴ und von REIFMAN⁵ angegeben.

REIFMAN nimmt an, daß die Nukleonen sich im Kerninnern praktisch reibungsfrei bewegen: Für die Energiedissipation ist dann allein die Kopplung mit den Oberflächenschwingungen verantwortlich. Die Dämpfungsbreiten kommen dabei etwa um den Faktor 4 zu groß heraus.

Im Gegensatz hierzu wurden in der Arbeit von WILDERMUTH⁴ gerade die inneren Stöße der Nukleonen untereinander als Ursache der Dämpfung angesehen. Unter stark vereinfachenden Annahmen, die hauptsächlich die Dichte der Energieniveaus der Endzustände und die Beschreibung des kollektiven Schwingungszustandes betreffen, wurde dort die Energiebreite abgeschätzt. Das Ergebnis stimmt recht gut mit den experimentellen Werten⁶ überein.

Ziel dieser Arbeit ist es nun, diesen Gedanken mit Hilfe der in einer Arbeit von WILD¹ entwickelten Hydrodynamik weiterzuführen und die allzustark vereinfachenden Annahmen der früheren Arbeit zu vermeiden.

Im ersten Abschnitt werden wir die für uns wichtigen Gleichungen der Kernhydrodynamik referieren, im zweiten Abschnitt unser Modell für den Dämpfungsprozeß entwickeln, während die übrigen Abschnitte den Einzelheiten der Rechnung vorbehalten sind. Im letzten Abschnitt werden wir die Ergebnisse diskutieren.

1. Annäherungsfunktionen der Kernhydrodynamik

Für einen Atomkern aus A Nukleonen kann einer strengen quantenmechanischen Behandlung die

¹ W. WILD, „Tröpfchenmodell des Atomkerns und Zweikörperkräfte“, Bayr. Akad. 1956.

² M. GOLDHABER u. E. TELLER, Phys. Rev. **74**, 1046 [1948].

³ J. H. D. JENSEN u. H. STEINWEDEL, Z. Naturforschg. **5 a**, 413 [1948].

⁴ K. WILDERMUTH, Z. Naturforschg. **10 a**, 447 [1955].

⁵ A. REIFMAN, Z. Naturforschg. **8 a**, 502 [1953].

⁶ R. MONTALBETTI u. a., Phys. Rev. **91**, 659 [1953].

SCHRÖDINGER-Gleichung

$$(i\hbar \partial/\partial t - H) \Phi(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_A) = 0 \quad (1)$$

zugrunde gelegt werden. \bar{r}_i faßt die Orts- (\mathbf{r}), Spin- (s) und Ladungskoordinaten (t) zusammen, während H den HAMILTON-Operator bedeutet. H setzt sich zusammen aus der kinetischen Energie und den Potentialen der Zweikörperkräfte, die aus Streuexperimenten gewonnen werden können:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^A \mathcal{A}_j + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k}^A V_{ik}. \quad (2)$$

Von Mehrkörperkräften bzw. einem „Hardcore“ der Kernkräfte (so z. B. Anm. ⁷), die zur Erzielung der Absättigung notwendig sind, sehen wir ab. Statt dessen beschreiben wir näherungsweise die Absättigung, indem wir die Inkompressibilität der Kernmaterie zusätzlich berücksichtigen (vgl. Anm. ⁸).

Verträglich mit den Proton – Neutron-Streuversuchen bis zu einer Energie von etwa 50 MeV im Schwerpunktsystem ist der Potentialansatz (s. z. B. Anm. ¹, Abschn. 2, Gl. 5):

$$V(r) = \begin{cases} -1 & \text{für } r \leq \beta \\ 0 & \text{für } r \geq \beta \text{ mit} \end{cases} \quad (3)$$

$\beta = 2,07 \cdot 10^{-13}$ cm und den Konstanten

$$M = W = 14,45 \text{ MeV} \text{ und} \quad (4)$$

$B = H = 2,85 \text{ MeV}$ für die WIGNER-Kraft und die MAJORANA-, BARTLETT- und HEISENBERG-Austauschkräfte ⁹.

Für die Kräfte zwischen gleichen Teilchen (Neutron – Neutron bzw. Proton – Proton) machen wir den gleichen Ansatz. Wir stützen uns dabei auf die Hypothese der Ladungsunabhängigkeit der Kernkräfte, deren Gültigkeit bis zu Energien von etwa 40 MeV bisher noch nicht auf Widerspruch gestoßen ist ¹ und die auch für größere Energien noch häufig Anwendung findet. Die COULOMB-Kräfte vernachlässigen wir generell. Ihr Einfluß auf die Resonanzfrequenzen ist sehr gering; bei den schwersten Kernen bewirken sie nur eine Verschiebung ¹ von ω um 4%.

Für den Dämpfungsprozeß spielen die COULOMB-Kräfte ebenfalls nur eine geringe Rolle, da

1. das Potential der COULOMB-Kräfte klein ist gegenüber dem der Kernkräfte und

2. die COULOMB-Kräfte infolge ihrer großen Reichweite praktisch nur zu einem Pauschalpotential beitragen, das im Kerninnern nahezu konstant ist.

Auch bei dem einfachen Ansatz (3), (4) für die V_{ik} haben wir es immer noch mit einem sehr komplizierten Mehrkörperproblem zu tun, dessen Lösung mit den derzeitigen mathematischen Hilfsmitteln unlösbar ist, so daß wir Näherungsmethoden anwenden müssen.

Die in der Arbeit von WILD ¹ entwickelte Kernhydrodynamik bildet mit einer geeignet ausgewählten Annäherungsfunktion den Energieerwartungswert

$$H_{kl} = (\Phi, H, \Phi) \quad (5)$$

und drückt in diesem sämtliche vorkommenden Variablen durch die lokalen Dichten ϱ_j und die resultierenden Strömungsgeschwindigkeiten v_j der 4 Teilchensorten P_+ (Index 1), P_- (Index 2), N_+ (Index 3), N_- (Index 4) aus. Als Teilchensorten unterscheiden wir dabei:

$$\begin{aligned} P_+ &= \text{Protonen mit Spin parallel zu einer ausgezeichneten Richtung,} \\ P_- &= \text{Protonen mit Spin antiparallel,} \\ N_+ &= \text{Neutronen mit Spin parallel,} \\ N_- &= \text{Neutronen mit Spin antiparallel zu dieser Richtung.} \end{aligned} \quad (6)$$

Der Energieausdruck $H_{kl} = H(\varrho_j, v_j)$ zusammen mit Kontinuitätsgleichungen, die einen Zusammenhang zwischen ϱ_j und v_j aus der SCHRÖDINGER-Gleichung ableiten, bildet den Ausgangspunkt für die mit rein klassischen Methoden zu gewinnenden hydrodynamischen Grundgleichungen. Aus diesen Grundgleichungen können ganz entsprechend dem Vorgehen von STEINWEDEL und JENSEN die verschiedenen kollektiven Schwingungsformen der Kernmaterie abgeleitet werden.

Die Annäherungsfunktion Φ lehnt sich eng an das THOMAS-FERMI-Modell für den Atomkern an. Φ wird angesetzt als Determinante aus Einteilchenfunktionen $\psi_l(\bar{r}_j)$:

$$\Phi = (A!)^{-1/2} \text{Det}_{lj}(\psi_l(\bar{r}_j)). \quad (7)$$

Die $\psi_l(\bar{r}_j)$ setzen sich aus mehreren Faktoren zusammen:

$$\psi_l(\bar{r}_j) = \delta_n(s_j) \delta_m(t_j) \bar{\varphi}_l(\bar{r}_j) e^{i \Delta t_l \bar{r}_j} e^{i f_k(g_k)^{1/2}}. \quad (8)$$

⁷ K. A. BRUECKNER, C. A. LEVINSON u. H. M. MAHMOUD, Phys. Rev. **95**, 217 [1954].

⁸ W. WILD u. K. WILDERMUTH, Z. Naturforschg. **9a**, 799 [1954].

⁹ W. HEISENBERG u. W. MACKE, „Theorie der Atomkerne“, Göttingen 1951.

Die beiden ersten Faktoren beziehen sich auf Spin und Ladungsspin

$$\delta_n(s_j) = \begin{cases} 0 & \text{für } n \neq s_j, \\ 1 & \text{für } n = s_j \end{cases} \quad (9)$$

[entsprechend $\delta_m(t_j)$] und zeigen, daß die Einteilchenfunktion (8) ein Teilchen einer wohlbestimmten Teilchensorte (6) darstellt.

$\bar{\varphi}_l(\mathbf{r}_j)$ sind die im THOMAS-FERMI-Modell verwendeten ebenen Wellen; diese sind Eigenfunktionen für ein würfelförmiges Normierungsvolumen von Kerngröße mit periodischen Randbedingungen. Ist L^3 das Kernvolumen, so ist

$$\bar{\varphi}_l(\mathbf{r}_j) = L^{-3/2} e^{i \mathbf{k}_l \cdot \mathbf{r}_j} \quad (10)$$

$$\text{mit } \mathbf{k}_l = k_0(n_x, n_y, n_z), \quad k_0 = 2\pi/L \quad (11)$$

und ganzen Zahlen n_i .

Der Faktor $e^{i \Delta \mathbf{k}_l \cdot \mathbf{r}_j}$ beschreibt eine lokale Variation der Wellenzahl \mathbf{k}_l . In $\Delta \mathbf{k}_l$ ist eine Abhängigkeit von der Zeit und vom Ort zugelassen, die für jede Funktion ψ_l anders lauten kann. In $\Delta \mathbf{k}_l$ soll keine resultierende Strömungsgeschwindigkeit enthalten sein; diese wird vielmehr durch den Faktor $e^{i f_j}$ gegeben, der ebenso wie g_j neben Ort und Zeit nur von der Teilchensorte (charakterisiert durch den Index j) abhängt. g_j schließlich beschreibt eine Variation der lokalen Dichte der Teilchensorte.

In der Arbeit von WILD¹ wird der Zusammenhang zwischen den Größen ϱ_j und v_j und den f_j , g_j und $\Delta \mathbf{k}_l$ hergeleitet. Wir wollen uns daher hier kurz fassen und nur die Ergebnisse angeben.

Bedeutet N_j die Zahl der Teilchen der Sorte j und sei mit $\bar{\varrho}_j$ die mittlere Teilchendichte dieser Sorte bezeichnet:

$$\bar{\varrho}_j = N_j/L^3, \quad (12)$$

so erhält man

$$g_j = \varrho_j/\bar{\varrho}_j \quad (\text{s. Anm.}^1, \text{Gl. 5,31}), \quad (13)$$

$$\text{sowie } v_j = (\hbar/m) \cdot \text{grad } f_j \quad (\text{s. Anm.}^1, \text{Gl. 5,16}). \quad (14)$$

Um den Zusammenhang zwischen den $\Delta \mathbf{k}_l$ und den g_j zu erkennen, fragen wir nach orthogonalen Einteilchenfunktionen, die in einem würfelförmigen Normierungsvolumen $N = L^3$ eine ortsabhängige Dichte beschreiben. Einem Gedanken von MACKE¹⁰ folgend, betrachten wir zunächst die Funktionen

$$\varphi_n(\mathbf{x}) = L^{-3/2} \exp(i \mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x}) \quad (15)$$

mit obigen \mathbf{k}_n (11).

¹⁰ W. MACKE, Phys. Rev. **100**, 992 [1955].

Diese Einteilchenfunktionen sind in einem abstrakten Raum X definiert und führen dort zu einer im Normierungsvolumen V konstanten Dichte. Wir bilden nun den Raum X auf den physikalischen Raum R ab. Dabei soll das Normierungsvolumen V in ein gleiches im Raum R übergehen: $N = V = L^3$. Die Abbildung wird beschrieben durch

$$\mathbf{x} = \mathbf{f}(\mathbf{r}). \quad (16)$$

Die Einteilchenfunktionen

$$\psi_l(\mathbf{r}) = L^{-3/2} \exp[i \mathbf{k}_l \cdot \mathbf{f}(\mathbf{r})] \cdot [\partial(\mathbf{x})/\partial(\mathbf{r})]^{1/2} \quad (17)$$

sind dann im Raum R mit dem Normierungsvolumen N orthogonal. Dabei bedeutet $\partial(\mathbf{x})/\partial(\mathbf{r})$ die Funktionaldeterminante der Abbildung (16). Für die Dichte erhält man

$$\varrho = \sum \psi_l^*(\mathbf{r}) \psi_l(\mathbf{r}) = \bar{\varrho} \partial(\mathbf{x})/\partial(\mathbf{r}). \quad (18)$$

Die lokale Dichteänderung wird also gerade durch die Funktionaldeterminante beschrieben, während die lokale Änderung der Wellenzahl unmittelbar mit der Transformation zusammenhängt.

$$\mathbf{r}(\mathbf{k}_l + \Delta \mathbf{k}_l) = \mathbf{f}(\mathbf{r}) \mathbf{k}_l \quad (19)$$

$$\text{oder } \Delta k_{lx} = k_{lx} [f_x(\mathbf{r}) - x]/x \quad (20)$$

für die x -Komponente; entsprechende Gleichungen gelten für die beiden anderen Komponenten.

Die Transformation (16) bedeutet physikalisch eine Verzerrung der einzelnen Volumenelemente; das Anwachsen der Wellenzahl geht in jeder Richtung ganz genau so vor sich wie das Anwachsen der Wellenzahl im eindimensionalen Potentialtopf bei Veränderung der Topfbreite.

Wir legen die x -Achse in die Richtung der elektrischen Feldstärke der einfallenden γ -Strahlung. Dann werden Kollektivschwingungen nur in dieser Richtung angeregt, und wir versuchen für die Dichteschwingungen den Ansatz (j charakterisiert die Teilchensorte):

$$\Delta k_{lx} = k_{lx} a_j(x), \quad \Delta k_{ly} = \Delta k_{lz} = 0. \quad (21)$$

Die zugehörige Transformation (16) ist:

$$\mathbf{x} = [1 + a_j(x)] \mathbf{x}, \quad \mathbf{x}_y = y, \quad \mathbf{x}_z = z. \quad (22)$$

Aus der Bedingung, daß die Funktionaldeterminante der Abbildung gleich der lokalen Dichteänderung ist, erhalten wir nun eine Differentialgleichung für a_j :

$$g_j = 1 + a_j + x \frac{da_j}{dx}. \quad (23)$$

Unser Ansatz weicht ein wenig von dem entsprechenden bei WILD ab. Man überlegt sich aber leicht, daß diese Abweichungen in der zur Diskussion stehenden

Näherung keinen Einfluß auf H_{kl} haben, sondern erst bei Berücksichtigung von Gliedern höherer Ordnung von Bedeutung sind. Auf eine Diskussion, wie weit diese erste Näherung für H_{kl} und die Kontinuitätsgleichungen berechtigt ist, wollen wir hier nicht eingehen, da sie uns zu weit in die Einzelheiten der hydrodynamischen Theorie führen würde, die für unser Modell unwesentlich sind¹.

Wir knüpfen nun an die Gleichung

$$H_{kl} = \int dr \left\{ \frac{1}{2} m \left[\sum_i \varrho_i \mathfrak{v}_i^2 + \sum_{i,k} \frac{\mu_{ik}}{2} (\mathfrak{v}_i - \mathfrak{v}_k)^2 \right] + (3 h^2/10 m) (3/4 \pi)^{2/3} \varrho_i^{5/3} + \sum_{i,k} \alpha_{ik} \varrho_i \varrho_k \right\} \quad (s. Anm. 1, Gl. 6,30) \quad (24)$$

und die Kontinuitätsgleichung

$$\partial \varrho_i / \partial t = - \operatorname{div} \left[\varrho_i \mathfrak{v}_i + \sum_{k=1}^4 \mu_{ik} \varrho_i \varrho_k (\mathfrak{v}_i - \mathfrak{v}_k) \right] \quad (25)$$

an. In H_{kl} haben wir bereits die von den COULOMB-Kräften, den Mehrkörperkräften und den äußeren Kräften herrührenden Anteile weggelassen. Die Konstanten α_{ik} und μ_{ik} lassen sich aus dem Potential

$V(r)$ [(3), (4)] sowie den Konstanten M , W , B und H berechnen. Da wir diese Konstanten nur unter speziellen Voraussetzungen benötigen, sehen wir von expliziten Zahlenangaben im Augenblick ab.

Vom Standpunkt der Hydrodynamik bedeuten in H_{kl} die Glieder, die \mathfrak{v}_j enthalten, die kinetische Energie der Nukleonenströmung, während die übrigen Glieder die potentielle Energie darstellen. Zu dem rein konvektiven Anteil $\varrho_j \mathfrak{v}_j^2$ der Strömung kommt, von den Austauschkräften herrührend, noch der Bestandteil $\frac{1}{2} m \sum_{i,k} \frac{1}{2} \mu_{ik} \varrho_i \varrho_k (\mathfrak{v}_i - \mathfrak{v}_k)^2$ hinzu.

Als Randbedingung haben wir zu fordern – wenn wir von der Kopplung mit den Oberflächenschwingungen absehen –, daß die Normalkomponenten der \mathfrak{v}_j am Rande verschwinden.

H_{kl} und die Kontinuitätsgleichung wollen wir nun für kleine Abweichungen e_i von den mittleren Dichten $\bar{\varrho}_i$ für den durch (ϱ_0 = Gesamtdichte)

$$\bar{\varrho}_i = \varrho_0/4 \quad (26)$$

charakterisierten „Normalkern“ weiterbehandeln.

e_i und \mathfrak{v}_i sehen wir als klein von erster Ordnung an und erhalten:

$$H_{kl} = \int dr \left\{ \frac{1}{2} m (\varrho_0/4) \sum_i \mathfrak{v}_i^2 + \frac{1}{2} m \sum_{i,k} \frac{1}{2} \mu_{ik} (\varrho_0^2/16) (\mathfrak{v}_i - \mathfrak{v}_k)^2 + \sum_i (3 h^2/10 m) (3/4 \pi)^{2/3} (\varrho_0/4)^{-1/3} \left[\left(\frac{\varrho_0}{4} \right)^2 + \frac{5}{3} e_i \frac{\varrho_0}{4} + \frac{5}{9} e_i^2 \right] \right\} + \sum_{i,k} \alpha_{ik} \left[\frac{\varrho_0^2}{16} + \frac{\varrho_0}{4} (e_i + e_k) + e_i e_k \right], \quad (27)$$

$$\partial e_i / \partial t = - (\varrho_0/4) \operatorname{div} \mathfrak{v}_i - \sum_k \mu_{ik} (\varrho_0^2/16) \operatorname{div} (\mathfrak{v}_i - \mathfrak{v}_k). \quad (28)$$

Führt man nun neue Variable ein:

$$\xi_i = \sum_k g_{ik} e_k \quad \mathfrak{w}_i = \sum_k g_{ik} \mathfrak{v}_k \quad \text{mit} \quad g_{ik} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (29)$$

so folgt

$$H_{kl} = \int dr \left\{ (m \varrho_0/32) \sum_j [1 + (\nu_i - \nu_j) (\varrho_0/4)] \cdot \mathfrak{w}_j^2 + 1/8 \cdot \sum_j \delta_j \xi_j^2 + \xi_1 [(h^2/2 m) (3 \varrho_0/16 \pi)^{2/3} + \frac{1}{2} \beta_1 \varrho_0] + (3 h^2/10 m) (3 \varrho_0/16 \pi)^{2/3} + \varrho_0^2 \beta_1/4 \right\} \quad (30)$$

und

$$\dot{\xi}_k = - (\varrho_0/4) [1 + (\nu_1 - \nu_k) (\varrho_0/4)] \operatorname{div} \mathfrak{w}_k. \quad (31)$$

$\varrho_0 + \xi_1$ bedeutet die lokale Gesamtdichte, während ξ_2 den lokalen Protonenüberschuß und ξ_3 den lokalen Überschuß an Plusspinteilchen beschreibt. (Entsprechendes gilt für die Geschwindigkeiten w_i .) In (30) und (31) haben wir bereits berücksichtigt, daß für den „Normalkern“ gilt:

$$\begin{aligned}\alpha_{11} &= \alpha_{22} = \alpha_{33} = \alpha_{44}, \\ \alpha_{12} &= \alpha_{21} = \alpha_{43} = \alpha_{34}, \\ \alpha_{13} &= \alpha_{31} = \alpha_{24} = \alpha_{42}, \\ \alpha_{14} &= \alpha_{41} = \alpha_{23} = \alpha_{32},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}0 &= \mu_{11} = \mu_{22} = \mu_{33} = \mu_{44}, \\ \mu_{12} &= \mu_{21} = \mu_{43} = \mu_{34}, \\ \mu_{13} &= \mu_{31} = \mu_{24} = \mu_{42}, \\ \mu_{14} &= \mu_{41} = \mu_{23} = \mu_{32}.\end{aligned}\quad (32)$$

Wir haben ferner die Abkürzungen eingeführt:

$$\begin{aligned}\sum_j \mu_{1j} g_{jk} &= \nu_k, \quad \sum_j \alpha_{1j} g_{jk} = \beta_k, \\ \delta_j &= (h^2/3m) (3/4\pi)^{1/2} (\varrho_0/4)^{-1/2} + 2\beta_j.\end{aligned}\quad (33)$$

Man sieht, daß in den Gln. (30) und (31) keine Kopplungsterme zwischen den verschiedenen Paaren von Variablen w_j und ξ_j auftreten, es sind also alle Dichteveränderungen in diesen Koordinaten voneinander unabhängig. Insbesondere ist $\xi_1 = 0$ eine mögliche Lösung. Sie bedeutet konstante Gesamtdichte und zeigt, daß Inkompressibilität der Kernmaterie mit den Gleichungen verträglich ist.

Wir interessieren uns nur für die Ladungsschwingungen. Diese werden bei konstanter Gesamtdichte durch ξ_2 , w_2 beschrieben. Da die Neutronen ungeladen sind, gibt dann $\frac{1}{2}\xi_2$ die lokale Abweichung von der mittleren Ladungsdichte an. Wir setzen daher

$$\xi_1 = \xi_3 = \xi_4 = w_1 = w_3 = w_4 = 0. \quad (34)$$

Für w_2 führen wir ein Geschwindigkeitspotential ein, was im Rahmen dieser Theorie stets möglich ist, da sich w_j linear aus den v_k zusammensetzt, die ihrerseits ein Potential besitzen (14). Der allgemeine Ansatz

$$U = \sum_k A_k h_k(r), \quad (35)$$

in welchem die h_k folgenden Bedingungen genügen:

$$\begin{aligned}\Delta h_l(r) &= k_l^2 h_l(r), \quad \frac{\partial h_l}{\partial n} \text{ am Kernrand} = 0, \\ \int h_k^* h_l d\tau &= \delta_{kl},\end{aligned}\quad (36)$$

erfüllt bereits die Randbedingungen für die w_j . Mit der Abkürzung

$$dB_r/dt = (2/L^3)^{1/2} (k_r^2/4) \left[1 + \frac{1}{2} \varrho_0 (\mu_{13} + \mu_{14}) \right] A_r \text{ folgt} \quad (37)$$

$$\xi_2 = \sum_k B_k h_k \varrho_0 (L^3/2)^{1/2} \quad (38)$$

und für den Teil von H_{kl} , der ξ_2 und w_2 enthält:

$$H_{\text{osc}} = \sum_{\mu} L^3 (\varrho_0/4) \cdot \left(\frac{m}{k_{\mu}^2 [1 + \frac{1}{2} \varrho_0 (\mu_{13} + \mu_{14})]} \dot{B}_{\mu}^2 + \frac{\varrho_0}{4} \delta_2 B_{\mu}^2 \right). \quad (39)$$

Wir beschränken uns nur auf die Grundschwingung und können für diese schreiben:

$$H_{\text{osc}} = L^3 \varrho_0/4 \left(\frac{m}{k^2 [1 + \frac{1}{2} \varrho_0 (\mu_{13} + \mu_{14})]} \dot{B}^2 + \frac{\varrho_0}{4} \delta_2 B^2 \right). \quad (40)$$

Für die Grundschwingung erhalten wir bei würfelförmigem Kernvolumen:

$$h(r) = (2/L^3)^{1/2} \sin(\pi r/L) \quad \text{mit } k = \pi/L. \quad (41)$$

WILD¹ hat die Gleichungen auch auf einen kugelförmigen Kern angewandt und erhielt:

$$h(r) = N \cos \vartheta j_l(kr) \quad \text{mit } k = 2,08/R \quad (42)$$

(R = Kugelradius, N = Normierungsfaktor).

Bei gleichem Volumen von Würfel und Kugel erhält man nahezu die gleiche Wellenzahl k :

$$k_{\text{Würfel}} = 3,14/L, \quad k_{\text{Kugel}} = 3,34/L. \quad (43)$$

Die Abweichung beträgt etwa 5%. Daher unterscheiden sich die Resonanzenergien auch nur um etwa 5%, so daß es für die Abschätzung der Energiebreite in erster Näherung belanglos ist, welche Gestalt für das Kernvolumen zugrunde gelegt wird. Es ist:

$$\hbar \omega = \hbar k \left\{ \frac{\delta_2 \varrho_0 [1 + \frac{1}{2} \varrho_0 (\mu_{13} + \mu_{14})]}{4m} \right\}^{1/2}. \quad (44)$$

Zahlenmäßig ergibt sich

$$\begin{aligned}\delta_2 &= 1,906 \cdot 10^{-36} \text{ cm}^3 \text{ MeV}, \\ 1 + \frac{1}{2} \varrho_0 (\mu_{13} + \mu_{14}) &= 1,50\end{aligned}\quad (45)$$

und somit $\hbar \omega = 70,8 \cdot A^{-1/3} \text{ MeV}$ (46)

für ein würfelförmiges Kernvolumen.

A	27	64	125	216	260
$\hbar \omega_{\text{theor.}}$	23,6	17,7	14,2	11,8	11,1

Tab. 1.

Für die Grundschwingung erhalten wir weiter

$$\xi_2 = \varrho_0 B \cdot \sin(\pi x/L), \quad (47)$$

und damit folgt für die in der Einteilchenfunktion $\psi_l(r_j)$ (8) vorkommenden Faktoren:

$$\begin{aligned} g_{P_+} &= [1 + B \sin(\pi x/L)] = g_{P_-}, \\ g_{N_+} &= [1 - B \sin(\pi x/L)] = g_{N_-}, \\ h_{P_+} = h_{P_-} &= -h_{N_+} = -h_{N_-} \\ &= \frac{m L^3}{\hbar \pi^2 [1 + \frac{1}{2} \varrho_0 (\mu_{13} + \mu_{14})]} \sin \frac{\pi x}{L} \frac{dB}{dt}. \end{aligned} \quad (48)$$

Die Δf_l sind aus der Differentialgleichung (23) zu errechnen; deren Lösung ist:

$$a = \pm B \frac{1 - \cos(\pi x/L)}{\pi x/L}. \quad (49)$$

Daher folgt

$$\begin{aligned} \text{für } P_+ \text{ und } P_-: \Delta k_{lx} &= k_{lx} B \frac{1 - \cos(\pi x/L)}{\pi x/L}, \\ \text{für } N_+ \text{ und } N_-: \Delta k_{lx} &= -k_{lx} B \frac{1 - \cos(\pi x/L)}{\pi x/L}. \end{aligned} \quad (50)$$

Und für die Einteilchenfunktionen (8) erhalten wir:

$$\begin{aligned} \psi_n(r) &= \delta_m(t) \delta_n(s) \exp \left\{ \frac{2 \pi i n r}{L} + \frac{2 \pi i}{L} n_x x B t \frac{1 - \cos(\pi x/L)}{\pi x/L} \right\} \sqrt{1 + t B \sin \frac{\pi x}{L}} \\ &\quad \cdot \exp \left\{ i \frac{m L^2 t}{\hbar \pi^2 [1 + \frac{1}{2} \varrho_0 (\mu_{13} + \mu_{14})]} \dot{B} \sin \frac{\pi x}{L} \right\}, \end{aligned} \quad (51)$$

$$\begin{aligned} t &= \begin{cases} +1 & \text{für Protonen,} \\ -1 & \text{für Neutronen,} \end{cases} \\ s &= \begin{cases} +1 & \text{für Plusspinteilchen,} \\ -1 & \text{für Minusspinteilchen.} \end{cases} \end{aligned}$$

2. Modell für den Dämpfungsprozeß

Für die Dipolschwingung der Protonengesamtheit gegen die Neutronengesamtheit liegen die Anregungsenergien im Bereich von 30 MeV für Atomgewichte $A \approx 20$ bis zu etwa 10 MeV bei $A \approx 250$. Zur Anregung von Oberflächenschwingungen sind in den angegebenen Grenzen etwa 4 bis 1 MeV erforderlich¹¹. Es wäre daher energetisch möglich, daß diese Oberflächenschwingungen zu einer Feinstruktur der Energieniveaus Veranlassung geben, entsprechend den Rotationstermen in den Molekülspektren. Die experimentellen Kurven liefern dafür aber keinerlei Hinweise⁶.

Der Grund für das Fehlen von Oberflächenschwingungen ist in den vollkommen verschiedenen Anregungsbedingungen zu suchen: Die Oberflächenschwingungen werden durch den Quadrupolanteil der einfallenden γ -Strahlung angeregt. Dieser Anteil ist sehr viel schwächer als der Dipolanteil, der die Schwingung der Protonen gegen die Neutronen anregt. Wir wollen daher im folgenden von Anregungen der Oberflächenschwingungen absehen und die Keroberfläche als starr annehmen. Von dieser Vor-

aussetzung haben wir bereits bei der Ableitung der Schwingungsgleichungen Gebrauch gemacht.

Als Ursache der Energiebreite der Schwingungen der Protonen gegen die Neutronen sehen wir die Wechselwirkung der einzelnen Nukleonen untereinander an, die ja letzten Endes auch die Koppelung der verschiedenen Formen der Oberflächenschwingungen vermitteln muß. Wir gehen nun zur Betrachtung des Schwingungszustandes im Impulsraum über und knüpfen an das THOMAS-FERMI-Modell für den Atomkern an.

Zunächst betrachten wir den Grundzustand des Kerns. In diesem Zustand füllen die Nukleonen jeder Teilchensorte jeweils sämtliche Impulszellen innerhalb der zu dieser Teilchensorte gehörenden Grenzimpulskegel, der sogenannten FERMI-Kugel, deren Radius in guter Näherung unabhängig vom Atomgewicht ist und durch die FERMI-Grenzenergie von 24,5 MeV bestimmt ist. Als Stöße der Nukleonen bezeichnen wir Prozesse, die zwei oder mehr Teilchen (i, k, \dots) aus gewissen Impulszellen (f_i, f_k, \dots) in andere Impulszellen (f'_i, f'_k, \dots) überführen. Ein bloßer Tausch der Impulszellen zweier Teilchen gilt nicht als Stoß, da wegen der Ununterscheidbarkeit der Teilchen dabei die gesamte Impulskonfiguration unverändert bleibt. Wir können dann sagen: Im Grundzustand sind Stöße zwischen den Nukleonen aus energetischen Gründen nicht möglich.

Dieses ändert sich, sobald wir angeregte Zustände betrachten. Die Kollektivschwingung, bei der die Anregungsenergie pro Teilchen klein ist gegenüber der Grenzenergie, lockert die Ränder der FERMI-

¹¹ A. BOHR u. B. R. MOTTELSON, Dan. Mat. Fys. Medd. 27, Nr. 16 [1953].

Kugeln ein wenig auf. Nun können unter Erfüllung des Energiesatzes sowie des Impulssatzes Stöße zwischen den Nukleonen erfolgen. Diese Stöße führen die geordnete Dipolschwingung allmählich in eine ungeordnete Bewegung der Nukleonen im Kern über. Die Energieunschärfe der Dipolschwingung hängt nach der HEISENBERGSCHEN Unschärferelation mit der mittleren Lebensdauer t des kollektiven Schwingungszustandes zusammen:

$$\Delta E = \hbar/t \quad (52)$$

und diese wiederum mit der Übergangswahrscheinlichkeit W des Schwingungszustandes in andere Zustände:

$$t = 1/W. \quad (53)$$

Wir erhalten daher $\Delta E = \hbar W$. (54)

Die mit den Stößen der Nukleonen verbundenen Übergangswahrscheinlichkeiten W gilt es zu berechnen. Wir wenden die zeitabhängige Störungsrechnung an und gehen in 3 Schritten vor:

1. Berechnung der Auflockerung in der Randzone der FERMI-Kugeln durch FOURIER-Zerlegung der Näherungsfunktion nach ebenen Wellen,
2. Berechnung des Übergangsmatrixelementes sowie der Zahl der Endzustände,
3. Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit W .

Wir haben eben davon gesprochen, daß bei den Nukleonenstößen der Energie- und der Impulserhaltungssatz erfüllt sein muß. Der Energiesatz folgt, wenigstens näherungsweise, aus der zeitabhängigen Störungsrechnung: Es tragen nur diejenigen Matrixelemente der Wechselwirkungsenergie wesentlich zur Übergangswahrscheinlichkeit bei, bei denen die Energie im Anfangszustand nahezu gleich der des Endzustandes ist. Daß auch noch der Impulssatz gilt, werden wir in Abschnitt 4 sehen.

Als Ausgangspunkt für die Berechnung der Besetzungswahrscheinlichkeiten der einzelnen Zellen im Impulsraum wählen wir die im vorigen Abschnitt aus der Kernhydrodynamik abgeleitete Näherungsfunktion Φ (7); diese müssen wir zuvor allerdings noch etwas abändern. Zunächst kehren wir zurück zur HAMILTON-Funktion für die Dichteschwingung (40). Wir bezeichnen den zu B kanonisch konjugierten Impuls mit P :

$$P = \varrho_0 L^3 m/4 k^2 [1 + \frac{1}{2} \varrho_0 (\mu_{13} + \mu_{14})] dB/dt \quad (55)$$

und erhalten

$$H_{\text{osc}} = \frac{k^2 [1 + \frac{1}{2} \varrho_0 (\mu_{13} + \mu_{14})]}{m \varrho L^3} P^2 + L^3 \varrho_0^2 \delta_2 B^2 / 16. \quad (56)$$

Der Übergang zur quantenmechanischen Beschreibung der Dichteschwingung läßt sich nun auf 2 Arten vollziehen:

1. Wir sehen B als Multiplikationsoperator und $P = \hbar/i \cdot d/dB$ als Differenzionsoperator an, mit anderen Worten, wir wählen eine Darstellung, in der B diagonal ist. Dann tritt B als Veränderliche in den Oszillator-Eigenfunktionen auf:

$$u_n(B) = (a/2^n n! \pi^{1/2})^{1/2} H_n(aB) \exp[-\frac{1}{2}(aB)^2] \quad (57)$$

mit

$$a^4 = m \varrho_0 \delta_2 A^2 / 16 \hbar^2 k^2 [1 + \frac{1}{2} \varrho_0 (\mu_{13} + \mu_{14})]. \quad (58)$$

A bedeutet das Atomgewicht und H_n das n -te hermitesche Polynom.

2. Die Darstellung, in der P diagonal wird, liefert P als Veränderliche:

$$v_n(P) = (b/2_n n! \pi^{1/2})^{1/2} H_n(bP) \exp[-\frac{1}{2}(bP)^2] \quad (59)$$

mit $b = 1/\hbar a$.

$|u_n(B)|^2 dB$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, in der n -ten Anregungsstufe eine Amplitude zwischen B und $B + dB$ anzutreffen. Dabei kann über die kanonisch konjugierte Variable keine Aussage gemacht werden. Ganz entsprechend läßt sich $v_n(P)$ deuten.

Wir wollen nun in der Annäherungsfunktion Φ die Dichteschwingung quantenmechanisch beschreiben. Es tritt dabei die Schwierigkeit auf, daß in der Wellenfunktion Φ neben B auch die zeitliche Ableitung von B vorkommt. Wir betrachten die beiden Näherungen:

A. Wir vernachlässigen sämtliche Faktoren, die dB/dt enthalten und gelangen zu einer Näherung, die nur die lokalen Dichteänderungen berücksichtigt.

B. Wir vernachlässigen sämtliche Faktoren, die B enthalten und gelangen zu einer Näherung, die nur die Kollektivströmung beschreibt.

Wir werden sehen, daß zur Erklärung der Energiebreite die Näherung B vollständig ausreicht. Daher führen wir die folgenden Rechnungen auch nur für diese durch. Für A verlaufen die Rechnungen ganz genau so.

Diese beiden Näherungen werden nahegelegt durch Betrachtung der klassischen Größen B und dB/dt , die infolge der harmonischen Zeitabhängigkeit zu verschiedenen Zeiten nur wesentlich von Null verschieden sind. Daher sind die Faktoren, die B bzw. dB/dt enthalten, praktisch getrennt wirksam. Diese letzte Plausibilitätsbetrachtung soll nur die Näherungen etwas veranschaulichen.

Da die Energie der Dichteschwingung klein ist gegenüber der Energie der inneren Bewegung der Nukleonen, können wir den Schwingungsvorgang als adiabatisch ansehen. Das heißt: die innere Bewegung paßt sich sofort dem augenblicklichen Wert der Kollektivkoordinate P an. Wir können dann schreiben:

$$F = (A!)^{-1/2} v_n(P) \operatorname{Det} \psi_i(\mathbf{r}_k, P) \exp(i E_n t / \hbar) \quad (60)$$

mit

$$\psi_i(\mathbf{r}_k, P) = L^{-3/2} \delta(t) \delta(s) \exp(i \mathbf{f}_i \cdot \mathbf{r}) \quad (61)$$

$$\cdot \exp[2 t i P \sin(\pi x/L) / \hbar A],$$

\mathbf{f}_i aus (11) und $v_n(P)$ aus (59).

Der Aufbau dieser Näherungsfunktionen ist weitgehend analog zu den von BORN und OPPENHEIMER für die quantenmechanische Beschreibung von Molekülen verwendeten Eigenfunktionen. Ein Anteil ($\operatorname{Det} \psi_i(\mathbf{r}_k, P)$) der Wellenfunktion beschreibt die innere Bewegung; diese paßt sich in jedem Augenblick dem Parameterwert (P) adiabatisch an, während der andere Faktor (v_n) der verhältnismäßig langsamen Veränderung von P Rechnung trägt.

Wir werden nun die Wellenfunktion F zur Berechnung der Besetzungswahrscheinlichkeiten im Impulsraum verwenden. Dabei werden wir für die Berechnung der Randauflockerung der FERMI-Kugeln näherungsweise A und B als zwei getrennte Prozesse ansehen. Dieses Vorgehen läßt sich dadurch rechtfertigen, daß die Besetzungswahrscheinlichkeiten außerhalb der FERMI-Kugeln sehr klein sind (vgl. Tab. 4 und 5).

Im folgenden benötigen wir die mittlere Amplitude von P . Ein bequemer und für unsere Überlegungen sehr geeigneter Weg für deren Berechnung geht über die mittlere kinetische Energie

$$\frac{1}{2} E = \overline{E_{\text{kin}}} = \frac{P^2 k^2 [1 + \frac{1}{2} \varrho_0 (\mu_{13} + \mu_{14})]}{m \varrho_0 L^3}. \quad (62)$$

Für die Nullpunktsschwingung und die erste Anregungsstufe haben wir für E einzusetzen:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega. \quad (63)$$

Wir erhalten dann für die mittlere Amplitude P_0 der Nullpunktsschwingung einen von Null verschiedenen Zahlenwert

$$P_0 = (\overline{P^2})^{1/2} \neq 0. \quad (64)$$

Das bedeutet, daß bereits im Grundzustand eine Auflockerung in der Randzone der FERMI-Kugeln vorhanden ist. Und zwar ist diese in allen Richtun-

gen gleich groß, ist also isotrop im Gegensatz zu der Auflockerung, die durch die Dipolschwingung verursacht wird. Da wir nur Stöße betrachten, die die geordnete Bewegung in ungeordnete (isotrope) Bewegung überführen, können wir näherungsweise die Nullpunktsschwingungen unberücksichtigt lassen und legen für die Berechnung der mittleren Amplitude P der ersten Anregungsstufe (in der x -Richtung)

$$E_1 - E_0 = E_1' = \hbar \omega \quad (65)$$

zugrunde. Damit erhalten wir (62):

$$P^2 / \hbar^2 = \frac{1}{2} \hbar \omega m \varrho_0 L^3 / \hbar^2 k^2 [1 + \frac{1}{2} \varrho_0 (\mu_{13} + \mu_{14})] = 0,294 A^{1/2}. \quad (66)$$

Unter Berücksichtigung von (45) folgen die Werte in Tab. 2.

A	B^2	$P^2 / \hbar^2 A^2$
64	0,0133	0,0183
125	0,00547	0,0117
216	0,00264	0,0082
260	0,00204	0,0072

Tab. 2.

3. Zerlegung der Näherungsfunktion nach ebenen Wellen

Die Näherungsfunktion Φ , die wir im Abschnitt 1 betrachtet haben, ist ein antisymmetrisches Produkt aus Einteilchenfunktionen. Diese wollen wir nun entwickeln nach antisymmetrischen Produkten von ebenen Wellen, die Eigenfunktionen zu unserem würfelförmigen Normierungsvolumen von Kerngröße sind:

$$\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{y}) = L^{-3/2} \delta_n(s) \delta_m(t) \exp(i \mathbf{f} \cdot \mathbf{r}) \quad (67)$$

mit \mathbf{f} aus (11).

Die Faktoren $\delta_a(b)$ charakterisieren wieder wie in Abschnitt 1 die Teilchensorte. \mathbf{p} faßt die Größen (\mathbf{f}, m, n) zusammen und \mathbf{y} die Koordinaten (\mathbf{r}, s, t) . Mit den Entwicklungskoeffizienten

$$f = \iint \Phi \prod \varphi^*(\mathbf{p}_i, \mathbf{y}_i) d\mathbf{y}_1 \dots d\mathbf{y}_A \quad (68)$$

erhalten wir den gewünschten Ausdruck

$$\Phi = \sum f(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_A) \prod \varphi(\mathbf{p}_i, \mathbf{y}_i). \quad (69)$$

In der Summe in (69) durchläuft jedes \mathbf{p}_i alle möglichen Werte (11) unabhängig von den anderen. In-

folge der Antisymmetrie der Φ gilt

$$f(\mathfrak{p}_1, \dots, \mathfrak{p}_i, \mathfrak{p}_k, \dots) = -f(\mathfrak{p}_1, \dots, \mathfrak{p}_k, \mathfrak{p}_i, \dots) \quad (70)$$

$$\text{und} \quad W(\mathfrak{p}_1, \dots, \mathfrak{p}_A) = |f|^2 \quad (71)$$

gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß Teilchen Nr. 1 den Impuls \mathfrak{p}_1 ** hat, Teilchen Nr. 2 den Impuls \mathfrak{p}_2 usw. Vertauschung zweier Teilchen ändert nach (70) den Wert von W nicht. Hier dürfen wir für den Augenblick die Teilchen als unterscheidbar ansehen, da die Ununterscheidbarkeit vollständig in der Determinantenbildung zum Ausdruck kommt. Summation über alle möglichen Werte von $\mathfrak{p}_3, \dots, \mathfrak{p}_A$ liefert die Wahrscheinlichkeit $W(\mathfrak{p}_1, \mathfrak{p}_2)$ dafür, daß das Teilchen Nr. 1 den Impuls \mathfrak{p}_1 und das Teilchen Nr. 2 den Impuls \mathfrak{p}_2 besitzt, während die übrigen Teilchen beliebige Impulse haben können.

$$W(\mathfrak{p}_1, \mathfrak{p}_2) = [1/A(A-1)] \sum_{i, k=1}^{\infty} \{ |a(i, \mathfrak{p}_1)|^2 |a(k, \mathfrak{p}_2)|^2 - a(i, \mathfrak{p}_1) a^*(k, \mathfrak{p}_1) a(k, \mathfrak{p}_2) a^*(i, \mathfrak{p}_2) \} \quad (72)$$

Darin bedeutet

$$a(i, \mathfrak{p}_k) = \int \psi_i(\mathfrak{y}) \varphi^*(\mathfrak{p}_k, \mathfrak{y}) d\mathfrak{y}, \quad (73)$$

also den Entwicklungskoeffizienten der i -ten Einteilchenfunktion von Φ nach der k -ten Funktion des Funktionensystems. Als Wahrscheinlichkeit dafür, daß irgend ein Teilchen den Impuls \mathfrak{p} hat, erhält

$$\psi_n = \psi_n' e^{ik_x x} \left[1 + \frac{2i P \sin \frac{\pi x}{L}}{\hbar A} + \left(\frac{2i}{\hbar A} \right)^2 \frac{1}{2} P^2 \sin^2 \frac{\pi x}{L} + \dots \right]. \quad (77)$$

Die FOURIER-Zerlegung liefert:

$$\psi_n = \psi_n' \sum_p \exp \frac{2\pi i p x}{L} \left\{ \delta_{np} \left[1 - \left(\frac{P}{\hbar A} \right)^2 \right] + \frac{2P(-1)^{n+p}}{\hbar A \pi} \frac{(n-p)}{(n-p)^2 - \frac{1}{4}} + \delta_{n, p+1} \frac{1}{2} \left(\frac{P}{\hbar A} \right)^2 + \delta_{n, p-1} \frac{1}{2} \left(\frac{P}{\hbar A} \right)^2 \right\}; \quad (78)$$

$k_0 \mathfrak{n} = (2\pi/L)(n_x, n_y, n_z)$ bezeichnet den Impuls des Teilchens im Grundzustand, $k_0 \mathfrak{p} = (2\pi/L)(p_x, p_y, p_z)$ den Impuls im Schwingungszustand. Für die Entwicklungskoeffizienten $a(i, \mathfrak{p}_k)$ (73) erhalten wir daher:

$$|a(n, p)|^2 = \delta_{ny} p_y \delta_{nz} p_z \left\{ \delta_{np} \left(1 - \frac{2P^2}{\hbar^2 A^2} \right) + \frac{4P^2(n-p)^2}{\pi^2 \hbar^2 A^2 [(n-p)^2 - \frac{1}{4}]} \right\}. \quad (79)$$

Dabei haben wir wiederum nur Glieder bis zur 2. Ordnung in P berücksichtigt. \mathfrak{n} charakterisiert die Impulszellen innerhalb der FERMI-Kugeln, die

** Genau genommen müßte es Impuls/ \hbar bzw. Wellenzahlvektor heißen. Wir schreiben aber der Kürze halber immer nur Impuls.

man die Besetzungswahrscheinlichkeit R der Impulszellen:

$$R(\mathfrak{p}) = \sum_i |a(i, \mathfrak{p})|^2. \quad (74)$$

Wir benötigen im folgenden $W(\mathfrak{p}_1, \mathfrak{p}_2)$ nur für den Fall, daß $\mathfrak{p}_1, \mathfrak{p}_2$ zu verschiedenen Teilchensorten (6) gehören, da Stöße zwischen gleichen Teilchen infolge des PAULI-Prinzips in Verbindung mit dem SERBER-Schen Kraftansatz [$W = M, B = H$, vgl. (4)] verboten sind. Dann verschwindet der als zweiter Bestandteil der Summe (72) auftretende Korrelationsterm. W zerfällt in diesem Falle in Faktoren:

$$W(p_1, p_2) = [1/A(A-1)] R(p_1) R(p_2), \quad (75)$$

und die Summe (74) erstreckt sich nurmehr über alle Einteilchenfunktionen der gleichen Teilchensorte wie \mathfrak{p}_i .

Wir wollen nun die $R(\mathfrak{p})$ für unsere Einteilchenfunktionen ψ_i aus (61) wirklich ausrechnen. Die Abhängigkeit der ψ_i von y, z, s, t hat bereits die Form, wie sie von den Funktionen (67) verlangt wird. Wir können daher die FOURIER-Zerlegung auf die x -Abhängigkeit beschränken und kürzen ab:

$$\psi_i' = L^{-3/2} \delta_n(s) \delta_m(t) \exp \{i(k_y y + k_z z)\}. \quad (76)$$

P ist klein. Wir entwickeln den Exponenten nach Potenzen von P und erhalten bis zu Gliedern 2. Ordnung:

zu den Einteilchenfunktionen im Grundzustand gehören.

Das Ergebnis läßt sich folgendermaßen interpretieren: Infolge der δ_{ik} -Faktoren tragen nur solche Teilchen zur Besetzung der Impulszelle \mathfrak{p} bei, die bereits im Grundzustand Zellen besetzen, welche mit

p auf derselben Parallelen zur Schwingungsrichtung (x -Achse) liegt. Die durch die kollektive Schwingung hervorgerufenen Zusatzimpulse haben also nur eine x -Komponente. Die Besetzungswahrscheinlichkeit $R(p)$ hängt daher von der Zahl der Impulszellen ab, die auf einer solchen Parallelen innerhalb der FERMI-Kugel der gleichen Teilchensorte Platz finden. Alle anderen Summanden in (74) verschwinden. Darin steckt also eine Abhängigkeit der R vom Atomgewicht. Hinzu kommt noch eine Abhängigkeit der $|a|^2$ vom Atomgewicht [vgl. (74), (79), (66)] und von der Anregungsenergie über die Amplitude P .

Einfach diskutieren lassen sich nur die Fälle, in denen nahezu eine ungerade Anzahl von Impulszellen auf den Durchmesser der Impulskugeln entfällt, weil dann die Approximation der FERMI-Kugeln durch würfelförmige Impulszellen besonders gut ist. Da wir nur „Normalkerne“ [vgl. Gl. (26)] betrachten, bei denen die Teilchenzahlen der Sorten gleich sind, erhalten wir für folgende Atomgewichte eine ungerade Anzahl z von Zellen auf dem Durchmesser der FERMI-Kugeln:

z	1	3	5	7
A	4	56	260	720

Tab. 3.

Auf die ersten beiden Fälle ist unsere Theorie schlecht anwendbar wegen der allzu geringen Teilchenzahl, da dann die Voraussetzungen für das THOMAS-FERMI-Modell sehr schlecht erfüllt sind. $z=7$ ist wegen der allzu großen Teilchenzahl ohne Interesse. Wir werden daher die weiteren Berechnungen auf $z=5$, d. h. $A=260$, spezialisieren und, so gut es möglich ist, den Gang mit dem Atomgewicht angeben.

Wir bezeichnen mit h_1 , h_3 , h_5 diejenigen Abstände von der p_x -Achse, in denen gerade 1, 3, 5 Impulszellen innerhalb der FERMI-Kugeln Platz haben (Abb. 1). Wegen $z=5$ (s. o.) ist $h_5=0$.

Als Beispiel wollen wir die Besetzungswahrscheinlichkeit in der Zelle P (Abb. 1) für $p=5$ ausrechnen. Sie setzt sich nach (74) zusammen aus den Betrag-Quadraten der 3 FOURIER-Koeffizienten:

$$|a(-1, p)|^2, \quad |a(0, p)|^2, \quad |a(+1, p)|^2,$$

$$\begin{aligned} \text{denn es ist} \quad n_x &= -1 \quad \text{für Zelle A} \\ &= 0 \quad \text{für Zelle B} \\ &= +1 \quad \text{für Zelle C}, \end{aligned}$$

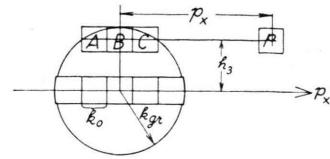


Abb. 1. Erläuterung im Text.

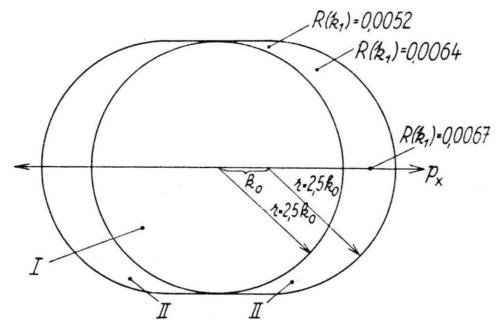


Abb. 2. Die äußere Begrenzung des Bereiches \mathfrak{B} entsteht durch Verschieben der FERMI-Kugeln um $+k_0$ bzw. $-k_0$ in der Schwingungs(p_x)-Richtung. Die p_x -Komponente der Randimpulse wird also um die Länge einer Impulszelle vergrößert. I: nahezu vollständig besetzte FERMI-Kugel; II: Bereich \mathfrak{B} der teilweise besetzten Nachbarzellen.

für $p=5$ ergibt sich speziell nach Gl. (79)

$$\left. \begin{aligned} a(-1, p)^2 \\ a(0, p)^2 \\ a(+1, p)^2 \end{aligned} \right\} = 4 P^2 / \pi^2 \hbar^2 A^2 \left\{ \begin{aligned} \cdot 0,02817, \\ \cdot 0,04081, \\ \cdot 0,06450. \end{aligned} \right.$$

Für P^2 setzen wir die mittlere Amplitude aus Tab. 2 für $A=260$ ein:

$$P^2 / \hbar^2 A^2 = 0,0072$$

und erhalten

$$R(p) = |a(-1, p)|^2 + |a(0, p)|^2 + |a(+1, p)|^2 = 0,00390.$$

Dieser Zahlenwert findet sich in der Tab. 5 an der zu $p_x=5 k_0$ und h_3 gehörenden Stelle.

Die Tab. 4 und 5 geben die Besetzungswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Impulszellen in Abhängigkeit vom Abstand h_j und der Impulskomponente p_x an. In der zweiten Spalte der Tabellen sind die mittleren Wellenzahlen der Impulszellen angegeben.

Die Besetzungswahrscheinlichkeiten sind also innerhalb der FERMI-Kugeln, d. i. oberhalb der gestrichelten Linie, praktisch unverändert gleich 1 und außen sehr klein. Den weitaus größeren Anteil an der Randauflockerung der FERMI-Kugeln liefern die

Impuls- kompo- nente p_x	Wellenzahl in 10^{12} cm^{-1}	Besetzungswahrscheinlichkeiten für		
		h_1	h_3	h_5
	0	0,999745	0,999928	0,999958
$1 k_0$	4,35	0,000092	0,999060	0,999890
$2 k_0$	8,70	0,000015	0,000840	0,997480
$3 k_0$	13,05	0,000006	0,000066	0,002370
$4 k_0$	17,40	0,000003	0,000021	0,000153
$5 k_0$	21,75	0,000002	0,000010	0,000043
$6 k_0$	26,10	0,000001	0,000006	0,000020

Tab. 4. Auflockerung der Impulskugeln, hervorgerufen durch die lokalen Dichteänderungen.

Impuls- kompo- nente p_x	Wellenzahl in 10^{12} cm^{-1}	Besetzungswahrscheinlichkeiten für		
		h_1	h_3	h_5
0	0	0,98560	0,99601	0,99765
$1 k_0$	4,35	0,00520	0,99164	0,99720
$2 k_0$	8,70	0,00083	0,00640	0,99219
$3 k_0$	13,05	0,000344	0,00136	0,00670
$4 k_0$	17,40	0,000189	0,000652	0,00157
$5 k_0$	21,75	0,000119	0,000390	0,000796
$6 k_0$	26,10	0,000083	0,000263	0,000498

Tab. 5. Auflockerung, hervorgerufen durch die Strömungsgeschwindigkeiten [Näherung B, vgl. (79)].

Strömungsgeschwindigkeiten. Wir brauchen daher nur diesen Anteil zu betrachten und schließen daraus, daß eine Näherung der Art B [s. den 2. Absatz nach Gl. (59)] die Impulsverteilung der Dipol-
schwingung vorzüglich wiedergibt.

Aus den Gln. (74), (79) folgt ferner, daß für große Impulse \mathbf{f} gilt:

$$R(p) = 1/k^2. \quad (80)$$

Wenn wir daher mit dieser Impulsverteilung die kinetische Energie berechnen, so erhalten wir die divergente Summe

$$E = \sum_k \hbar^2 k^2 / 2 m \cdot 1/k^2. \quad (81)$$

Der Grund für diese Divergenz ist in der Vernachlässigung aller Oberflächeneffekte zu suchen. Ein scharfer Abfall der Dichte am Kernrand führt bekanntlich zu einer unendlichen kinetischen Energie. Um dem stetigen Randabfall Rechnung zu tragen, müssen wir $R(p)$ für große k so abändern, daß es mit wachsendem k stärker als $1/k^2$ gegen Null geht.

Wir werden $R(p) = 0$ setzen für alle nicht unmittelbar den FERMI-Kugeln benachbarten Zellen und begründen dieses folgendermaßen:

- Legt man den Betrachtungen als Einteilchenfunktionen diejenigen des Potentialtopfes mit unendlich hohen Wänden zugrunde, so liefert eine Dipol-
schwingung ganz analog zu dem oben Gebrachten nur von Null verschiedene Besetzungswahrscheinlichkeiten in diesen Nachbarzellen.
- Die Schwingungsenergie kommt größtenteils richtig heraus.

Wenn wir zu der Auflockerung der FERMI-Kugeln nach (74), (79) die damit verbundene Energieänderung ausrechnen, dabei allerdings nur die Nachbarzellen der FERMI-Kugeln berücksichtigen und weiter außen $R(p) = 0$ setzen, erhalten wir das folgende Ergebnis:

Für einen Kern vom Atomgewicht $A = 260$ haben wir eine Besetzungswahrscheinlichkeit von nahezu 0,0067 für alle Nachbarzellen der FERMI-Kugeln, soweit sie überhaupt besetzt werden können. Deren Zahl ist für jede der 4 Teilchensorten $(2,5)^2 2 \pi \approx 39$.

Nehmen wir an, daß die jetzt außerhalb der FERMI-Kugeln befindlichen Teilchen im Grundzustand in den Nachbarzellen innerhalb der FERMI-Kugeln waren, so ist $k_x = 0,435 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-1} = k_0$ = Kantenlänge der Impulszellen (11), und wir erhalten für die einzelnen Teilchen den mittleren Energiezuwachs:

$$\Delta' E = 1/4 \pi \cdot \frac{(\hbar k_0)^2}{2 m} \cdot [(2,5 \cos \vartheta + 0,5)^2 - (2,5 \cos \vartheta - 0,5)^2] \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi.$$

Der Radius der FERMI-Kugel beträgt $2,5 k_0$, und es ist $\hbar^2 k_0^2 / 2 m \approx 4 \text{ MeV}$.

Also ist $\Delta' E = 10 \text{ MeV}$.

Damit erhalten wir insgesamt

$$\Delta' E = 0,067 \cdot 4 \cdot 39 \cdot 10 \text{ MeV} = 10,5 \text{ MeV},$$

und für die Schwingungsenergie gilt nach Tab. 1 für $A = 260$

$$\Delta' E' = \hbar \omega = 11,1 \text{ MeV}.$$

Es ist also nahezu

$$\Delta' E = \hbar \omega.$$

Wir müssen an dieser Stelle allerdings darauf hinweisen, daß die potentielle Energie einen Beitrag von gleicher Größenordnung zur Gesamtenergie beisteuert. Die Schwingungsenergie kommt daher nur größtenteils richtig heraus.

4. Übergangsmatrixelemente

Da zwischen den einzelnen Nukleonen eine Wechselwirkung besteht, wird sich im allgemeinen eine bestimmte Verteilung der Teilchen auf die verschie-

denen Impulszellen im Laufe der Zeit ändern. Als Wechselwirkung setzen wir die Zweikörperkräfte an (2), (3). Die durch diese Kräfte vermittelten Stöße zwischen Teilchenpaaren sehen wir als Ursache für die Dämpfungsbreite der Kern- γ -Resonanzen an (Abschnitt 2).

In diesem Abschnitt sollen nun die Übergangselemente, die zu solchen Stößen gehören, berechnet werden. Ist $\mathfrak{p}_1, \dots, \mathfrak{p}_A$ eine der Impulskonfigurationen, aus denen sich die Annäherungsfunktion Φ vor

dem Stoß zusammensetzt, und geht diese beim Stoß über in $\mathfrak{p}'_1, \dots, \mathfrak{p}'_A$, so haben wir als Wellenfunktionen für diese spezielle Konfiguration:

$$\varphi_{\text{vor}} = (A!)^{-1/2} \text{Det}_{ik} \varphi(\mathfrak{p}_i, \mathfrak{y}_k), \quad (82)$$

$$\varphi_{\text{nach}} = (A!)^{-1/2} \text{Det}_{ik} \varphi(\mathfrak{p}'_i, \mathfrak{y}_k) \quad (83)$$

mit $\varphi(\mathfrak{p}, \mathfrak{y})$ aus (67). Nach der zeitabhängigen Störungsrechnung haben wir als Übergangselemente die Matrixelemente der Wechselwirkungsenergie (erste Näherung):

$$H_{\text{ww}} = \int \varphi_{\text{vor}}^* V(r) (W + M P_M + B P_B + H P_H) \varphi_{\text{nach}} d\mathfrak{y}_1 \dots d\mathfrak{y}_A = (\mathfrak{p}_1, \dots, \mathfrak{p}_A, V, \mathfrak{p}'_1, \dots, \mathfrak{p}'_A). \quad (84)$$

Da wir es mit Zweikörperkräften zu tun haben, verschwinden nur diejenigen Matrixelemente nicht, in denen sich höchstens zwei Impulse geändert haben. Für diese erhalten wir unter Benutzung von (67)

$$H_{\text{ww}} = L^{-6} \int e^{-i(\mathfrak{k}_1 \mathfrak{r}_1 + \mathfrak{k}_2 \mathfrak{r}_2 - \mathfrak{k}'_1 \mathfrak{r}_1 - \mathfrak{k}'_2 \mathfrak{r}_2)} V(|\mathfrak{r}_1 - \mathfrak{r}_2|) d\mathfrak{r}_1 d\mathfrak{r}_2 \sum_{s_1 \dots s_2} \delta_{m_1}(t_1) \delta_{m_2}(t_2) \delta_{n_1}(s_1) \delta_{n_2}(s_2) \cdot (W + M P_M + B P_B + H P_H) \delta_{m'_1}(t_1) \delta_{m'_2}(t_2) \delta_{n'_1}(s_1) \delta_{n'_2}(s_2) \quad (85)$$

minus dasselbe unter Vertauschung von k'_1, m'_1, n'_1 gegen k'_2, m'_2, n'_2 .

Wir betrachten zunächst den Ortsanteil des ersten Summanden, den wir abkürzen mit

$$R(\mathfrak{k}_1, \mathfrak{k}_2; \mathfrak{k}'_1, \mathfrak{k}'_2) = L^{-6} \int e^{-i(\mathfrak{k}_1 \mathfrak{r}_1 + \mathfrak{k}_2 \mathfrak{r}_2 - \mathfrak{k}'_1 \mathfrak{r}_1 - \mathfrak{k}'_2 \mathfrak{r}_2)} V(|\mathfrak{r}_1 - \mathfrak{r}_2|) d\mathfrak{r}_1 d\mathfrak{r}_2. \quad (86)$$

Die Integrationen erstrecken sich über das Kernvolumen. Den Ortsanteil des zweiten Summanden können wir entsprechend bezeichnen mit

$$R(\mathfrak{k}_1, \mathfrak{k}_2; \mathfrak{k}'_1, \mathfrak{k}'_2).$$

Wir führen Relativ- und Schwerpunktskoordinaten für die beiden Stoßpartner ein:

$$\mathfrak{R} = \frac{1}{2}(\mathfrak{r}_1 - \mathfrak{r}_2), \quad \mathfrak{r} = \mathfrak{r}_1 - \mathfrak{r}_2. \quad (87)$$

Die zugehörigen Impulse sind:

Vor dem Stoß: $\mathfrak{R} = \mathfrak{k}_1 + \mathfrak{k}_2, \quad \mathfrak{k} = \frac{1}{2}(\mathfrak{k}_1 - \mathfrak{k}_2)$.

Nach dem Stoß: $\mathfrak{R}' = \mathfrak{k}'_1 + \mathfrak{k}'_2, \quad \mathfrak{k}' = \frac{1}{2}(\mathfrak{k}'_1 - \mathfrak{k}'_2)$.

Wir erhalten dann:

$$R(\mathfrak{k}_1 \dots \mathfrak{k}'_2) = L^{-6} \int e^{-i(\mathfrak{R}\mathfrak{R} + \mathfrak{k}\mathfrak{r} - \mathfrak{R}'\mathfrak{R}' - \mathfrak{k}'\mathfrak{r}')} V(r) dr d\mathfrak{R}. \quad (88)$$

Infolge der kurzen Reichweite der Kernkräfte kann man unter Vernachlässigung eines Anteils, der von der Kernoberfläche herröhrt, die Integration „dr“ über eine Kugel mit der Kraftreichweite β als Radius erstrecken. Dann läßt sich die Integration über „d \mathfrak{R} “ ausführen; diese liefert L^3 , falls der Impulssatz

$$\mathfrak{R} = \mathfrak{R}' \quad (89)$$

erfüllt ist, sonst Null. In Verbindung mit dem Energieerhaltungssatz folgt dann

$$|\mathfrak{k}| = |\mathfrak{k}'|. \quad (90)$$

Da das Potential nur von r abhängt, ist es zweckmäßig, Kugelkoordinaten einzuführen und die ebenen Wellen nach Kugelfunktionen zu entwickeln. Wir bezeichnen mit ϑ den Winkel zwischen \mathfrak{k} und \mathfrak{k}' und erhalten nach einigen Umformungen:

$$R(\mathfrak{k}_1 \dots \mathfrak{k}'_2) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(r, \vartheta) = L^{-3} \int_0^{\beta} 4\pi(2l+1) j_l^2(kr) \cdot V(r) r^2 dr P_l(\cos \vartheta). \quad (91)$$

j_l ist die sphärische BESSEL-Funktion und P_l das LEGENDRE-Polynom, beide zum Index l .

$R(\mathfrak{k}_1, \mathfrak{k}_2; \mathfrak{k}'_1, \mathfrak{k}'_2)$ erhält man durch Vertauschung von $\mathfrak{k}'_1, \mathfrak{k}'_2$. Diese bewirkt, daß \mathfrak{k} in $-\mathfrak{k}$ übergeht und ϑ in $\pi - \vartheta$. Die Kugelfunktionen $P_l(\cos \vartheta)$ reproduzieren sich bei dieser Ersetzung mit dem Faktor $(-1)^l$, so daß wir erhalten:

$$R(\mathfrak{k}_1, \mathfrak{k}_2; \mathfrak{k}'_1, \mathfrak{k}'_2) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(r, \vartheta) \cdot (-1)^l. \quad (92)$$

Setzt man (3) ein, so folgt für $l=0$

$$\int_0^\beta r^2 V(r) j_0^2(kr) dr = -(1/4 k^3) (2 k \beta - \sin 2 k \beta). \quad (93)$$

Wenn wir nunmehr den SERBER-Ansatz [vgl. den Abschnitt nach Gl. (74)] berücksichtigen und die für antisymmetrische Wellenfunktionen gültige Relation

$$P_M, \psi = P^r, \psi = -P^t P^s, \psi \quad (94)$$

$$\delta_{m_1}(t_1) \delta_{m_2}(t_2) \delta_{n_1}(s_1) \delta_{n_2}(s_2) (W + M P_M + B P_B + H P_H) P^t P^s \delta_{m_1'}(t_1) \delta_{m_2'}(t_2) \delta_{n_1'}(s_1) \delta_{n_2'}(s_2). \quad (96)$$

Wir können dann für das Matrixelement (85) schreiben unter Benutzung der Abkürzungen (91), (92):

$$H_{ww} = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(r, \vartheta) \sum_{s_1 \dots t_2} \delta \dots \{ (1 - P^t P^s) (W + H P^s) [1 + (-1)^l] \} \cdot \delta \dots. \quad (97)$$

Für ungerade Drehimpulse verschwindet also jeweils der entsprechende Summand.

Die Drehimpulse $l \geq 2$ wollen wir von jetzt an unberücksichtigt lassen, da sie infolge der geringen Reichweite der Kernkräfte keinen wesentlichen Einfluß mehr ausüben, in Übereinstimmung mit der Tatsache, daß wir bis etwa 50 MeV die Streuung näherungsweise als isotrop ansehen können.

Damit wird

$$H_{ww} = -(2 \pi / L^3 k^3) (2 k \beta - \sin 2 k \beta) \sum_{s_1 \dots t_2} \delta_{n_1}(s_1) \dots \delta_{m_2}(t_2) [(1 - P^s P^t) (W + H P^s)] \delta_{n_1'}(s_1) \dots \delta_{m_2'}(t_2). \quad (98)$$

An Stelle der $\delta_{n_1}(s_1) \dots \delta_{m_2}(t_2)$ führen wir nun Eigenfunktionen φ_{T, T_z, S, S_z} zum Betrag des Spins (S) und Ladungsspin (T) sowie zu einer Komponente (S_z, T_z) ein, da sich mit Hilfe dieser Funktionen die Wirkung der Austauschoperatoren leichter formulieren läßt⁹.

Wir kürzen

$$(n_1, \dots, m_2) \text{ mit } n \text{ und } (S, T, S_z, T_z) \text{ mit } t \quad (99)$$

ab und können schreiben:

$$\delta_{n_1}(s_1) \delta_{n_2}(s_2) \delta_{m_1}(t_1) \delta_{m_2}(t_2) = \sum_t e_{nt} \varphi_t(s_1 s_2 t_1 t_2). \quad (100)$$

Darin ist e_{nt} eine unitäre Matrix. Für $n_1 = n_2$ und $m_1 = m_2$ wird speziell

$$e_{nt} = \begin{cases} 1 & \text{für } (S=T=1, S_z=n_1, T_z=m_1), \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \quad (101)$$

da die δ -Faktoren in diesem Falle parallele Spins und Ladungsspins, also reine Triplettzustände beschreiben. Die Anwendung der Austauschoperatoren auf φ_t liefert:

$$(1 - P^t P^s) (W + H P^s) \varphi_t = [1 - (-1)^{T+S}] [W - (-1)^S H] \varphi_t = M_t \varphi_t. \quad (102)$$

anwenden, so können wir schreiben:

$$W + M P_M + B P_B + H P_H = (1 - P^t P^s) (W + H P^s); \quad (95)$$

darin bedeuten P^t, P^s, P^t Austauschoperatoren für Ort, Spin und Ladung.

Wir berücksichtigen weiter, daß der Spin- und Ladungsspinanteil des zweiten Summanden in (85) sich schreiben läßt als

$$\delta_{n_1'}(s_1) \delta_{m_1'}(t_1) \delta_{n_2'}(s_2) \delta_{m_2'}(t_2) \delta_{n_1'}(s_1) \delta_{n_2'}(s_2). \quad (96)$$

Wir erhalten dann für die Summe über die Spin- und Ladungsspinkoordinaten in (98)

$$\sum_{s_1 \dots t_2} = \sum_t M_t e_{n't}^* e_{nt}. \quad (103)$$

Damit folgt

$$H_{ww} = \sum_t - (4 \pi / L^3 k^3) (k \beta - \frac{1}{2} \sin 2 k \beta) M_t e_{n't}^* e_{nt}. \quad (104)$$

Wir wollen nun noch $|H_{ww}|^2$ bilden und über alle Anfangs- und Endzustände der Spin- und Ladungsspinkoordinaten summieren:

$$\sum_{n n'} H_{ww}^2 = \sum_t (16 \pi^2 / L^6 k^6) (k \beta - \frac{1}{2} \sin 2 k \beta)^2 |M_t|^2. \quad (105)$$

Für die M_t erhalten wir Tab. 6.

T	T _z	M _t für		S = 0 S _z = 0	S = 1		
		-1	0		-1	0	+1
0	0			0			$2(W - H)$
	-1						
1	0				$2(W + H)$		0
	+1						

Tab. 6.

Und damit erhalten wir

$$\sum_t |M_t|^2 = 3 \cdot 4 \cdot (2W^2 + 2H^2) = 5210 \text{ (MeV)}^2 \quad (106)$$

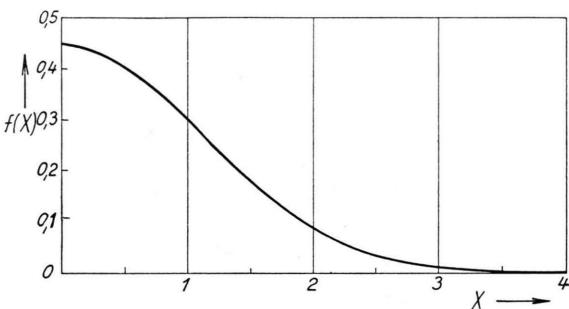
und

$$\sum_{n'} |H_{ww}|^2 = (16\pi^2\beta^6/L^6) \cdot f(k\beta) \cdot 5210 \text{ (MeV)}^2. \quad (107)$$

Darin bedeutet

$$f(X) = \frac{(X - \frac{1}{2} \sin 2X)^2}{X^3}. \quad (108)$$

Diese Funktion ist in Abb. 3 dargestellt.



$$\text{Abb. 3. } f(X) = \frac{(X - \frac{1}{2} \sin 2X)^2}{X^3}.$$

Gl. (101) in Verbindung mit Tab. 6 zeigt, daß

$$H_{ww} = (p_1 p_2, V, p_1' p_2') = 0 \quad (108')$$

ist, wenn p_1 und p_2 zur gleichen Teilchensorte gehören ($T=S=0,1$). Das ist, wie wir schon oben erwähnten, eine Folge des PAULI-Prinzips in Verbindung mit dem SERBERSchen Kraftsatz, der Streuung für ungerade Drehimpulse ausschließt. Für gerade Drehimpulse ist der Ortsanteil der Wellenfunktion symmetrisch bezüglich der beiden Teilchenkoordinaten. Also muß entweder der Spin im Singulettzustand und der Ladungsspin im Tripletzustand vorliegen oder umgekehrt.

5. Abzählung der Endzustände

Wir wollen jetzt die Zahl $\varrho(p_1, p_2)$ der Endzustände pro Energieintervall dE , in die ein Teilchenpaar beim Stoß übergehen kann, durch Abzählung der freien Impulszellen bestimmen. Da nur Teilchen verschiedener Sorten zusammenstoßen können (Abschnitt 4), brauchen wir den Fall, daß p_1, p_2 zur gleichen Teilchensorte gehören, gar nicht zu diskutieren. Da wir außerdem nur „Normalkerne“ betrachten [s. Gl. (26)], für die die FERMI-Kugeln für

die Teilchensorten in gleicher Weise in Zellen eingeteilt sind, gelten die folgenden Betrachtungen unabhängig von der Zugehörigkeit der Teilchen der Paare zu bestimmten Sorten.

Wir sahen bereits im Abschnitt 3, daß die Randauflockerung der FERMI-Kugeln sehr klein ist. Wir können daher bei der Berechnung von $\varrho(p_1, p_2)$ in guter Näherung annehmen, daß sämtliche Zellen besetzt sind, für welche der Impuls dem Betrage nach kleiner ist als der Grenzimpuls k_{gr} :

$$k < k_{gr}, \quad (109)$$

daß alle übrigen Zellen aber unbesetzt sind.

Durch die Impulse $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2$ vor dem Stoß ist die Energie E und der Betrag k des Relativimpulses im Schwerpunktssystem bestimmt, und beides sind Erhaltungsgrößen, wie wir in Abschnitt 2 bzw. 4 gesehen haben. Bezeichnen wir wieder mit \mathfrak{R} den Impuls des Schwerpunktes beider Teilchen, — ebenfalls eine Erhaltungsgröße —, so liegen die nach dem Energie- und Impulssatz möglichen Endzustände auf einer Kugel mit dem Radius k und dem Mittelpunkt $\frac{1}{2}\mathfrak{R}$. Besteht zwischen \mathfrak{R} , \mathbf{f} und \mathbf{f}_{gr} die Relation

$$|\frac{1}{2}\mathfrak{R}| - k < k_{gr}, \quad (110)$$

so fällt ein Teil dieser Kugel in den bereits vollständig besetzten Bereich von Zellen innerhalb der FERMI-Kugeln (Abb. 4 und 5). Den restlichen Teil der Kugeloberfläche bezeichnen wir mit F . Wir werden im nächsten Abschnitt sehen, daß wir nur die Fälle zu betrachten brauchen, in denen nur einer der Anfangsimpulse $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2$ innerhalb der FERMI-Kugeln liegt, während der andere außerhalb liegt. Das führt zu den Bedingungen

$$|\frac{1}{2}\mathfrak{R}| - k_{gr} < k < |\frac{1}{2}\mathfrak{R}| + k_{gr}, \quad (111)$$

$$k^2 > k_{gr}^2 - (\frac{1}{2}\mathfrak{R})^2 \quad (112)$$

für den Bereich, in den die Teilchen gestreut werden können.

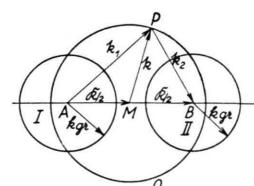


Abb. 4. Tragen wir den Vektor $\mathbf{f}_1 = \mathfrak{R} - \mathbf{P}_1$ von A ab, $\mathbf{f}_2 = \mathfrak{R} - \mathbf{P}_2$ von P, so ist $\mathfrak{R} - \mathbf{f}_1 = \mathbf{f}_2$ und $\mathfrak{R} - \mathbf{f}_2 = \mathbf{f}_1$. Zur Herleitung der Relation (111) legen wir P der Reihe nach in die verschiedenen Schnittpunkte der Geraden AB mit der FERMI-Kugel I (oder II).

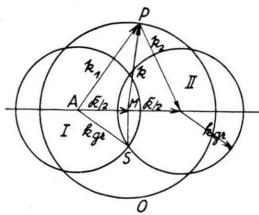


Abb. 5. Zur Herleitung der Relation (112) betrachten wir den Fall, daß P mit S zusammenfällt.

Unter diesen Voraussetzungen erhalten wir für die Oberfläche F der Kugel O außerhalb der FERMI-Kugeln

$$F = 2 \pi k (k^2 + (\frac{1}{2} \mathfrak{K})^2 - k_{\text{gr}}^2) / |\frac{1}{2} \mathfrak{K}|. \quad (113)$$

Für die möglichen Endzustände erhalten wir dann das Phasenvolumen:

$$d\Phi = F dk L^3 \hbar^3, \quad (114)$$

und die Zahl der Endzustände ist

$$dN = d\Phi / \hbar^3 = F dk (L/2 \pi)^3. \quad (115)$$

Unter Benutzung der Relation

$$E = \hbar^2 K^2 / 4 m + \hbar^2 k^2 / m \quad (116)$$

folgt für die Dichte der Endzustände:

$$\varrho(|K|, k) = \pi m / \hbar^2 \cdot (L/2 \pi)^3 \cdot [k^2 + (\frac{1}{2} \mathfrak{K})^2 - k_{\text{gr}}^2] / |\frac{1}{2} \mathfrak{K}|. \quad (117)$$

Wir können \mathfrak{f} und $\frac{1}{2} \mathfrak{K}$ durch k_1 und k_2 und $\vartheta = \nabla(\mathfrak{f}_1 \mathfrak{f}_2)$ ausdrücken und erhalten

$$\varrho(\mathfrak{f}_1, \mathfrak{f}_2) = \pi m / \hbar^2 \cdot (L/2 \pi)^3 \cdot (\frac{1}{2} (k_1^2 + k_2^2) - k_{\text{gr}}^2) / |\frac{1}{2} \mathfrak{K}|. \quad (118)$$

6. Übergangswahrscheinlichkeit und Energiebreite

Für die Übergangswahrscheinlichkeit W liefert die zeitabhängige Störungsrechnung die Formel

$$W = (2 \pi / \hbar) \sum_{\Phi'} |H_{\Phi\Phi'}|^2; \quad (119)$$

$H_{\Phi\Phi'}$ ist das Matrixelement der Wechselwirkungsenergie, berechnet zwischen dem Anfangszustand Φ und dem Endzustand Φ' . Die Summe erstreckt sich über alle Endzustände derselben Energie wie Φ . Ist der Anfangszustand Φ eine Linearkombination von reinen Zuständen, so muß noch über diese gemittelt werden. Wir erhalten daher

$$W = (2 \pi / \hbar) \cdot \sum_{\mathfrak{p}_1 \dots \mathfrak{p}_A} W(\mathfrak{p}_1, \dots, \mathfrak{p}_A) \sum_{\mathfrak{p}_1' \dots \mathfrak{p}_A'} |(\mathfrak{p}_1 \dots \mathfrak{p}_A, V, \mathfrak{p}_1' \dots \mathfrak{p}_A')|^2; \quad (120)$$

\mathfrak{p}_i bezeichnet den Anfangszustand, \mathfrak{p}_i' den Endzustand und $(\mathfrak{p}_i, V, \mathfrak{p}_i')$ das Matrixelement der Wechselwirkung. Die Summen erstrecken sich über alle \mathfrak{p}_i und \mathfrak{p}_i' , für die die Determinantenfunktion Φ' zur gleichen Energie gehört wie Φ .

Da wir nur Wechselwirkungen zwischen je zwei Teilchen haben, liefern nur solche Summenglieder Beiträge zu W , in denen sich jeweils ein Impulspaar geändert hat:

$$W = (2 \pi / \hbar) \sum_{\mathfrak{p}_1 \dots \mathfrak{p}_A} W(\mathfrak{p}_1, \dots, \mathfrak{p}_A) \cdot \sum_{i < k} \sum_{\text{Endzustände}} |(\mathfrak{p}_i \mathfrak{p}_k, V, \mathfrak{p}_i' \mathfrak{p}_k')|^2. \quad (121)$$

Die Summe über die Endzustände zerfällt in zwei Teile:

1. in eine Summe im k -Raum, diese liefert $\varrho(\mathfrak{f}_1, \mathfrak{f}_2)$,
2. in eine Summe über die verschiedenen Teilchensorten $\sum_{\mathfrak{n}'}$.

In jedem Summanden von $\sum_{i < k}$ ändern wir die Summationsindizes:

$$\mathfrak{p}_i \longleftrightarrow \mathfrak{p}_1 \quad \mathfrak{p}_k \longleftrightarrow \mathfrak{p}_2 \quad (122)$$

und erhalten nach Ausführung der Summationen über alle möglichen Werte von $\mathfrak{p}_3 \dots \mathfrak{p}_A$:

$$W = (2 \pi / \hbar) \sum_{i < k} \sum_{\mathfrak{p}_1 \mathfrak{p}_2} W(\mathfrak{p}_1, \mathfrak{p}_2) \varrho(\mathfrak{f}_1, \mathfrak{f}_2) \cdot \sum_{\mathfrak{n}'} |(\mathfrak{p}_1 \mathfrak{p}_2, V, \mathfrak{p}_1' \mathfrak{p}_2')|^2. \quad (123)$$

Die Summe über \mathfrak{p}_1 und \mathfrak{p}_2 können wir wieder aufteilen in eine Summe über die Teilchensorten und eine Summe im k -Raum; die Ausführung der Summe über i, k liefert zunächst den Faktor $\frac{1}{2} A(A-1)$, davon haben wir $A(A-1)$ verwendet, um W durch $R(\mathfrak{f}_1) \cdot R(\mathfrak{f}_2)$ (75) auszudrücken. Die $R(\mathfrak{f})$ sind die Besetzungswahrscheinlichkeiten der einzelnen Impulszellen. Diese errechnen sich, wie wir in Abschnitt 3 sahen, aus der Dichteschwingung, und sind im Falle eines Normalkerns [s. Gl. (26)] unabhängig von der Teilchensorte. Erstrecken wir die Summe über alle Teilchenpaare $(\mathfrak{f}_1, \mathfrak{f}_2)$ ohne Rücksicht auf die Reihenfolge, so wird der Faktor $\frac{1}{2}$ absorbiert [für $\mathfrak{f}_1 = \mathfrak{f}_2$ wird $\varrho(\mathfrak{f}_1, \mathfrak{f}_2) = 0$], und wir erhalten mit Hilfe von (54) für die Energiebreite die Endformel:

$$\Delta E = 2\pi \sum_{(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2)} R(\mathbf{f}_1) R(\mathbf{f}_2) \varrho(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2) \cdot \sum_{\mathbf{n} \mathbf{n}'} |(\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, V, \mathbf{p}_1' \mathbf{p}_2')|^2. \quad (124)$$

Die auf der rechten Seite vorkommenden Faktoren haben wir in den vorhergehenden Abschnitten diskutiert.

An eine strenge Auswertung von (124) kann für die in Abschnitt 3 erhaltenen $R(\mathbf{f})$ nicht gedacht werden. Nun sind aber außerhalb der FERMI-Kugeln die Besetzungswahrscheinlichkeiten außerordentlich klein und verschwinden für große k_i . Wir können daher in guter Näherung annehmen, daß sich ein Stoßpartner vor dem Stoß innerhalb der FERMI-Kugel befindet. Für diesen können wir dann setzen

$$R(\mathbf{f}_2) = 1, \quad (125)$$

denn innen weicht $R(\mathbf{f})$ nur sehr wenig von 1 ab.

Diese Näherung können wir auch so interpretieren: Die Kollektivschwingung setzt sich im wesentlichen aus solchen reinen Impulszuständen zusammen, in denen sich in jedem Augenblick nur ein Teilchen außerhalb der FERMI-Kugeln befindet. Die Wahrscheinlichkeit, daß gleichzeitig 2 oder mehr

Teilchen außerhalb anzutreffen sind, ist verschwindend klein.

Stöße zwischen den Nukleonen wirken nun in den allermeisten Fällen in der Weise, daß die Wahrscheinlichkeit, 2 Teilchen außerhalb anzutreffen, vergrößert wird. Es kommen gelegentlich auch Stöße vor, bei denen nachher je ein Stoßpartner innerhalb und außerhalb der FERMI-Kugeln Impulszellen besetzen, aber diese Fälle sind sehr selten, da innere Impulszellen fast nie unbesetzt sind. Wir wollen noch bemerken, daß die Impulszustände, in denen 2 Teilchen außerhalb der FERMI-Kugeln sind, in Strenge orthogonal sind zu denen, wo sich nur ein Teilchen außerhalb befindet.

Die Stöße bewirken also wirklich eine Zerstörung der Dipolschwingung, und nur ein kleiner Bruchteil, den wir in der Rechnung auf Grund der obigen Vernachlässigungen nicht berücksichtigen, läßt die Impulsverteilung stationär. Diese Bedingung ist wichtig für die Anwendbarkeit der zeitabhängigen Störungsrechnung.

Wir wenden uns nunmehr der numerischen Auswertung der Formel (124) für ΔE zu und approximieren die Summen durch Integrale:

$$\Delta E = 2\pi \int_{k_1 > k_{\text{gr}}} d\mathbf{f}_1 \int_{k' < k_2 < k_{\text{gr}}} d\mathbf{f}_2 k_0^{-6} R(\mathbf{f}_1) \varrho(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2) \sum_{\mathbf{n} \mathbf{n}'} |(\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, V, \mathbf{p}_1' \mathbf{p}_2')|^2. \quad (126)$$

k_0^3 mit $k_0 = 2\pi/L = 0,435 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-1}$ ist das Volumen einer Impulszelle. k' soll daran erinnern, daß

$$\frac{1}{2}(k_1^2 + k_2^2) - k_{\text{gr}}^2 = (\frac{1}{2}\mathfrak{R})^2 + k^2 - k_{\text{gr}}^2 \geq 0 \quad (127)$$

bleiben muß. Denn für

$$\frac{1}{2}(k_1^2 + k_2^2) - k_{\text{gr}}^2 < 0 \quad (128)$$

ist $\varrho(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2) = 0$ (vgl. Abschnitt 5).

Dem Übergang von den diskreten \mathbf{f} -Werten zur kontinuierlichen Variabilität von \mathbf{f} , die sich in der

Ersetzung der Summen durch Integrale ausdrückt, liegt der Gedanke der Mittelung der k -Werte innerhalb einer jeden Impulszelle zugrunde. Dieser Übergang ist nötig, um in Übereinstimmung zu bleiben mit der bei der Abzählung der Endzustände angewandten Methode. Dort mußten wir, um die zeitabhängige Störungsrechnung anwenden zu können, ebenfalls kontinuierlich rechnen.

Wir setzen (107) und (118) in (124) ein und erhalten

$$\Delta E = 2\pi^2 (m/\hbar^2) (L/2\pi)^3 (4\pi\beta^3/L^3)^2 \cdot 5210 (\text{MeV})^2 k_0^{-6} \cdot \int_{k' < k_2 < k_{\text{gr}}} d\mathbf{f}_2 \int_{k_1 > k_{\text{gr}}} d\mathbf{f}_1 R(\mathbf{f}_1) (\frac{1}{2}(k_1^2 + k_2^2) - k_{\text{gr}}^2) \cdot f(k\beta) / |\frac{1}{2}\mathfrak{R}|. \quad (129)$$

Die Funktion $f(k\beta)$ ist durch (108) erklärt und in Abb. 3 dargestellt. (k = Betrag des Relativimpulses, \mathfrak{R} = Schwerpunktimpuls der Stoßpartner.)

Wir schreiben $d\mathbf{f}_2 = k_2^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$. Der Winkel $\vartheta = \measuredangle(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2)$ kommt nur in den Faktoren $1/|\frac{1}{2}\mathfrak{R}|$ und $f(k\beta)$ vor. Zu festen Werten von k_1 und k_2 liefert dann die Integration über den Raumwinkel:

$$\int \sin \vartheta d\vartheta d\varphi k_2^2 \cdot [(k_1^2 + k_2^2)/2 - k_{\text{gr}}^2] / |\frac{1}{2}\mathfrak{R}| \cdot f(k\beta) = 4k_0^3 [F_1(k_1, k_2)/18]. \quad (130)$$

Die Funktion F_1 wurde für einige Werte von k_1 und k_2 nach der GAUSSschen Methode¹² berechnet.

k_2	$k_1 = 2,6 k_0$	$2,8 k_0$	$3,0 k_0$	$3,2 k_0$	$3,4 k_0$
$2,4 k_0$	0,11	5,32	9,87	13,13	15,24
$2,2 k_0$	—	0,80	5,26	8,81	11,59
$2,0 k_0$	—	—	1,74	5,35	8,07
$1,8 k_0$	—	—	—	2,59	5,23
$1,6 k_0$	—	—	—	0,66	3,08
$1,4 k_0$	—	—	—	—	1,55
$1,2 k_0$	—	—	—	—	0,58
$1,0 k_0$	—	—	—	—	0,05

Tab. 7. F_1 für verschiedene k_1 und k_2 .

Die Integration über k_2 führen wir aus, indem wir näherungsweise das Integrationsintervall in Teil-

$$\Delta E = (8/9) \cdot 1042 \text{ (MeV)}^2 (\pi^2 m/\hbar^2) L^{-3} \beta^6 k_0^{-2} \int_{k_1 > k_{\text{gr}}} dk_1 (5/k_0) F_2(k_1) \cdot R(\mathfrak{k}_1) . \quad (132)$$

Nun müssen wir $R(\mathfrak{k}_1)$ berücksichtigen. Wir bezeichnen den Bereich außerhalb der FERMI-Kugeln, in dem $R(\mathfrak{k}_1) \neq 0$ ist, mit \mathfrak{B} . Wie wir in Abschnitt 3 gesehen haben, umfaßt \mathfrak{B} nur Nachbarzellen der FERMI-Kugel; er hat die in Abb. 2 angegebene Form, seine äußere Begrenzung entsteht durch Verschieben der FERMI-Kugeln um $+k_0$ bzw. $-k_0$ in der Schwingungsrichtung (p_x), und man hat sich \mathfrak{B} räumlich rotationssymmetrisch um diese Achse ergänzt zu denken. Innerhalb von \mathfrak{B} variiert $R(\mathfrak{k}_1)$ nur wenig: von 0,0067 in der Mitte der beiden Teilbereiche bis zu 0,0052 am Rande. Der Abfall von 0,0064 auf 0,0052 findet, wie ein Blick auf Abb. 2 zeigt, ebenfalls nahe am Rande statt. Wir machen daher nur einen sehr kleinen Fehler, wenn wir im ganzen Bereich $R(\mathfrak{k}_1)$ konstant setzen:

$$R(\mathfrak{k}_1) = 0,0067 . \quad (133)$$

Bei der Integration über \mathfrak{k}_1 müssen wir nun die Gestalt von \mathfrak{B} berücksichtigen. Zu diesem Zwecke führen wir die Gewichtsfunktion $b(k_1)$ ein, die folgendermaßen definiert ist: $b(k_1) dk_1$ gibt das Volumen desjenigen Teilbereiches von \mathfrak{B} an, der zwischen k_1 und $k_1 + dk_1$ liegt. Wir erhalten Tab. 9. Dann verbleibt uns noch eine Integration über den Betrag von \mathfrak{k}_1 . Wir teilen dazu wieder das Integrationsintervall, das sich von $2,5 k_0$ bis $3,5 k_0$ erstreckt, in Teilintervalle der Länge $k_0/5$ und addieren die Funktionswerte. Wir erhalten:

intervalle der Länge $0,2 k_0$ zerlegen und bilden:

$$F_2(k_1) = \int F_1 dk_2 = (k_0/5) \cdot \sum F_1(k_2) . \quad (131)$$

Die Summe erstreckt sich über $k_2 = 2,4; 2,2 \dots$. Wir erhalten dann für F_2 folgende Werte:

k_1	$(5/k_0) F_2(k_1)$
$2,6 k_0$	0,109
$2,8 k_0$	6,126
$3,0 k_0$	16,878
$3,2 k_0$	30,538
$3,4 k_0$	45,405

Tab. 8.

Für ΔE erhalten wir

k_1	$b(k_1)$
$2,6 k_0$	$9,225 \cdot 2 k_0^2$
$2,8 k_0$	$7,525 \cdot 2 k_0^2$
$3,0 k_0$	$5,625 \cdot 2 k_0^2$
$3,2 k_0$	$3,525 \cdot 2 k_0^2$
$3,4 k_0$	$1,225 \cdot 2 k_0^2$
$3,6 k_0$	0

Tab. 9.

streckt, in Teilintervalle der Länge $k_0/5$ und addieren die Funktionswerte. Wir erhalten:

$$\begin{aligned} \int dk_1 (5 F_2(k_1)/k_0) R(\mathfrak{k}_1) \\ = \int dk_1 (5 F_2(k_1)/k_0) \cdot 0,0067 \cdot b(k_1) \\ = (2\pi/5) k_0^3 \cdot 0,0067 \cdot 305,32 . \end{aligned} \quad (134)$$

Nun ist nach (11) die Länge einer Impulszelle gegeben durch $k_0 = 0,435 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-1}$ und β durch (4). Damit erhalten wir das Endergebnis:

$$\Delta E = 6,42 \text{ MeV} \quad (135)$$

für einen Kern mit dem Atomgewicht $A = 260$.

7. Diskussion des Ergebnisses

Wir wollen zunächst die Abhängigkeit der Energiebreite vom Atomgewicht A abschätzen.

Da k_1 auf den Bereich $k_{\text{gr}} < k_1 < k_{\text{gr}} + k_0$ beschränkt ist, kann auch k_2 im wesentlichen nur am Rande der

¹² C. RUNGE u. H. KÖNIG, „Numerisches Rechnen“, Berlin 1924.

FERMI-Kugel liegen: $k_{\text{gr}} - k_0 \lesssim k_2 < k_{\text{gr}}$. Die Zahl der Summanden, die in Gl. (124) zu ΔE beitragen, ist daher proportional der Zahl Z der Impulspaare in diesen Bereichen. Wegen der Unabhängigkeit des Grenzimpulses k_{gr} von A erhalten wir:

$$Z \sim A^{2/3} \cdot A^{2/3}, \quad (136)$$

die Potenz $2/3$ hängt damit zusammen, daß wir nach der Zahl der Zellen an der Oberfläche der FERMI-Kugel fragen. Die Faktoren $f(k\beta)$ und $|\frac{1}{2}\mathfrak{R}|^{-1}$ sind nahezu unabhängig von A , da die Größe von \mathfrak{f} und \mathfrak{R} im wesentlichen durch den Radius der FERMI-Kugel k_{gr} , der nicht von A abhängt, bestimmt ist. Um den Zähler $[\frac{1}{2}(k_1^2 + k_2^2)] - k_{\text{gr}}^2$ zu untersuchen, setzen wir

$$k_1 = k_{\text{gr}} + a k_0, \quad k_2 = k_{\text{gr}} + b k_0, \quad (137)$$

$$0 < a < 1, \quad -1 \lesssim b < 0.$$

Dann erhalten wir

$$\{[\frac{1}{2}(k_1^2 + k_2^2)] - k_{\text{gr}}^2\}/k_0 = (a + b) k_{\text{gr}} + \frac{1}{2}(a^2 + b^2) k_0; \quad (138)$$

a, b können wir als unabhängig von A ansehen, da für jedes A k_1 und k_2 die angegebenen Bereiche durchlaufen, falls a, b die Intervalle (137) durchlaufen. Der in (138) wesentliche Summand $(a + b) k_{\text{gr}}$ hängt also nicht von A ab. Somit ist

$$\{[\frac{1}{2}(k_1^2 + k_2^2)] - k_{\text{gr}}^2\} f(k\beta)/k_0 |\frac{1}{2}\mathfrak{R}| = F_0(\cos\vartheta) \quad (139)$$

näherungsweise unabhängig von A , da dieses für die einzelnen Faktoren gilt. Bedenken wir, daß $L \sim A^{1/3}$ ist, so folgt

$$\varrho(k_1, k_2) |(\dots, V, \dots)|^2 \sim A^{2/3} A^{-2}. \quad (140)$$

$R(\mathfrak{f}_2)$ setzen wir gleich 1, so daß wir nur $R(\mathfrak{f}_1)$ untersuchen müssen. Hierfür erhalten wir näherungsweise (62), (74), (79)

$$R(\mathfrak{f}_1) \sim A^{-2/3}. \quad (141)$$

Damit ergibt sich insgesamt:

$$\Delta E \approx \text{const} \cdot A^{-2/3}. \quad (142)$$

Um die Genauigkeit der numerischen Rechnungen abzuschätzen, untersuchen wir die 3 Integrations der Reihe nach.

In Abb. 7 haben wir für $k_1 = 3,2 k_0$, $k_2 = 2,4 k_0$ die Funktion F_0 (139) aufgetragen. Die Integration nach der GAUSSschen Methode¹² liefert den Flächen-

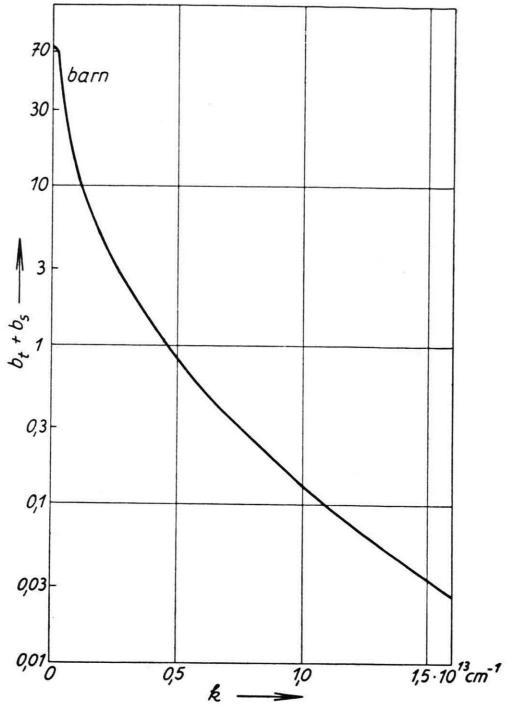


Abb. 6.

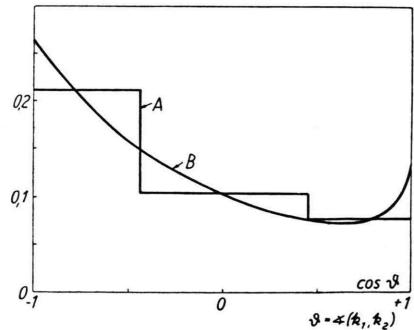


Abb. 7.

$$\frac{\frac{1}{2}(k_1^2 + k_2^2) - k_0^2}{|\frac{1}{2}\mathfrak{R}|/k_0} f(k\beta) \text{ für } k_1 = 3,2 k_0, k_2 = 2,4 k_0.$$

A: GAUSS-Methode liefert den Flächeninhalt des Polygons,
B: Verlauf der zu integrierenden Funktion.

inhalt unter dem Polygonzug (Abb. 7). Man sieht deutlich, daß sich die Flächen unter den beiden Kurven höchstens um etwa 2% unterscheiden. Wir wählten in dieser Abschätzung die speziellen Werte k_1 und k_2 , da für diese der Beitrag zu ΔE am größten ist, der Fehler sich also am stärksten auswirkt.

Zur Abschätzung der Genauigkeit der Integration über k_2 haben wir in Abb. 8 die für $k_1 = 3,2 k_0$ und verschiedene k_2 berechneten Werte einmal durch eine glatte Kurve und zweitens durch ein Stufenpolygon, für welches unsere Integration in Strenge richtig ist, verbunden. Die Abweichung der Flächen unter den beiden Kurven voneinander beträgt höchstens 1%.

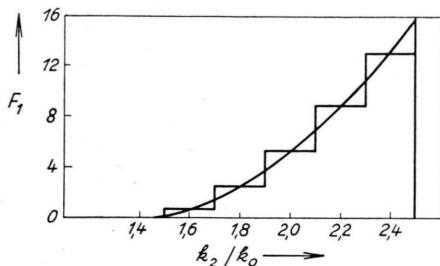


Abb. 8. Zur Integration über k_2 .
 $F_1(k_1, k_2)$ für $k_1 = 3,2 k_0$.

In Abb. 9 kommen wir endlich zur Integration über k_1 . Daß wir $R(f_1) = 0,0067 = \text{const}$ setzen im ganzen Bereich \mathfrak{B} , führt für $k_1 < 3 k_0$ zu einem Fehler von etwa 10%, im ganzen Bereich macht das einen Fehler von etwa 3% aus. Hinzu kommt ein Fehler bei der Integration in der Größe von 3%.

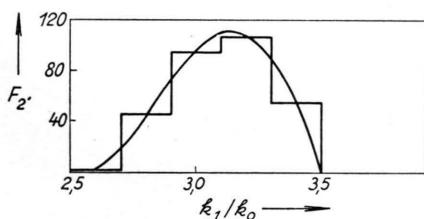


Abb. 9. Zur Integration über k_1 .

$$\frac{F_2(k_1) \cdot b(k_1)}{k_0^3 \cdot 0,4}$$

Ein weitaus größerer und schwer zu übersehender Fehler wird durch den Übergang von den diskreten Impulszellen zum Kontinuum im Impulsraum gemacht, den wir schon bei der Berechnung der Dichte der Endzustände $\varrho(f_1, f_2)$ vornehmen mußten.

Das von uns berechnete $\Delta E = 6,42 \text{ MeV}$ kann daher etwa einen Fehler von 20% haben. Auch die Abschätzung des Ganges von ΔE mit A macht keinen Anspruch auf große Genauigkeit.

Eine gewisse Unsicherheit kommt nun noch durch das Abschneiden der hohen Impulse hinein. Dieses Abschneiden ist im Grunde deswegen nötig, weil die Zahl der Endzustände für Paare mit hohen Impulsen stark anwächst. Folge dieses starken Anwachens ist, daß diejenigen Impulse, die nur infolge des unstetigen Randabfalls der Dichte künstlich hereinkommen, große Beiträge zu ΔE liefern und so das Ergebnis verfälschen würden. Die Unsicherheit besteht nun darin, daß wir beim Abschneiden der hohen Impulse vielleicht auch noch die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Nachbarzellen der FERMI-Kugeln etwas ändern müßten. Diese Abänderung kann aber nur klein sein und liefert, da in unserer Näherung die Besetzungswahrscheinlichkeit linear in ΔE eingeht, nur eine kleine Korrektur [vgl. (124) mit $R(f_2) = 1$]. Die Größenordnung von ΔE bleibt also unverändert.

Rechnet man mit der zeitabhängigen Störungsrechnung und dem Kraftansatz (4) den Wirkungsquerschnitt für die Streuung zweier Nukleonen in erster Näherung aus, so erhält man Werte, die für Energien von 20 MeV bis 40 MeV im Schwerpunktssystem etwa um 50% höher liegen als die experimentellen Daten.

Dies ist ein Hinweis, daß die erste störungstheoretische Näherung nicht ausreicht. Man könnte daran denken, die zweite Näherungsordnung hinzuzuziehen. Für die Rechnung ist dieser Weg wegen der damit verbundenen Schwierigkeiten in der Auswertung der Integrale usw. nicht gangbar. Wir wollen daher eine andere Näherung besprechen, die diesen Fehler korrigiert.

Wie oben bereits erwähnt, gelangt man auch in der zeitabhängigen Störungsrechnung zu einem Ausdruck für den totalen Wirkungsquerschnitt der Neutron-Proton-Streuung; falls H_{ww} unabhängig vom Streuwinkel ist, gilt:

$$\sigma = (m/4 \pi \hbar^2)^2 |H_{ww}|^2 L^6 \cdot 4 \pi. \quad (143)$$

Darin ist H_{ww} das Matrixelement der Wechselwirkungsenergie und L^3 das Normierungsvolumen. Andererseits kann man die experimentellen Werte für den totalen Wirkungsquerschnitt der Neutron-Proton-Streuung bis hinauf zu Energien von etwa 50 MeV im Schwerpunktssystem beschreiben durch die Formel:

$$\sigma = 4 \pi \left[\frac{1}{k^2 + (1/a_t - \frac{1}{2} r_t k^2)^2} \frac{3}{4} + \frac{1}{k^2 + (1/a_s - \frac{1}{2} r_s k^2)^2} \frac{1}{4} \right]. \quad (144)$$

Für a_s, r_s, r_t haben wir darin die Werte gewählt¹³:

$$a_s = -23,9 \cdot 10^{-13} \text{ cm}, \quad r_s = 2,6 \cdot 10^{-13} \text{ cm}, \\ a_t = +5,4 \cdot 10^{-13} \text{ cm}, \quad r_t = 1,73 \cdot 10^{-13} \text{ cm}.$$

Diese gute Übereinstimmung ermutigt uns, folgende Näherung zu machen: Wir errechnen die in (124) benötigten Matrixelemente nach Gl. (143) aus dem Wirkungsquerschnitt, und indem wir den totalen Wirkungsquerschnitt aufteilen in je einen Anteil für den Singulett- und Triplettzustand, unterscheiden wir auch Matrixelemente für den Singulett- und Triplettzustand. Wir benutzen weiter die Hypothese der Ladungsunabhängigkeit der Kernkräfte und beachten, daß infolge der Symmetrie des HAMILTON-Operators bei der Streuung keine Übergänge vom Singulett- in den Triplettzustand oder umgekehrt vorkommen. Wir nehmen weiterhin an, daß nur für gerade Drehimpulse eine Streuung erfolgt. Diese Annahme konnten wir bei unserer obigen Rechnung aus dem SERBERSchen Kraftansatz [vgl. Absatz nach Gl. (74) und Gl. (97)] folgern. Unter dieser Annahme ist also der Ortsanteil der Wellenfunktion im Anfangs- und Endzustand symmetrisch, und es dürfen Spin und Ladungsspin nicht gleichzeitig im Singulett- oder Triplettzustand sein.

Das Matrixelement (104), das speziell für den Ladungsspin-Triplett- und Spin-Singulett-Zustand lautet:

$$H_{ww,s} = -(4\pi/L^3 k^3) (k \beta - \frac{1}{2} \sin 2k \beta) 2(W - H) \\ \text{und} \quad (145)$$

$$H_{ww,t} = -(4\pi/L^3 k^3) (k \beta - \frac{1}{2} \sin 2k \beta) 2(W + H) \quad (146)$$

für den Spin-Triplett- und Ladungsspin-Singulett-Zustand, können wir dann ersetzen durch die Ausdrücke, die wir aus (143) in Verbindung mit (144) gewonnen haben:

$$H_{ww,s} = (4\pi\hbar^2/m L^3) (\sigma_s)^{1/2}, \quad (147)$$

$$H_{ww,t} = (4\pi\hbar^2/m L^3) (\sigma_t)^{1/2}. \quad (148)$$

Wir erhalten dann statt (105)

$$H_{ww}^2 = (4\pi\hbar^2/m L^3)^2 3(\sigma_s + \sigma_t). \quad (149)$$

Die Funktion

$$g(k) = (\sigma_s + \sigma_t) \quad (150)$$

ist in Abb. 6 dargestellt. Die Auswertung der Formel (124) erfolgt nun ganz analog wie oben. Wir

ersetzen in (130) die Funktion f durch g und erhalten

$$\int \sin \vartheta d\vartheta d\varphi k_2^2 [\frac{1}{2}(k_1^2 + k_2^2) - k_{gr}^2] / |\frac{1}{2}\vec{k}| g(k) \\ = 4k_0^3 G_1(k_1, k_2)/18, \quad (151)$$

wobei G_1 für einige Werte von k_1 und k_2 nach der GAUSSschen Methode (vgl. Tab. 7) berechnet wurde.

k_2	$k_1 = 2,6 k_0$	$2,8 k_0$	$3,0 k_0$	$3,2 k_0$	$3,4 k_0$
$2,4 k_0$	0,30	14,37	24,84	32,89	35,87
$2,2 k_0$	—	2,13	13,38	21,30	26,71
$2,0 k_0$	—	—	4,35	12,38	18,10
$1,8 k_0$	—	—	—	5,85	11,22
$1,6 k_0$	—	—	—	1,46	6,37
$1,4 k_0$	—	—	—	—	3,15
$1,2 k_0$	—	—	—	—	1,14
$1,0 k_0$	—	—	—	—	0,10

Tab. 10. G_1 für verschiedene k_1 und k_2 .

G_2 ist entsprechend F_2 definiert, und wir erhalten an Stelle der Tab. 8 die Tab. 11.

k_1	$(5/k_0) \cdot G_2(k_1)$
$2,6 k_0$	0,299
$2,8 k_0$	16,497
$3,0 k_0$	42,565
$3,2 k_0$	73,874
$3,4 k_0$	102,655

Tab. 11.

An Stelle von (134) erhalten wir dann

$$\int dk_1 (5 G_2(k_1)/k_0) R(\vec{k}_1) \\ = (2\pi/5) k_0^3 \cdot 0,0067 \cdot 626,735 \quad (152)$$

und das Endergebnis:

$$\Delta E = 5,55 \text{ MeV} \quad (153)$$

für einen Kern mit dem Atomgewicht $A = 260$.

Rechnen wir die von uns für ΔE gefundenen Werte auf andere Atomgewichte um, so erhalten wir

$$\Delta E = (260/A)^{2/3} \cdot 6,42 \text{ MeV} \quad (154)$$

$$\text{bzw.} \quad \Delta E' = (260/A)^{2/3} \cdot 5,55 \text{ MeV}. \quad (155)$$

A	$\Delta E_{\text{theor.}}$ (154)	$\Delta E_{\text{korr.}}$ (155)	$\Delta E_{\text{exp.}}$
197	7,7 MeV	6,6 MeV	6,3 MeV
209	7,4 MeV	6,4 MeV	5,4 MeV

Tab. 12.

¹³ S. FLÜGGE, Ergebn. exakt. Naturwiss. 26, 165 [1952].

Die zum Vergleich herangezogenen experimentellen Daten sind der Arbeit von MONTALBETTI und Mitarb.⁶ entnommen.

Im Rahmen unseres recht groben Modells — die gröbsten Näherungen sind wohl die Vernachlässigung der Nullpunktsschwingungen und die Abschneidevorschrift für die hohen Impulse — dürfen wir die Übereinstimmung insbesondere der korrigierten Werte als gut bezeichnen.

¹⁴ F. SCHLÖGL, Z. Phys. **136**, 445 [1953].

Man kann aus diesen Betrachtungen weiter erkennen, wie bereits in anderen Arbeiten ausgeführt wurde^{1, 7, 8, 14, 15}, daß für die Wechselwirkung der Nukleonen untereinander im Kern im wesentlichen Zweikörperkräfte verantwortlich sind, während die Absättigung der Kernkräfte durch Mehrkörperkräfte (oder auch durch einen „Hardcore“ der Kernkräfte) erzeugt wird.

¹⁵ A. FLORIAN, P. URBAN u. K. WILDERMUTH, Z. Naturforsch. **9 a**, 748 [1954].

Eine neue Methode zur Berechnung der Elektronenterme von Molekülen

Von W. BINGEL

Aus der Forschungsstelle für Spektroskopie in der Max-Planck-Gesellschaft, Hechingen
(Z. Naturforsch. **12 a**, 59—70 [1957]; eingegangen am 23. November 1956)

Es wird eine Methode zur Berechnung der Elektronenterme von Molekülen entwickelt, die von den exakten Eigenfunktionen des vereinigten Atoms ausgeht. Die berechneten Molekülerme gehen für verschwindende Kernabstände in die exakten Terme des vereinigten Atoms über. Es wird gezeigt, wie sich Molekül-Übergangsmomente und Dipolmomente als Funktion der Kernabstände im Rahmen der Theorie berechnen lassen.

Eine der wichtigsten Aufgaben der Quantenchemie bei der Ermittlung der Struktur eines bestimmten Moleküls ist die quantitative Berechnung seiner Elektronenterme, das heißt der diskreten Eigenwerte der SCHRÖDINGER-Gleichung für die Elektronen des Moleküls bei festgehaltenen Kernkoordinaten als Funktion der letzteren. Infolge der großen mathematischen Schwierigkeiten, wie sie jedem Viel-elektronenproblem innewohnen, ist eine *vollständige* Bestimmung dieser Abhängigkeit im allgemeinen nur für *zweiatomige* Moleküle durchführbar. In diesem Fall ist der Abstand R der beiden Atomkerne die einzige Kernkoordinate (auf die Richtung der Kernverbindungslinie kommt es hier nicht an), und die Durchführung der oben geschilderten Aufgabe ergibt dann die bekannten Potentialkurven $E_n(R)$, aus denen sich dann spezielle Eigenschaften des Moleküls, wie seine Dissoziationsenergie, der Gleichgewichtsabstand und sein Absorptions- und Emissionspektrum, bestimmen lassen. Bei *mehratomigen* Molekülen treten an Stelle dieser Potentialkurven gewisse Potentialflächen in einem höherdimensionalen Raum, und man beschränkt sich daher meistens auf die Berechnung der Elektronenterme für *eine* Kernkonfiguration. Das ist fast immer diejenige, die

dem Gleichgewichtszustand des Grundzustandes entspricht.

Nun sind solche Berechnungen mit den beiden konventionellen quantenmechanischen Näherungsverfahren, der „Methode der Valenzstrukturen“ (HLSP-Methode) und der „Methode der Molekülbahnen“ (MO-Methode), selbst für relativ einfache Moleküle in bezug auf ihre Übereinstimmung mit den experimentellen Daten häufig recht unbefriedigend, und dies trotz des auch hier schon ziemlich großen Rechenaufwandes. Das gleiche gilt häufig auch für die Berechnung der Elektronenterme von *Atomen* mit dem HARTREE- bzw. HARTREE-FOCKSchen Verfahren des „selbstkonsistenten Feldes“. In allen Fällen wird unter Umständen sogar die energetische Reihenfolge der niederen angeregten Terme falsch wiedergegeben. Als Beispiel hierfür sind in Abb. 1, die einer Arbeit von MOFFITT¹ entnommen wurde, die beobachteten vier tiefsten Terme des Kohlenstoffatoms mit den nach zwei verschiedenen Verfahren berechneten verglichen. In beiden Fällen wird die Reihenfolge der 1S - und 5S -Terme falsch wiedergegeben.

¹ W. MOFFITT, Proc. Roy. Soc., Lond. A **210**, 245 [1951].