

aus der COULOMB-Anregung von ^{160}Dy ermittelten Wert $B(E\ 2; 0 \rightarrow 2) = (4,46 \pm 0,30) \cdot 10^{-48} \text{ e}^2 \cdot \text{cm}^4$.

Der neue Wert der Lebensdauer erfordert zugleich eine Korrektur des von KÜNDIG⁶, MANNING und ROGERS⁹ angegebenen g -Faktors des 87 keV-Niveaus von ^{160}Dy .

MANNING und ROGERS fanden aus der gestörten Winkelkorrelationsmessung mit den 1280 keV – 87 keV- und 1170 keV – 87 keV-Kaskaden das folgende Produkt:

⁹ G. MANNING u. J. ROGERS, Nucl. Phys. **19**, 675 [1960].

$$G_2 \cdot \omega_L \cdot \frac{T_{1/2}}{\ln 2} = 0,19 \pm 0,03$$

mit

$$\omega_L = g \mu_K (\beta B / \hbar).$$

Die verwendete Magnetfeldstärke betrug $B = 12 \text{ kG}$. Mit einem effektiven Feldparameter $\beta = 6,0$ und dem von den beiden Autoren errechneten Abschwächungsfaktor $G_2 = 0,8 \pm 0,12$ ergibt sich der korrigierte g -Faktor zu $g = 0,21 \pm 0,08$.

Wir danken Herrn Prof. Dr. WALCHER für sein förderndes Interesse am Fortgang dieser Arbeit.

Berechnung der Oberfläche von Kernmaterie mit Hilfe spezieller Einteilchen-Wellenfunktionen*

VON FRANZ LANZL

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität Göttingen
(Z. Naturforsch. **17 a**, 640–649 [1962]; eingegangen am 16. April 1962)

Using a YUKAWA interaction between the nucleons the volume energy per particle and the specific surface energy are calculated. These expressions assume a very simple form for a zero range interaction. The space parts of the applied orthogonal single particle wave functions are products of plane waves and a momentum independent function which brings about the decrease in density within the surface layer. First the volume energy per particle as a function of the density in the interior of nuclear matter is minimized. The interaction parameters are so selected that the values of the volume energy per particle and the density at the minimum agree with the experimental data. Then the surface energy as a function of the surface thickness is minimized. The values of the surface energy and the surface thickness in the minimum are compared with the empirical data. They are found to be of the right order of magnitude.

I. Einleitung und Überblick

In der WEIZSÄCKER-Formel für die Bindungsenergie von Atomkernen treten zur Zahl A der Nukleonen und zu $A^{2/3}$ proportionale Glieder auf, die als Volumen- bzw. Oberflächenenergie gedeutet werden. Die weiteren Glieder der WEIZSÄCKER-Formel, wie COULOMB-, Symmetrie- und Paarungsenergie, liegen nicht im Rahmen der folgenden Betrachtungen. Da der allgemeine Verlauf der Bindungsenergien, abgesehen von Abweichungen, die vom Schalen Aufbau der Kerne herrühren, durch die Bindungsenergieformel gut wiedergegeben wird, scheint es vernünftig, die Oberfläche für sich zu betrachten. Eine Bestätigung dafür erhält man aus den Elektronenstreuexperimenten von HOFSTADTER¹, die die Annahme gestatten, daß die Protonendichte im Inneren von schweren Kernen konstant verläuft und am Rande innerhalb einer Schicht, deren Dicke weitgehend vom

Atomgewicht unabhängig ist, nach Null abfällt. Für das Weitere nehmen wir an, daß die Neutronen dieselbe Verteilung wie die Protonen besitzen. Die Oberfläche ist dann als Gebiet veränderlicher Dichte definiert.

Für die Breite t , innerhalb der die Dichte von 90% auf 10% des Wertes im Inneren fällt, findet HOFSTADTER $t = 2,4 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$. Für den Radius, bei dem die Dichte die Hälfte des Wertes im Inneren annimmt, gilt dabei $R_{1/2} = r_0 A^{1/3}$ mit $r_0 = 1,1 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$. Der experimentelle Wert² des Koeffizienten von $A^{2/3}$ in der WEIZSÄCKER-Formel gibt den Wert für die Oberflächenenergie pro Flächeneinheit oder die spezifische Oberflächenenergie S durch die Beziehung: $4 \pi r_0^2 S = 17,8 \text{ MeV}$.

Die Abhängigkeit der Größen t und S von den Eigenschaften der Nukleonen und ihrer Wechselwirkung ist Gegenstand der theoretischen Arbeiten über

* D 7.

¹ Zusammenfassung: R. HOFSTADTER, Rev. Mod. Phys. **28**, 214 [1956].

² S. A. MOSZKOWSKI, Hdb. d. Phys. **39**, 416.



die Kernoberfläche, von denen die wichtigsten kurz angeführt werden. Dabei rechnet man teils mit endlichen Kernen, teils — wie es auch in dieser Arbeit geschieht — mit Kernmaterie, d. h. einem System von sehr vielen Nukleonen ohne Berücksichtigung der COULOMB-Abstoßung, wobei dann nur die Eigenschaften der Kernkräfte in die Berechnung eingehen.

V. WEIZSÄCKER³ benützt zur Bestimmung der Oberflächenenergie nur den kinetischen Anteil, zur Bestimmung der Dicke der Oberfläche die kinetische und potentielle Oberflächenenergie. Dabei finden jedoch nichtorthogonale Einteilchen-Wellenfunktionen Verwendung. Sowohl in den Arbeiten von GOMBAS als auch von BERG und WILETS⁴ ist die Dichte der potentiellen Energie als Funktion der lokalen Teilchendichte angesetzt. Variiert wird der Verlauf der Teilchendichte. SWIATECKI⁵ findet seine orthogonalen Einteilchen-Wellenfunktionen aus einem angenommenen Einteilchenpotential. Die Oberflächenenergie und die Abfallsbreite werden dann Funktionen eines Parameters des Einteilchenpotentials. Der Wert dieses Parameters wird durch das Minimum der spezifischen Oberflächenenergie festgelegt. BRUECKNER u. a.⁶ und RODBERG⁷ verwenden zur Berechnung der potentiellen Energie in endlichen Kernen auch in der Randzone veränderlicher Dichte die K -Matrixelemente, die für konstante Dichte in Kernmaterie gewonnen sind.

In der vorliegenden Arbeit wählen wir die orthogonalen Einteilchen-Wellenfunktionen abhängig von der Abfallsbreite und berechnen damit den Energieausdruck ohne Vernachlässigung in Abhängigkeit vom Gesamtverlauf der Wellenfunktion. Das Programm sieht im einzelnen folgendermaßen aus: Der Verlauf der Dichte soll nur von einer Richtung, die mit x_1 bezeichnet werde, abhängig sein. Der Abfall der Dichte sei symmetrisch bezüglich des Nullpunktes der x_1 -Achse. Außerdem wird die Ausdehnung der Kernmaterie in den beiden anderen Richtungen x_2 , x_3 als groß gegenüber der in x_1 angenommen, so daß gegen den zu x_1 senkrechten Anteil der Oberfläche die übrigen vernachlässigt werden können. Im Inneren von Kernmaterie sind die Einteilchen-Ortsfunktionen wegen der Translationsinvarianz ebene

Wellen. Wir setzen nun unsere Einteilchen-Ortsfunktionen als Produkt aus ebenen Wellen und einer von x_1 abhängigen, allen Teilchen gemeinsamen, reellen Funktion an, die im Inneren gleich eins ist und für $|x_1| \rightarrow \infty$ nach Null strebt. Aus der Orthogonalitätsbedingung ergeben sich Forderungen an die gemeinsame Abfallsfunktion. Nun wird die Form dieser Funktion geeignet gewählt, um mit Hilfe der Gesamtwellenfunktion — einer SLATER-Determinante aus Einteilchen-Wellenfunktionen — den Erwartungswert der Gesamtenergie explizit berechnen zu können. Dabei gelingt die Aufteilung in Volumen- und Oberflächenenergie. Jetzt variiert man als Funktion der Dichte im Inneren die Volumenenergie pro Teilchen und fordert, daß sie den empirischen Wert von -15.75 MeV bei der empirischen Dichte annimmt. Hierdurch werden die Konstanten für die als Zentralkräfte mit den verschiedenen Austauschanteilen angenommenen Nukleonenwechselwirkungen bis auf die Reichweite festgelegt. Dann wird die spezifische Oberflächenenergie als Funktion der Abfallsbreite variiert. Ihr Wert im Minimum und die dazugehörige Abfallsbreite sind abhängig von den Werten der konstanten Dichte im Inneren, der Volumenenergie pro Teilchen und der Reichweite der Kernkräfte und können mit den gemessenen Ergebnissen verglichen werden.

II. Die Wellenfunktion

Wir machen für die Einteilchen-Ortsfunktion den Ansatz

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = (8 L_1 L_2 L_3)^{-1/2} f(x_1) \exp\{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}\}, \quad (1)$$

also ein Produkt aus ebenen Wellen, einer für alle Werte des Wellenzahlvektors \mathbf{k} gleichen, reellen Funktion $f(x_1)$ und einem Normierungsfaktor. Der für verschiedene Impulse jeweils andersartige Abfall am Rand und etwaige Änderungen von \mathbf{k} in der Oberfläche sind dabei nicht berücksichtigt. \mathbf{x} gibt den Ortsvektor mit den Komponenten x_1, x_2, x_3 an. Die ebenen Wellen werden durch die Forderung quantisiert, daß $\exp\{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}\}$ bei $x_\nu = L_\nu$ und $x_\nu = -L_\nu$ ($\nu = 1, 2, 3$) denselben Wert annehmen soll. Die Komponenten von \mathbf{k} werden dann

$$k_\nu = n_\nu \Delta k_\nu = n_\nu (\pi/L_\nu); \quad (2)$$

der Betrag ist $k = (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)^{1/2}$. Die n_ν durchlaufen positive und negative ganze Zahlen.

Zur Durchführung der Orthonormierung stellen wir die Funktion $f^2(x_1)$ folgendermaßen in den einzelnen x_1 -Intervallen dar (vgl. Abb. 1)

³ C. F. v. WEIZSÄCKER, Z. Phys. **96**, 431 [1935].

⁴ Zusammenfassung und Literatur: L. WILETS, Rev. Mod. Phys. **30**, 542 [1958].

⁵ W. J. SWIATECKI, Proc. Phys. Soc., Lond. A **64**, 226 [1951].

⁶ K. A. BRUECKNER, A. LOCKETT u. M. ROTENBERG, Phys. Rev. **121**, 255 [1961].

⁷ L. RODBERG u. V. TEPLITZ, Phys. Rev. **120**, 969 [1960].

$$f^2(x_1) = \begin{cases} u(-x_1 - L_1) \\ 1 + w(-x_1 - L_1) \\ 1 + w(x_1 - L_1) \\ u(x_1 - L_1) \end{cases} \quad \text{für} \quad \begin{cases} -\infty \leq x_1 \leq -L_1, \\ -L_1 \leq x_1 \leq 0, \\ 0 \leq x_1 \leq L_1, \\ L_1 \leq x_1 \leq \infty. \end{cases} \quad (3)$$

$f^2(x_1)$ setzt sich also zusammen aus einer Konstanten vom Wert 1 für $-L_1 \leq x_1 \leq L_1$ und Funktionen u und w , die für den stetig differenzierbaren Übergang vom Wert 1 im Inneren zum Wert Null für $|x_1|$ gegen unendlich sorgen. Der Abfall soll an beiden Seiten symmetrisch, d. h. $f^2(x_1) = f^2(-x_1)$, sein. Es soll betont werden, daß die Einteilchen-Ortsfunktionen über $|x_1| = L_1$ hinausreichen. Das Orthonormierungsintegral lautet:

$$\begin{aligned} \int \varphi_{\mathbf{l}}^*(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= (8 L_1 L_2 L_3)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-L_2}^{L_2} dx_2 \int_{-L_3}^{L_3} dx_3 f^2(x_1) \exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \cdot \mathbf{x}\} \\ &= \delta_{k_2 l_2} \delta_{k_3 l_3} (2 L_1)^{-1} \left\{ \int_{-L_1}^{L_1} \exp\{i(k_1 - l_1) x_1\} dx_1 \right. \\ &\quad \left. + 2(-1)^{(k_1 - l_1) L_1 / \pi} \left[\int_0^{\infty} u(x_1) \cos(k_1 - l_1) x_1 dx_1 + \int_{-\infty}^0 w(x_1) \cos(k_1 - l_1) x_1 dx_1 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

In der x_2 - und x_3 -Richtung haben wir reine ebene Wellen; wegen der periodischen Randbedingungen wird zwischen $-L_2 \leq x_2 \leq L_2$ und $-L_3 \leq x_3 \leq L_3$ integriert. Die nach dem zweiten Gleichheitszeichen angegebene Form erhalten wir, wenn in den Integralen über $u(-x_1 - L_1)$ und $w(-x_1 - L_1)$ die Veränderliche x_1 durch $-x_1$ ersetzt und dann noch eine Translation um die Strecke L_1 entlang der positiven x_1 -Achse ausgeführt wird. Dabei ist angenommen, daß $w(x_1)$ schon für Werte von $|x_1| < L_1$ praktisch verschwindet, was sich für genügend großes L_1 stets erreichen lassen sollte. Die Orthonormierung ist bereits durch das erste Integral erfüllt. Die Integrale in der eckigen Klammer müssen deshalb für alle im Grundzustand vorhandenen k_1 und l_1 verschwinden. Fordert man das Verschwinden sogar für *alle* k_1 und l_1 , so gilt

$$u(x_1) = -w(-x_1). \quad (5)$$

Der Einfachheit halber soll diese stärkere Forderung für das Weitere verwendet werden. Aus der Gültigkeit von (5) und der Forderung für die Stetigkeit von $f^2(x_1)$ findet man

$$u(0) = -w(0) = 1/2.$$

Die Stetigkeit der Tangente ist dadurch automatisch erfüllt.

Der Grund dafür, daß hier die Orthogonalität der Einteilchen-Wellenfunktionen so stark betont

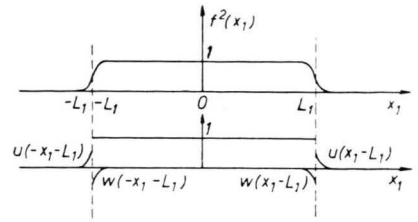


Abb. 1. Oben: angenommener Verlauf von $f^2(x_1)$; unten: die Zerlegung von $f^2(x_1)$ in den verschiedenen x_1 -Intervallen.

wird, ist das Auftreten von zusätzlichen Gliedern im Erwartungswert der Energie für nichtorthogonale Einteilchen-Wellenfunktionen⁸ im Vergleich zu dem in dieser Arbeit verwendeten Energieausdruck. Diese zusätzlichen Glieder liefern Beiträge zur Oberflächenenergie. Die unternommenen Versuche, diese Ausdrücke zu berechnen, scheiterten an deren Komplexität.

Um die Rechnung durchführen zu können, verwenden wir für $u(x_1)$ später die spezielle Form

$$u(x_1) = \frac{1}{2} e^{-a x_1}. \quad (6)$$

Der Parameter a hängt nach der Gleichung

$$t = (2 \ln 5) / a \quad (7)$$

mit der Abfallsbreite t zusammen, innerhalb der $f^2(x_1)$ von 0,9 auf 0,1 fällt.

Die Gesamtwellenfunktion Φ wird in bekannter Weise als SLATER-Determinante aus den Einteilchen-Wellenfunktionen

$$\psi_n = \varphi_n \xi_n \eta_n$$

aufgebaut, die sich aus dem Ortsanteil φ_n nach Gl. (1) und den Spin- und Isospinwellenfunktionen ξ_n und η_n zusammensetzen. Jede Ortsfunktion ist vierfach besetzt, da Protonen und Neutronen mit jeweils 2 möglichen Spinstellungen vorhanden sind. In der

⁸ P. LÖWDIN, Phys. Rev. **97**, 1491 [1955].

Gesamtwellenfunktion kommen alle Impulse bis zu einem Höchstbetrag $\hbar K$ vor, wobei K durch die konstante Dichte nach Gl. (12) bestimmt ist.

Nun kann der Erwartungswert für die Gesamtenergie gebildet werden

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \sum_i \langle \Phi | T_i | \Phi \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle \Phi | v_{ij} | \Phi \rangle, \quad (8)$$

wobei T_i die Einteilchenoperatoren der kinetischen Energie, v_{ij} die Wechselwirkungspotentiale zwischen 2 Teilchen bezeichnen. Die Auswertung der Ausdrücke für die kinetische und potentielle Energie folgt nach einer Einschaltung in den Abschnitten IV und V.

wird angenommen, daß $L_2, L_3 \gg L_1$, d. h. daß nur der Oberfläche senkrecht zur x_1 -Richtung proportionale Glieder zu betrachten sind. Die Summation über k_2 und k_3 kann daher sofort durch Integration ersetzt werden

$$\sum_{\mathbf{k}} g(k_1, k_2, k_3) \approx L_1 L_2 L_3 \pi^{-3} \sum_{k_1=-K}^K \Delta k_1 \int_{k_2^2+k_3^2 \leq K^2-k_1^2} g(k_1, k_2, k_3) dk_2 dk_3$$

mit Δk_1 gemäß Gl. (2). Statt des Integrals über k_2 und k_3 schreiben wir nun das Produkt aus dem von k_1 abhängigen Mittelwert $\bar{g}(k_1)$ innerhalb der betrachteten Kreisscheibe und der Fläche $(K^2 - k_1^2) \pi$ dieser Scheibe. Die Summation über k_1 wird nun nach der EULERSchen Summenformel ausgeführt.

$$\begin{aligned} L_1 L_2 L_3 \pi^{-3} \sum_{k_1=-K}^K \Delta k_1 \bar{g}(k_1) (K^2 - k_1^2) \pi \\ = L_1 L_2 L_3 \pi^{-2} \left\{ \int_{-K}^K \bar{g}(k_1) (K^2 - k_1^2) dk_1 + \frac{\pi}{2 L_1} [\bar{g}(k_1) (K^2 - k_1^2)]_{k_1=K} + \bar{g}(k_1) (K^2 - k_1^2) \Big|_{k_1=-K} \right. \\ \left. + \frac{\pi^2}{60 L_1^2} \frac{d}{dk_1} (\bar{g}(k_1) (K^2 - k_1^2)) \Big|_{k_1=-K}^{k_1=K} + \dots \right\}. \end{aligned}$$

Das erste so erhaltene Glied ist dabei volumenproportional und gleich dem Ausdruck, der durch einfache Ersetzung der Summation durch Integration gewonnen wird. Die folgenden Glieder enthalten neben wachsenden negativen Potenzen von L_1 die Werte der zu integrierenden Funktion bzw. ihrer Ableitungen an den Intervallgrenzen. Der zweite, oberflächenproportionale Term verschwindet (wenigstens für reguläres $\bar{g}(k_1)$) an der Stelle $k_1 = K$ und liefert auch keinen Oberflächenbeitrag, wenn K kein ganzzahliges Vielfaches von Δk_1 ist, wobei an den Grenzen für k_1 das nächstkleinere Vielfache von Δk_1 einzusetzen ist. Die weiteren Glieder tragen wegen der steigenden negativen Potenzen von L_1 keine oberflächenproportionalen Anteile mehr bei.

Für das Weitere benötigen wir folgende bekannte Summen, die durch Einführung von Polarkoordinaten und Integration gewonnen sind:

$$\sum_{\mathbf{k}} 1 = (4 \pi / 3) K^3 L_1 L_2 L_3 \pi^{-3} = A/4; \quad (9)$$

III. Einschaltung über die Summation im \mathbf{k} -Raum

Für das in den Abschnitten IV und V folgende werden die Summationen über die k_v wegen der als groß angenommenen Teilchenzahlen durch Integrationen ersetzt. Es wird nun gezeigt, daß dabei keine Anteile verloren gehen, die als Beiträge zur Oberflächenenergie zu deuten sind.

Wir summieren eine Funktion $g(k_1, k_2, k_3)$ über k_1, k_2, k_3 so, daß die Beträge aller \mathbf{k} kleiner oder gleich dem FERMI-Impuls K sind. $\sum_{\mathbf{k}}$ soll diese Summation hier und für das Weitere bezeichnen. Nun

A ist die Gesamtzahl der Nukleonen des betrachteten Systems; dann ist $A/4$ die Zahl der einfach besetzten Gitterpunkte des \mathbf{k} -Raums in der FERMI-Kugel.

$$\sum_{\mathbf{k}} k^2 = (4 \pi / 5) K^5 L_1 L_2 L_3 \pi^{-3}, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \exp\{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\} \\ = 4 \pi^{-2} L_1 L_2 L_3 (r^{-3} \sin K r - K r^{-2} \cos K r). \end{aligned} \quad (11)$$

Aus Gl. (9) findet man für den konstanten Wert der Dichte im Inneren

$$\varrho_0 = \frac{A}{8 L_1 L_2 L_3} = \frac{2}{3 \pi^2} K^3 = \frac{3}{4 \pi r_0^3}. \quad (12)$$

IV. Kinetische Energie

Wir schreiben den Erwartungswert der kinetischen Energie für den Fall orthogonaler Einteilchen-Wellenfunktionen an und werten ihn für die Orts-

funktion von Gl. (1) aus. Dabei wird angenommen, daß $f(x_1)$ und ihre Ableitung $f'(x_1)$ für $|x_1|$ gegen unendlich nach Null gehen. Den Faktor 4 erhält man wegen der vierfachen Besetzung jeder Einteilchen-Ortsfunktion

$$\begin{aligned}\langle E_{\text{kin}} \rangle &= 4 \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k} | T | \mathbf{k} \rangle \\ &= 4 \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{k}} \left[k^2 + \frac{1}{2L_1} \int_{-\infty}^{\infty} (f'(x_1))^2 dx_1 \right]\end{aligned}\quad (13)$$

(m = mittlere Masse der Nukleonen).

Das erste Glied ist nach Summation über \mathbf{k} proportional zur Teilchenzahl A , das zweite zur Oberfläche $8L_2L_3$. Diese einfache Aufspaltung der kinetischen Energie und, wie man später sieht, auch der potentiellen Energie ist eine direkte Folge des Ansatzes für die Einteilchen-Ortsfunktionen als ein Produkt von ebenen Wellen und einer für alle Werte von \mathbf{k} gleichen Abfallsfunktion $f(x_1)$. In Arbeiten, bei denen dies nicht der Fall ist, wie bei SWIATECKI⁵, wird die Oberflächenenergie als Differenz der Gesamtenergien zweier Systeme mit gleicher Nukleonenzahl definiert, von denen eines am Rand abfallende Dichte aufweist, während das andere für konstante Dichte berechnet ist. Diese allgemeine Definition führt natürlich mit der hier verwendeten Wellenfunktion zu der angegebenen Aufspaltung in Volumen- und Oberflächenenergie.

Nach Gln. (9) und (10) finden wir für die kinetische Volumenenergie pro Teilchen den bekannten Ausdruck

$$\varepsilon_{\text{kin}} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} K^2. \quad (14)$$

Zur Berechnung der kinetischen Oberflächenenergie benutzen wir die durch Differentiation von $f^2(x_1)$ gewonnene Beziehung

$$(f'(x_1))^2 = \frac{1}{4f^2(x_1)} \left(\frac{d}{dx_1} f^2(x_1) \right)^2.$$

Mit denselben Transformationen wie für Gl. (4) und unter Verwendung von Gl. (5) erhalten wir

$$\int_{-\infty}^{\infty} (f'(x_1))^2 dx_1 = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \frac{(u'(x_1))^2}{u(x_1)(1-u(x_1))} dx_1$$

Die Auswertung des Erwartungswerts der potentiellen Energie mit der Zweiteilchenwechselwirkung aus Gl. (16) und der Gesamtwellenfunktion Φ gibt dann, etwa nach¹⁰, einen direkten und einen Austausch-Anteil

$$\begin{aligned}\langle E_{\text{pot}} \rangle &= \frac{1}{2} (W - \frac{1}{4}M + \frac{1}{2}B - \frac{1}{2}H) V_0 \iint d\mathbf{x} d\mathbf{x}' v(r) \varrho(\mathbf{x}) \varrho(\mathbf{x}') \\ &\quad + \frac{1}{2} (-\frac{1}{4}W + M - \frac{1}{2}B + \frac{1}{2}H) V_0 \iint d\mathbf{x} d\mathbf{x}' v(r) |\varrho(\mathbf{x}, \mathbf{x}')|^2.\end{aligned}\quad (18)$$

⁹ Zusammenfassung und Literatur: L. HULTHÉN u. M. SUGAWARA, Hdb. d. Phys. **39**, 42 ff.

mit $u'(x_1)$ als Ableitung von $u(x_1)$ nach x_1 . Der kinetische Teil der spezifischen Oberflächenenergie S_{kin} wird dann mit der speziellen Wahl von $u(x_1)$ nach Gl. (6)

$$S_{\text{kin}} = \frac{\hbar^2}{2m} K^3 a \frac{\ln 2}{6\pi^2}. \quad (15)$$

S_{kin} multipliziert mit der Fläche $8L_2L_3$ gibt die gesamte kinetische Oberflächenenergie.

V. Potentielle Energie

Wir stellen die Wechselwirkung zwischen 2 Nukleonen mit den Koordinaten \mathbf{x} und \mathbf{x}' als eine Summe aus einer direkten Kraft und Austauschkräften dar

$$v(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = V_0 v(r) (W + M P_r + B P_s + H P_r P_s). \quad (16)$$

V_0 ist eine Konstante, welche die Tiefe des Potentials angibt. $v(r)$ bezeichnet ein Zentralpotential, das nur vom Abstand der Teilchen abhängt ($r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$); P_r und P_s sind die Orts- und Spinaustauschoperatoren. Die Koeffizienten W, M, B, H werden so gewählt, daß die Volumenenergie pro Teilchen bei gegebenem K einen gegebenen Wert annimmt und ein Minimum besitzt. Zur Berechnung des Erwartungswerts der Energie können wir nur ein Potential ohne *hard-core* verwenden. Hier wird mit einem YUKAWA-Potential gerechnet

$$v(r) = e^{-br}/(br). \quad (17)$$

Dabei ist $1/b$ ein Maß für die Reichweite der Kernkräfte. Experimentell sind die Werte für b aus der niederenergetischen Streuung von Nukleonen gefunden⁹. Für Singulett-S-Streuung ergibt sich

$$b_s = 1,030 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-1},$$

für Triplett-S-Streuung

$$b_t = 0,725 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-1}.$$

In unserer Rechnung kann jeweils nur ein gemeinsamer Wert für b berücksichtigt werden; sie wurde für $b = 0,77 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-1}$ und $b = 1,00 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-1}$ ausgeführt.

¹⁰ L. ROSENFELD, Nuclear Forces, North-Holland Publishing Company, Amsterdam 1948, S. 221.

In den folgenden Gleichungen stehen nach dem ersten Gleichheitszeichen die Definitionen für die Dichte $\varrho(\mathbf{x})$ bzw. die gemischte Dichte $\varrho(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, die nach dem zweiten Gleichheitszeichen für unseren Fall gemäß den Gln. (9), (11) und (12) ausgeschrieben sind

$$\varrho(\mathbf{x}) = 4 \sum_k \varphi_k^*(\mathbf{x}) \varphi_k(\mathbf{x}) = \varrho_0 f^2(x_1), \quad (19)$$

$$\varrho(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 4 \sum_k \varphi_k^*(\mathbf{x}) \varphi_k(\mathbf{x}') = 2 \pi^{-2} f(x_1) f(x_1') (r^{-3} \sin K r - K r^{-2} \cos K r). \quad (20)$$

Weiter führen wir folgende Abkürzungen ein

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{2} (W - \frac{1}{4} M + \frac{1}{2} B - \frac{1}{2} H) V_0, \quad C_2 = \frac{1}{2} (-\frac{1}{4} W + M - \frac{1}{2} B + \frac{1}{2} H) V_0, \quad F_1 = v(r) \varrho_0^2, \\ F_2 &= v(r) 4 \pi^{-4} (r^{-3} \sin K r - K r^{-2} \cos K r)^2 \\ &= v(r) 4 \pi^{-4} \frac{1}{2} (r^{-6} + K^2 r^{-4} - r^{-6} \cos 2 K r - 2 K r^{-5} \sin 2 K r + K^2 r^{-4} \cos 2 K r) \\ &= v(r) \varrho_0^2 (1 - \frac{1}{5} K^2 r^2 + \dots). \end{aligned} \quad (21)$$

F_1 gibt bis auf eine multiplikative Konstante das Wechselwirkungspotential im direkten Anteil der potentiellen Energie, F_2 das demgegenüber modifizierte, d. h. mit der in $|\varrho(\mathbf{x}, \mathbf{x}')|^2$ auftretenden, rasch abfallenden Funktion von r multiplizierte Austauschpotential. F_2 wurde noch in einer für die spätere Integration bequemer Weise umgeschrieben und weiter die rasch abfallende Funktion für kleine r entwickelt, wobei man sieht, daß das erste Glied von F_2 gleich F_1 ist.

Wir schreiben nun einmal den Erwartungswert der potentiellen Energie von Gl. (18) mit den inzwischen angegebenen Ausdrücken an und zerlegen dann die dabei auftretenden Integrale über $f^2(x_1)$ und $f^2(x_1')$ in Integrale über einzelne Bereiche [vgl. Gl. (3)]

$$\begin{aligned} \langle E_{\text{pot}} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-L_2}^{L_2} dx_2' \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \int_{-L_3}^{L_3} dx_3' \int_{-\infty}^{\infty} f^2(x_1) f^2(x_1') [C_1 F_1(r) + C_2 F_2(r)] dx_1 dx_1' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-L_2}^{L_2} dx_2' \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \int_{-L_3}^{L_3} dx_3' \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-L_1}^{L_1} - 2 \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^0 + 4 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} u(x_1) u(x_1') + 4 \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^0 u(x_1) - 4 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} u(x_1) \right. \\ &\quad \left. - 4 \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^0 u(x_1) u(-x_1') \right\} \cdot [C_1 F_1(r) + C_2 F_2(r)] dx_1 dx_1'. \end{aligned} \quad (22)$$

Da bei den Integrationen in der x_2 - und x_3 -Richtung keine Oberflächenbeiträge von E_{pot} berücksichtigt werden, wird über x_2 und x_3 von $-\infty$ bis $+\infty$, über x_2' und x_3' von $-L_2$ bis L_2 bzw. $-L_3$ bis L_3 integriert. Von den Doppelintegralen in der geschweiften Klammer läuft das erste über x_1 , das zweite über x_1' . $[C_1 F_1(r) + C_2 F_2(r)]$ ist gemeinsamer Integrand aller Integrale. Um zu der zweiten angegebenen Form zu gelangen, sind wieder Variablentransformationen wie für Gl. (4) nötig, wobei zu beachten ist, daß sie für x_1 und x_1' gleichzeitig ausgeführt werden müssen, damit r unverändert bleibt. Ferner wurde berücksichtigt, daß $F_1(r)$ und $F_2(r)$ nur innerhalb der Reichweite der Kernkräfte von Null verschieden sind, weshalb keine Beeinflussung der gegenüberliegenden Oberflächen eintritt. Anschaulich gewinnt man den obenstehenden Ausdruck, wenn man Abb. 1 einmal für x_1 , dann für x_1' aufzeichnet und die bei der Integration über die Teilbereiche entstehenden Beiträge aufschreibt.

Der Erwartungswert der potentiellen Energie wird in Anhang I für die spezielle Wahl von $u(x_1)$ als Exponentialfunktion berechnet. Mit YUKAWA-Potential bekommt man für die potentielle Volumenenergie pro Teilchen

$$\epsilon_{\text{pot}} = C_1 \frac{8 K^3}{3 \pi b^3} + C_2 \pi^{-1} \left\{ 6 \frac{K}{b} - \frac{b}{K} + \frac{1}{4} \left(\frac{b^3}{K^3} + \frac{12 b}{K} \right) \ln \left(1 + \frac{4 K^2}{b^2} \right) - 8 \arctg \left(\frac{2 K}{b} \right) \right\} \quad (23)$$

und für den potentiellen Anteil der spezifischen Oberflächenenergie S_{pot} , wobei die Glieder in derselben Weise wie in Gl. (A 3) geordnet sind,

$$\begin{aligned}
 S_{\text{pot}} = & C_1 \frac{4}{9\pi^3 b} K^6 \left[-\frac{2}{b^3} - \frac{4}{a^2 b} + \frac{1}{(a+b)^2 a} + \frac{4}{a^2(a+b)} \right] \\
 & + C_2 \frac{4}{\pi^3 2b} \left\{ -\left[\frac{K^2 b}{3} - \frac{b^3 + 6K^2 b}{12} \ln\left(1 + \frac{4K^2}{b^2}\right) + \frac{2}{3} K^3 \arctg\left(\frac{2K}{b}\right) \right] \right. \\
 & - \frac{4}{a^2} \left[\frac{K^2 b^3}{60} - \frac{11K^4 b}{30} - \frac{b^5 + 20K^2 b^3}{240} \ln\left(1 + \frac{4K^2}{b^2}\right) + \frac{40K^3 b^2 + 32K^5}{120} \arctg\left(\frac{2K}{b}\right) \right] \\
 & + \frac{1}{a} \left[\frac{K^4}{2} - \frac{K^2(a+b)^2}{12} + \frac{(a+b)^4 + 12K^2(a+b)^2}{48} \ln\left(1 + \frac{4K^2}{(a+b)^2}\right) - \frac{2}{3} K^3(a+b) \arctg\left(\frac{2K}{a+b}\right) \right] \\
 & + \frac{4}{a^2} \left[\frac{K^2(a+b)^3}{60} - \frac{11K^4(a+b)}{30} - \frac{(a+b)^5 + 20K^2(a+b)^3}{240} \ln\left(1 + \frac{4K^2}{(a+b)^2}\right) \right. \\
 & \left. \left. + \frac{40K^3(a+b)^2 + 32K^5}{120} \arctg\left(\frac{2K}{a+b}\right) \right] \right\}. \quad (24)
 \end{aligned}$$

VI. Berechnung und Diskussion der spezifischen Oberflächenenergie und der Abfallsbreite

Die Volumenenergie pro Teilchen, die wir jetzt als Funktion von K betrachten, setzt sich aus dem kinetischen und potentiellen Anteil zusammen, die aus den Gln. (14) und (23) einzusetzen sind

$$\varepsilon(K) = \varepsilon_{\text{kin}}(K) + \varepsilon_{\text{pot}}(K).$$

Für großes K liefert der direkte Teil der potentiellen Energie den Hauptbeitrag, da er mit K^3 wächst. Wenn $\varepsilon(K)$ ein absolutes Minimum besitzt, muß dieser Term und damit auch C_1 positiv sein. Der kinetische Anteil ist ebenfalls immer positiv. Das Austauschglied ist, für gleiche Werte der Faktoren C_1 und C_2 betrachtet, immer kleiner als das direkte Glied und hat dasselbe Vorzeichen wie dieses, da $F_1(r) > F_2(r)$ für alle r außer $r=0$. Damit nun die Volumenenergie als Funktion von K im Minimum den experimentellen Wert von $\varepsilon_0 = -15,75$ MeV (siehe Anm.²) annimmt, muß C_2 negativ und dem Betrage nach viel größer als C_1 sein. Der Wert von K , bei dem das Minimum eintreten soll, wird aus Gl. (12) zu $1,4 \cdot 10^{+13} \text{ cm}^{-1}$ bestimmt. Aus den beiden Bedingungen dafür, daß die Volumenenergie bei gegebenem K den gegebenen Wert ε_0 annimmt und ein Minimum besitzt, gewinnen wir jeweils für einen bestimmten Reichweitensparameter der Kernkräfte die Werte für C_1 und C_2 . Der Grund dafür, warum hier nicht die aus der Nukleonenstreuung und der Deuteronbindungsenergie gefundenen Werte für C_1 und C_2 verwendet werden, liegt darin, daß mit ihnen keine Sättigung zu erzielen ist.

Die spezifische Oberflächenenergie ist die Summe von S_{kin} und S_{pot} , die aus den Gln. (15) und (24) einzusetzen sind $S = S_{\text{kin}} + S_{\text{pot}}$.

Mit den nach oben berechneten Werten für C_1 und C_2 und für eine bestimmte Reichweite der Kernkräfte ist S nur abhängig von der zu $1/a$ proportionalen Dicke der Oberfläche. Im Minimum, das wegen der komplizierten Form von S numerisch gefunden wird, ergeben sich die mit den Messungen zu vergleichenden Werte für die spezifische Oberflächenenergie und die Abfallsbreite.

Im Grenzfall verschwindender Reichweite wird der Ausdruck für die spezifische Oberflächenenergie, die für diesen Fall mit S_0 bezeichnet werde, viel übersichtlicher. Das im Anhang II unabhängig vom speziellen Zentralpotential abgeleitete Ergebnis ist

$$S_0 = \frac{\hbar^2}{2m} K^3 a \frac{\ln 2}{6\pi^2} + (\varepsilon_{\text{kin}} - \varepsilon_0) K^3 \frac{1}{2\pi^2 a}. \quad (25)$$

Für $1/a \rightarrow 0$, d. h. plötzlichen Übergang von konstanter innerer Dichte zur Dichte Null außen, geht S_{kin} gegen unendlich. Dies ist zu verstehen, denn die unendliche Ableitung der Wellenfunktion am Rande bedingt einen unendlich hohen kinetischen Energiebeitrag. Für $1/a \rightarrow \infty$, also immer breiter werdende Oberfläche, wächst der potentielle Anteil von S_0 proportional $1/a$, was man unmittelbar in Gl. (25) erkennt. Bei Entwicklung für kleine a sieht man, daß auch der für nichtverschwindende Reichweite gültige Ausdruck S_{pot} [Gl. (24)] dasselbe Verhalten zeigt. Mit wachsender Oberflächendicke wird nämlich die Zahl der schwächer gebundenen Nukleonen immer größer; diese Verringerung des Betrages der negativen Gesamtenergie muß durch eine zunehmende potentielle Oberflächenenergie hervorgerufen werden.

In Abb. 2 wird die Abhängigkeit der spezifischen Oberflächenenergie von $1/a$ bzw. der dazu proportionalen Abfallsbreite t dargestellt. S_{pot} , das sich

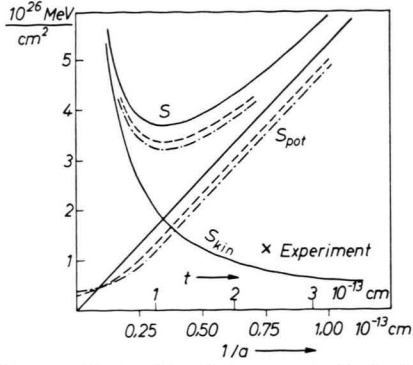


Abb. 2. Die spezifische Oberflächenenergie S , ihr kinetischer Anteil S_{kin} und ihr potentieller Anteil S_{pot} als Funktion der Oberflächendicke t bzw. von $1/a$. Die ausgezogenen Kurven von S und S_{pot} gelten für verschwindende Reichweite der Kernkräfte, d. h. bei $b = \infty$. Die gestrichelten Kurven sind für den Reichweiteparameter $b = 1,00 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-1}$, die strichpunktierten für $b = 0,77 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-1}$ berechnet.

für verschiedene Reichweiten nur wenig ändert, wurde für $1/a = 0; 0,25; 0,50; 1,00 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$ berechnet, dazwischen ist zeichnerisch interpoliert. Die annähernde Linearität von S_{pot} im Gebiet des Minimums von S läßt die Abfallsbreite der Oberfläche für den hier berechneten Fall mit YUKAWA-Potential unabhängig von der Reichweite der Kernkräfte werden. Gegenüber den empirischen Werten

$$S = 1,2 \text{ MeV} \cdot 10^{26} \text{ cm}^{-2} \text{ und } t = 2,4 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$$

ist die hier gefundene spezifische Oberflächenenergie um den Faktor 3 zu groß und die Abfallsbreite um den Faktor 2 zu klein (siehe Tab. 1).

b 10^{13} cm^{-1}	S_{min} $\text{MeV} \cdot 10^{26} \text{ cm}^{-2}$	t_{min} 10^{-13} cm	C_1 MeV	C_2 MeV
0,77	3,25	1,13	3,81	-42,32
1,00	3,40	1,13	12,18	-78,75
∞	3,72	1,13	∞	$-\infty$

Tab. 1.

Der Grund für diese Abweichungen gegenüber den Messungen liegt sowohl am Verlauf der kinetischen wie der potentiellen Oberflächenenergie. S_{kin} kann mit den hier verwendeten Wellenfunktionen nie negativ werden. SWIATECKI⁵, dessen Einteilchen-Ortsfunktionen für verschiedene Impulse im Inneren jeweils am Rande andersartig abfallen, findet negative kinetische Oberflächenenergie. In einer höheren Näherung als der hier durchgeführten ist eine Absenkung von S_{kin} sehr gut möglich. Der hohe Beitrag der potentiellen Oberflächenenergie wird durch den großen Unterschied zwischen den Werten für C_1 und C_2 (vgl. Tab. 1), die durch die Volumenenergie festgelegt sind, hervorgerufen. Das hier verwendete Einteilchenmodell liefert mit den aus der Streuung gewonnenen Daten der Wechselwirkung für den Volumenanteil der Bindungsenergie zu geringe Werte und keine Sättigung. Daher sind auch für die Oberfläche nicht mit dem Experiment übereinstimmende Ergebnisse zu erwarten, wenn wir die Koeffizienten so bestimmen, daß der Volumenanteil der Bindungsenergie richtig wiedergegeben wird. Der Wert der vorliegenden Untersuchung soll auch nicht so sehr in einer quantitativen Übereinstimmung mit den Messungen bestehen, als darin, daß hier eine Formulierung des Oberflächenproblems gegeben wird, bei der die Oberflächenenergie und die Dicke der Oberflächenschicht in einem Variationsverfahren durch die Zweiteilchen-Wechselwirkungen bestimmt werden.

Die Rechnungen wurden auch mit einem Kastenpotential anstatt des YUKAWA-Potentials durchgeführt, wobei man ähnliche Resultate erhält.

Herrn Prof. LÜDERS bin ich für die Anregung zu dieser Arbeit sowie häufige und fruchtbare Diskussionen sehr dankbar.

Anhang I

Berechnung des Erwartungswerts der potentiellen Energie

Wir schreiben den Erwartungswert der potentiellen Energie nach Gl. (22) für die spezielle Wahl von $u(x_1)$ nach Gl. (6) an

$$\langle E_{\text{pot}} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-L_2}^{L_2} dx_2' \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \int_{-L_3}^{L_3} dx_3' \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-L_1}^{L_1} -2 \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^0 + \int_0^{\infty} \int e^{-a(x_1+x_1')} + 2 \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^0 e^{-a x_1} - 2 \int_0^{\infty} \int e^{-a x_1} - \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^0 e^{-a(x_1+x_1')} \right\} \cdot [C_1 F_1(r) + C_2 F_2(r)] dx_1 dx_1'. \quad (\text{A } 1)$$

Zur Integration führen wir folgende Koordinatentransformationen aus

$$y_v = x_v - x_v', \quad z_v = x_v + x_v'. \quad (\text{A } 2)$$

Sie bedeutet je eine Drehung um $-\pi/4$ und Multiplikation mit $1/2$ in den 3 Ebenen (x_v, x_v') . Die bei der Integration in den neuen Variablen auftretende Funktionaldeterminante der inversen Transformation hat den

Wert $1/2$. Die Integrale in Gl. (A 1) vom Typ $\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-L}^L$

erstrecken sich nach der Koordinatentransformation über den Bereich zwischen den 2 Parallelen zur x_v -Achse in

Abb. 3. Die vom Typ $\int_0^{\infty} \int_0^{\infty}$ über den waagrecht schraffierten

fierten und vom Typ $\int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty}$ über den senkrecht schraffierten

Bereich. Nun sind die Integrationen über z_v unabhängig voneinander in kartesischen Koordinaten ausführbar. Für die Integration über die y_v gehen wir zu Polarkoordinaten über: $y_1 = r \cos \vartheta$, $y_2 = r \sin \vartheta \cos \varphi$, $y_3 = r \sin \vartheta \sin \varphi$. Dann kann über φ , was den Faktor 2π gibt, und ϑ integriert werden und wir erhalten nach längerer Rechnung

$$\begin{aligned} \langle E_{\text{pot}} \rangle = & 32 \pi L_1 L_2 L_3 \int_0^{\infty} r^2 [C_1 F_1(r) + C_2 F_2(r)] dr \\ & + 8 L_2 L_3 \pi \int_0^{\infty} [-r^3 - 4 r a^{-2} + r^2 a^{-1} e^{-a r} + 4 r a^{-2} e^{-a r}] [C_1 F_1(r) + C_2 F_2(r)] dr. \end{aligned} \quad (\text{A } 3)$$

Hier ist das erste Glied die Volumen-, das zweite die Oberflächenenergie. Der erste Term im oberflächenproportionalen Integral ist unabhängig von der Dicke der Oberfläche.

Wählen wir für $v(r)$ ein YUKAWA-Potential nach Gl. (17), so läßt sich der Erwartungswert der potentiellen Energie explizit berechnen. Die so gewonnenen Ausdrücke sind in den Gln. (23) und (24) angegeben. Die Integration des direkten Anteils (Glieder mit C_1 als Faktor) ist leicht auszuführen. Beim Austauschanteil bilden wir

$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\varepsilon}^{\infty}$, um jedes Integral mit $F_2(r)$ im Integranden in einzelne Integrale, von denen jedes für sich genommen divergiert, aufspalten zu können. Die divergenten Anteile besitzen im wesentlichen folgende Gestalt mit der für kleine ε angegebenen Reihenentwicklung (siehe etwa Anm. ¹¹)

$$-\int_{\varepsilon}^{\infty} (1/r) \exp \{(-b + i 2 K) r\} dr = C - i \pi + \ln(-b + i 2 K) \varepsilon + O(\varepsilon),$$

(C EULERSche Konstante). Die divergierenden Glieder $\ln(-b \varepsilon)$ heben sich im Gesamtausdruck gegenseitig weg, und durch Bildung des Real- und Imaginärteils von $\ln(1 - i \cdot 2 K/b)$ treten die \ln - und arctg -Funktionen in den Formeln auf.

Anhang II

Die spezifische Oberflächenenergie für verschwindende Reichweite der Kernkräfte

Der Ausdruck für die Volumenenergie pro Teilchen wird mit dem kinetischen Anteil aus Gl. (14) und dem potentiellen aus Gl. (A 3) für ein allgemeines Zentralpotential $v(r)$ und nach kleinen r entwickeltem $F_2(r)$

$$\varepsilon = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} K^2 + \frac{8}{3\pi} K^3 (C_1 + C_2) \int_0^{\infty} r^2 v(r) dr - \frac{8}{15\pi} K^5 C_2 \int_0^{\infty} r^4 v(r) [1 + O(\beta^2)] dr. \quad (\text{A } 4)$$

Dabei treten Integrale über das Produkt von wachsenden geraden ($2n$ -ten) Potenzen von r und dem Potential $v(r)$ auf. Jedes dieser Integrale ist der $(2n+1)$ -ten Potenz der Reichweite β proportional. Die quadratischen und höheren Glieder von β in der eckigen Klammer tragen also zu dem Ergebnis für verschwindende Reichweite nicht

¹¹ E. JAHNKE, F. EMDE u. F. LÖSCH, Tafeln höherer Funktionen, 6. Auflage, B. G. Teubner Verlagsges., Stuttgart 1960.

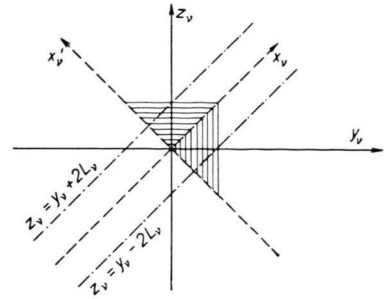


Abb. 3. Die Koordinatenachsen x_v und x_v' und das durch Transformation nach Gl. (A 2) gewonnene Koordinatensystem mit den Achsen y_v und z_v . Von den drei verwendeten Integrationsgebieten liegt das erste im Gebiet zwischen den Parallelen zur x_v -Achse, die beiden anderen sind durch Schraffierung markiert.

bei. Aus den beiden Bedingungen, daß ε für ein bestimmtes bekanntes K im Minimum den Wert ε_0 annehmen soll, bestimmen wir nun die Konstanten C_1 und C_2 . Diese werden in den für kleine r entwickelten Ausdruck von S_{pot} eingesetzt, der aus Gl. (A 3) gewonnen ist

$$S_{\text{pot}} = \varrho_0^2 \pi \int_0^\infty \left[-\frac{3r^2}{a} + O(r^3) \right] \left[(C_1 + C_2) - C_2 \frac{K^2}{5} r^2 + O(r^4) \right] v(r) dr. \quad (\text{A } 5)$$

Daraus und mit S_{kin} nach Gl. (15) erhält man im Limes $\beta \rightarrow 0$ das in Gl. (25) angegebene Ergebnis.

Piezowiderstandseffekt in Galliumarsenid*

Von M. ZERBST

Aus dem Forschungslaboratorium der Siemens & Halske AG, München

(Z. Naturforschg. **17 a**, 649—651 [1962]; eingegangen am 1. Juni 1962)

Die einzelnen Konstanten des Piezowiderstandseffektes in Galliumarsenid wurden aus Messungen des Widerstandes in Abhängigkeit von der mechanischen Belastung in verschiedenen Kristallrichtungen bestimmt. Die Ergebnisse werden mit den bekannten Werten von Germanium und Silicium im Hinblick auf die verschiedene Bandstruktur verglichen.

Unter mechanischer Spannung ändert sich bei Halbleitern ebenso wie bei Metallen der elektrische Widerstand; die Effekte sind jedoch wesentlich größer als bei Metallen und daher von besonderem technischen Interesse. Darüber hinaus bietet die Untersuchung des Piezoeffektes einen tieferen Einblick in den Mechanismus der elektrischen Leitfähigkeit eines Halbleiters und bestätigte z. B. für Germanium und Silicium die Vorstellungen über deren Energiebandstruktur. Über entsprechende Untersuchungen an Galliumarsenid soll hier berichtet werden.

Die an Halbleiter-Einkristallen auftretenden Piezoeffekte sind anisotrop, d. h. abhängig von der Kristallrichtung, in der mechanische Spannung und elek-

trisches Feld wirken; somit darf auch der Widerstand nicht mehr als Skalar betrachtet werden, wie vorstehende Abb. 1 zeigt.

Bei konstanter Stromdichte J folgt aus der Änderung der Feldstärke $\delta \mathfrak{E}$ unter mechanischer Belastung eine Widerstandsänderung $\delta \varrho$. Dabei hat $\delta \varrho$ Tensorcharakter; üblicherweise betrachtet man jedoch den dimensionslosen Tensor der relativen Widerstandsänderung Δ . Dieser ist mit dem Tensor der mechanischen Spannung x durch einen Bitensor (oder Tensor 4. Ranges) verknüpft, der als π bezeichnet wird. Der Bitensor besitzt im allgemeinen Fall 36 Koeffizienten, deren Werte vom Koordinatensystem abhängig sind. Zweckmäßig bezieht man sie auf ein Koordinatensystem, das durch den Kristall bestimmt ist. Wählt man als Koordinaten bei einem kubischen Kristall wie Ge, Si oder GaAs die drei kristallographischen Hauptachsen $[100]$, $[010]$, $[001]$, so reduzieren sich die Koeffizienten wegen der kubischen Symmetrie auf die drei unabhängigen Koeffizienten π_{11} , π_{12} und π_{44} . Der Bitensor hat dann die in Abb. 1 gezeigte Form.

Zur vollständigen Beschreibung des Piezowiderstandseffektes eines kubischen Kristalls sind somit diese drei Koeffizienten zu bestimmen. Aus Messungen der Widerstandsänderung in verschiedenen Kristallrichtungen wurden diese Koeffizienten nach den von SMITH¹ angegebenen Meß- und Auswerteverfahren an n- und p-leitenden Galliumarsenid-Einkristallen ermittelt (vgl. Tab. 1), die freundlicherweise

Änderung der Feldstärke \mathfrak{E} bei konstanter Stromdichte J unter mechanischer Spannung			
$\delta \mathfrak{E} = \{\delta \varrho\} J$	$\frac{1}{\varrho} \delta \mathfrak{E} = \{\Delta_{ij}\} J$	$\Delta_{ij} = \left(\frac{\delta \varrho}{\varrho} \right)_{ij}$	
Tensor der Widerstandsänderung Δ	Tensor der mechanischen Spannung x	$\Delta = \pi x$	
Verknüpft durch Bitensor π (Tensor 4. Ranges) im kubischen Kristall 3 unabhängige Koeffizienten $\pi_{11} \pi_{12} \pi_{44}$	$\pi = \begin{pmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{11} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{12} & \pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} \end{pmatrix}$		

Abb. 1. Piezowiderstandseffekt an Kristallen.

* Vortrag zur Physikertagung in Wien 1961.

¹ C. S. SMITH, Phys. Rev. **94**, 42 [1954].