

KERNFORSCHUNGSZENTRUM

KARLSRUHE

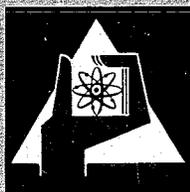
Juni 1967

KFK 625

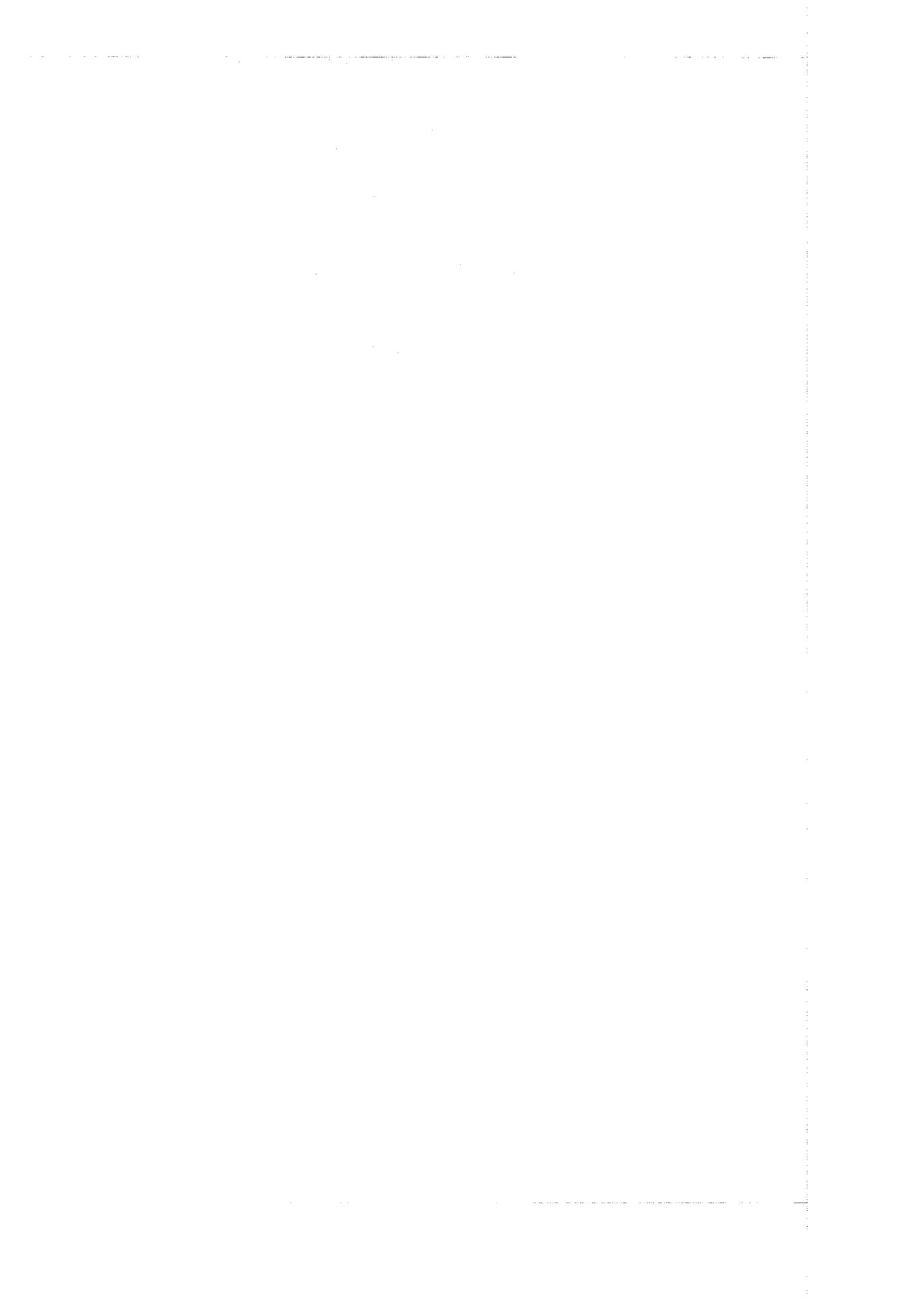
Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Ein Eigenwertverfahren zur Lösung des Einteilchenmodells
für Atomkerne in ihrer Sattelpunktsdeformation

F. Dickmann



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.
KARLSRUHE



Ein Eigenwertverfahren zur Lösung des Einteilchenmodells für Atomkerne in ihrer Sattelpunktsdeformation* **

FRIEDRICH DICKMANN

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
des Kernforschungszentrums Karlsruhe

Eingegangen am 20. Januar 1967

To study saddle point states of fissioning nuclei in the single-particle model nucleon wave functions and energy-levels for highly deformed nuclei are needed. In this paper a method is developed to calculate single-particle wave functions and energy eigenvalues for potentials with any axially symmetric deformation. For that purpose the eigenvalue problem for the partial differential operator H is replaced by a discrete approximation. A special method is worked out to solve the resulting algebraic eigenvalue problem.

1. Einleitung

Das Schalenmodell des Atomkerns hat sich bei der Beschreibung vieler Kerneigenschaften bewährt. Im Laufe seiner Entwicklung ist es mehrmals verfeinert worden. So hat NILSSON¹ Kerndeformationen eingeführt. BELYAEV² und SOLOVIEV³ haben Restwechselwirkungen berücksichtigt.

Bei Verwendung realistischerer nichtlokaler Potentialansätze für deformierte Kerne verliert das Modell viel von seiner ursprünglichen mathematischen Einfachheit. Ziel dieser Arbeit ist es, ein mathematisches Verfahren zu entwickeln, das die Behandlung beliebig axialsymmetrisch deformierter Kerne in lokaler energieabhängiger Näherung gestattet. Dazu ist ein Eigenwertproblem für zwei gekoppelte partielle Differentialgleichungen zu lösen [s. unten Gl. (2.15)]. Wir führen die Aufgabe durch Differenzenapproximation zunächst auf ein algebraisches Eigenwertproblem zurück. Dadurch entsteht eine Differenzenmatrix mit mehreren hundert Reihen. Wir arbeiten ein Verfahren aus, das es gestattet, einzelne Eigenvektoren und Eigenwerte der Differenzmatrix relativ schnell zu

* Inaugural-Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaftlichen Fakultät der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität zu Frankfurt a. M.

** Material supplementary to this paper has been deposited as Document number 9366 with the ADI Auxiliary Publications Project, Photoduplication Service, Library of Congress, Washington 25, D.C. A copy may be secured by citing the Document number and by remitting \$ 1.25 for photoprints, or \$ 1.25 for 35 mm microfilm. Advance payment is required. Make checks or money orders payable to: Chief, Photoduplication Service, Library of Congress.

¹ NILSSON, S. G.: Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Medd. No. 16 (1955).

² BELYAEV, S. T.: Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Math.-fys. Medd. 31, No. 11 (1959).

³ SOLOVIEV, V. G.: Sovjet. Phys. "Doklady" 5, 778 (1960).

bestimmen, auch wenn die Eigenwerte nicht an einem Ende des Spektrums der Matrix liegen. Die Methode besteht aus einer speziellen Kombination des Ostrowskischen Verfahrens zur Eigenwertbestimmung mit einem Projektionsverfahren zur Auflösung linearer Gleichungssysteme.

Nach dieser Einleitung wird im 2. Kapitel die Theorie des Einteilchenmodells skizziert und das zu lösende Eigenwertproblem formuliert. Im 3. Kapitel, das den Kern der Arbeit bildet, wird ein Eigenwertverfahren entwickelt und seine praktische Brauchbarkeit an zwei einfachen Modellproblemen geprüft. Das 4. Kapitel behandelt Anwendungsmöglichkeiten des Verfahrens in der Physik der Kernspaltung.

2. Physik des Einteilchenmodells

2.1. Theorie des Einteilchenmodells

Der Hamiltonoperator eines Atomkerns, der aus A Nukleonen besteht, sei

$$H = \sum_{i=1}^A (T_i + \sum_{k>i} V_{ik}), \quad (2.1)$$

wobei T_i die kinetische Energie eines Nukleons und V_{ik} die Wechselwirkungsenergie zweier Nukleonen bezeichnet.

Die Bestimmung der Eigenzustände von H kann nur näherungsweise erfolgen. In erster Näherung setzt man die Wellenfunktion als antisymmetrisiertes Produkt von Einteilchenfunktionen an und erhält so das Einteilchenmodell des Atomkerns. Versucht man die Einteilchenfunktionen nach dem Hartree-Fock'schen Variationsverfahren (auch Methode des selbstkonsistenten Feldes genannt) zu berechnen, so stößt man auf folgende Schwierigkeit. Bei Verwendung eines „Hartkernpotentials“ zur Beschreibung der Zweinukleonenwechselwirkung V_{ik} enthalten die Hartree-Fock'schen Gleichungen divergente Terme, d. h. der Einteilchenansatz ist dem Problem nicht angemessen. Da die Existenz eines „harten Kernes“ jedoch nicht angenommen werden muß, kann man zwar davon ausgehen, daß die Hartree-Fock'schen Gleichungen sinnvoll sind, sie lassen sich aber in praxi nicht auflösen.

Es gibt nun zwei Richtungen der Theorie.

1. Es werden störungstheoretische Methoden zur Bestimmung der Eigenzustände des Operators (2.1) entwickelt. BRUECKNER et al. ersetzen das Hartkernpotential V_{ik} durch einen Weichkernpotential, die sog. t -Matrix. Die t -Matrix ist Lösung einer Integralgleichung, in der das Einteilchenpotential, das man durch Einsetzen von t in die Hartree-Fock-Gleichungen berechnen will, schon vorkommt. Hieraus ergibt sich eine weitere Selbstkonsistenzbedingung zusätzlich zur Hartree-Fock-Bedingung für die Wellenfunktionen.

Eine Ableitung der Bruecknerschen Methode im Rahmen einer Störungstheorie geben GOLDSTONE⁴ und TOBOCMAN⁵. Angewandt wird die Methode auf Kernmaterie von BRUECKNER und GAMMEL⁶ und auf finite Kerne von BRUECKNER, LOCKETT und ROTENBERG⁷.

2. Im phänomenologischen Einteilchenmodell des Atomkerns nimmt man an, daß ein vorgegebener Einteilchenhamiltonoperator eine gute Näherung für den Hartree-Fockschen selbstkonsistenten Operator sei. Die aus den Eigenvektoren dieses Operators zusammengesetzte Kernwellenfunktion liefert deshalb stationäre Werte der Kernenergie. Das Problem ist dann, geeignete Ansätze für den Einteilchenhamiltonoperator zu machen und dessen Eigenlösungen zu bestimmen.

Das Einteilchenmodell hat mit mathematisch leicht zu behandelnden Modelloperatoren und nur einem⁸⁻¹⁰ bzw. drei¹ freien Parametern verblüffende Erfolge bei der Beschreibung vieler Kerneigenschaften erzielt, z.B. Spin und Parität des Grundzustandes, magnetische Momente und Übergangswahrscheinlichkeiten.

Zur besseren Erklärung der Grundzustandsdeformation und vor allem der Energielücke in den Einteilchenanregungsspektren von Kernen mit gerader Neutronen- und Protonen-Zahl wird das Einteilchenmodell durch Berücksichtigung von Restwechselwirkungen (Paarkraftmodell) korrigiert^{2,3}.

2.2. Phänomenologisches Einteilchenmodell

2.2.1. Ansatz für den Einteilchen-Hamiltonoperator. In neueren Arbeiten zum Einteilchenmodell^{11,12} wird folgende Schrödingergleichung für die Einteilchenwellenfunktion betrachtet:

$$\begin{aligned} & \left[E + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} - U_c(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) \\ &= \left(1 - \frac{\tau}{A} \mathbf{t} \cdot \mathbf{T} \right) \int d^3 \mathbf{r}' \left\{ U_0 \left(\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2} \right) - \right. \\ & \quad \left. - \frac{\sigma r_0^2}{\hbar} \left[\mathbf{s} \cdot \nabla U_0 \left(\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2} \right) \times \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right] \right\} \delta_{\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (2.2)$$

⁴ GOLDSTONE, J.: Proc. Roy. Soc. (London) A **239**, 267–279 (1957).

⁵ TOBOCMAN, W.: Phys. Rev. **107**, 203–208 (1957).

⁶ BRUECKNER, K. A., and J. L. GAMMEL: Phys. Rev. **109**, 1023 (1958).

⁷ BRUECKNER, K. A., A. M. LOCKETT, and M. ROTTENBERG: Phys. Rev. **121**, 255 (1961).

⁸ MAYER, M. G.: Phys. Rev. **75**, 1969 (1954).

⁹ HAXEL, O., J. H. D. JENSEN, u. H. E. SUSS: Z. Physik **128**, 295 (1950).

¹⁰ MAYER, M. G., and J. H. D. JENSEN: Elementary theory of nuclear shell structure. New York and London: John Wiley and Sons 1955.

¹¹ SÜSSMANN, G.: Deut. Phys. Ges., Frankfurt/M. 1965 (Vorabdruck der Fachberichte).

¹² MELDNER, H., G. SÜSSMANN u. W. ULRICH: Z. Naturforsch. **20a**, 1217 (1965).

Dabei ist $U_c(\mathbf{r})$ das auf das Nukleon wirkende Coulombpotential

$$U_c(\mathbf{r}) = (\frac{1}{2} - t_3) e \int \frac{d^3 \mathbf{r}' \rho_e(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.3)$$

Die Ladungskomponente t_3 des Isospins \mathbf{t} hat den Wert $t_3 = -\frac{1}{2}$ für ein Proton und $t_3 = +\frac{1}{2}$ für ein Neutron. $\rho_e(\mathbf{r}')$ ist die Ladungsdichte des Restkerns (d. i. der Kern nach Abzug des Nukleons, dessen Schrödingergleichung gerade betrachtet wird). Die Ladungsdichte des Kerns wird annähernd proportional zu seiner Massendichte angenommen.

T ist der Isospin des Restkerns, τ ein Parameter für die Stärke der Isospinabhängigkeit des Einteilchenpotentials. τ ist positiv ($\tau \approx 2$) und bewirkt, daß Protonen ein tieferes Kernpotential spüren als Neutronen. Dieser Effekt wird jedoch durch das abstoßende Coulombpotential überkompensiert.

$U_0(\mathbf{r})$ ist das lokale Einteilchenpotential. Es ist ein Wellenpotential, das im Kerninnern den konstanten Wert $-V_0$ hat und am Kernrand auf null ansteigt. Hierdurch wird beschrieben, daß das Nukleon im Kerninnern kräftefrei ist und am Kernrand durch Oberflächenkräfte im Kern festgehalten wird (falls seine Energie negativ ist).

Der Term

$$-\frac{\sigma r_0^2}{\hbar} \left[s, \nabla U_0 \left(\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2} \right) \times \mathbf{p} \right] \quad (2.4)$$

beschreibt die Spinabhängigkeit des Potentials. Er ist proportional zum Spin, zum Potentialgradienten (da eine Spinabhängigkeit des Potentials nur an der Kernoberfläche denkbar ist) und zum Impuls des Nukleons. Er ist dreh- und spiegelungs-invariant und geht für kugelsymmetrische Kerne in die bekannte ($\mathbf{I} \cdot \mathbf{s}$)-Kopplung über. Der Vorfaktor ist einfachheitshalber konstant angesetzt, wobei $\sigma \approx \frac{1}{2}$ ein Maß für die Stärke der Spin-Bahn-Kopplung ist.

$\delta_\beta(\mathbf{q})$ ist eine auf den Integralwert 1 normierte Glockenfunktion, z. B. eine Gaußfunktion $\delta_\beta(\mathbf{q}) = (\sqrt{\pi} \beta)^{-3} \exp(-\mathbf{q}^2/\beta^2)$. Der Parameter β ist ein Maß für die Nichtlokalität des Potentials. Im Grenzwert $\beta \rightarrow 0$ geht $\delta_\beta(\mathbf{q})$ in die Deltadistribution über, d. h. man erhält ein lokales Potential. Übliche Werte sind $\beta = 0,8 - 1,4$ fm (s. hierzu ¹³).

Der nichtlokale Ansatz für das Einteilchenpotential wird begründet durch 1. die Nichtlokalität des Nukleon-Nukleon-Potentials^{14,15} und 2. die durch das Pauliprinzip geforderten Austauschsterme im Hartree-Fock-Formalismus.

¹³ ULRICI, W.: Diplomarbeit, Frankfurt 1966.

¹⁴ VAN VLECK, J. H.: Phys. Rev. **48**, 367 (1935).

¹⁵ FRAHN, W. E.: Nuovo cimento **5**, 393 (1957).

2.2.2. *Durchgeführte Modells.* Die praktische Berechnung der Eigenlösungen von Gl. (2.2) ist für einige Sonderfälle bereits durchgeführt worden. Für ein kugelsymmetrisches Einteilchenpotential ($U(\mathbf{q}) = U(|\mathbf{q}|)$) sind bekanntlich l , j und j_z gute Quantenzahlen. Mit dem üblichen Separationsansatz für die Wellenfunktion erhält man als Radialgleichung eine gewöhnliche Integro-Differentialgleichung. Lösungen dieser Gleichung mit einem Woods-Saxon-Potential

$$U(q) = -V_0 \frac{1}{1 + \exp[(q - r_0 A^{1/3})/a_s]} \quad (2.5)$$

hat KRELL¹⁶ numerisch bestimmt. Die verwendeten Parameterwerte sind

1. die Potentialtopftiefe $V_0 = 70 - 95$ MeV,
2. die Radiuskonstante $r_0 = 1,05 - 1,15$ fm,
3. die Oberflächendicke $a_s = 0,65 - 0,75$ fm (s. Fig. 1).

Für deformierte Einteilchenpotentiale hat RÖPER¹⁷ den Potentialansatz von NILSSON¹ verbessert durch folgenden Ansatz für den Einteilchenhamiltonoperator

$$H(E) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U_c(z, \rho) + U_L(E) \left[1 - \frac{\sigma r_0^2}{\hbar} [\mathbf{p} \times \mathbf{s}] \cdot \mathbf{V} \cdot \frac{1}{1 + \exp[(\sqrt{z^2/\kappa^4 + \rho^2 \kappa^2} - r_0 A^{1/3})/a_s]} \right] \quad (2.6)$$

Die Nichtlokalität des Einteilchenpotentials in Gl. (2.2) wird hier durch die Energieabhängigkeit von $U_L(E)$ simuliert. $U_L(E)$ ist Lösung der impliziten Gleichung

$$U_L(E) \cdot \exp \left[\frac{m \beta^2}{2 \hbar^2} (E - U_L(E) - U_c(0, 0)) \right] = -V_0 \cdot \left(1 - \tau \frac{N - Z - 2t_3}{2A} t_3 \right). \quad (2.7)$$

Diese Approximation des nichtlokalen Potentials durch ein lokales mit energieabhängiger Tiefe ist von PEREY und BUCK¹⁸ zuerst für das optische Modell eingeführt und von MELDNER und SÜSSMANN¹⁹ für das Potential der gebundenen Zustände übernommen worden. Sie ist für Kernmaterie dem nichtlokalen Potential äquivalent (s. z. B. ¹¹).

Die Äquipotentialflächen des Operators (2.6) sind rotationssymmetrische, ähnliche Ellipsoide (die Rotationsachse zeigt in z -Richtung).

¹⁶ KRELL, M.: Private Mitteilung.

¹⁷ RÖPER, P.: Diss., Frankfurt 1966.

¹⁸ PEREY, F. G., and B. BUCK: Nuclear Phys. **32**, 353 (1962).

¹⁹ MELDNER, H., and G. SÜSSMANN: Phys. Letters **6**, 353 (1963).

$\kappa^3 = a/b$ ist das Längenverhältnis der Hauptachsen und ρ eine Zylinderkoordinate ($\rho^2 = x^2 + y^2$). Die Ortsabhängigkeit des Potentials geht für $\kappa \rightarrow 1$, d. h. für Kugelsymmetrie in die des Woods-Saxon-Potentials über. Die Eigenlösungen des Operators (2.6) bestimmt RÖPER nach dem Ritzschen Verfahren mit Oszillatoreigenfunktionen als Basisvektoren. Die Wahl dieser Basisfunktionen zusammen mit der für numerische Zwecke günstigen Ortsabhängigkeit des Potentials ermöglicht eine relativ einfache Berechnung der Matrixelemente von $H(E)$ (es sind nur Einfach-Integrationen numerisch durchzuführen).

Das berechnete Termschema für ${}_{70}\text{Yb}^{177}$ wird mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Es ergibt sich, daß ein eher zylinderförmiger Potentialansatz vermutlich besser wäre als der verwendete ellipsoidische.

2.2.3. *Einteilchen-Hamiltonoperator für deformierte Kerne.* Wir betrachten den Einteilchen-Hamiltonoperator

$$H(E) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U_c(z, \rho) + U_L(E) \cdot \left[1 - \frac{\sigma r_0^2}{\hbar} [\mathbf{p} \times \mathbf{s}], \mathbf{V} \right] v(z, \rho). \quad (2.8)$$

Mit diesem Ansatz wird wie bei RÖPER [s. Gl. (2.6)] der nichtlokale Einteilchenoperator (2.2) durch eine sog. äquivalentlokale Näherung ersetzt. Die Ortsabhängigkeit des Einteilchenpotentials wird durch die Funktion $v(z, \rho)$ bestimmt. Sie soll so gewählt werden, daß das Modell folgende Kerneigenschaften reproduziert:

1. Die Materiedichte ist im Kerninnern konstant;
 2. sie nimmt innerhalb einer Zone an der Kernoberfläche stetig ab.
- Die Dicke dieser Zone ist an allen Stellen gleich²⁰.

In Anlehnung an das Woods-Saxon-Potential wählen wir daher

$$v(z, \rho) = \left(1 + \exp \left[\frac{f(z, \rho)}{|\text{grad } f(z, \rho)| \cdot a_s} \right] \right)^{-1}. \quad (2.9)$$

Hierbei beschreibt die Gleichung $f(z, \rho) = 0$ die Linie in der $z - \rho$ -Ebene, auf der die Materiedichte auf die Hälfte ihres Maximalwertes abgesunken ist. Wir bezeichnen diese Linie als Kernkontur in der $z - \rho$ -Ebene. $f(z, \rho)$ ist im Kerninnern negativ, im Kernäußern positiv. Die Division von f durch den Betrag des Gradienten von f in Gl. (2.9) sorgt dafür, daß die Dicke der Oberflächenschicht an allen Stellen annähernd konstant ist. a_s ist der Oberflächendickeparameter [s. Gl. (2.5) ff. und Fig. 1].

Zur Anwendung des Einteilchenmodells auf stark deformierte Kerne, insbesondere auf spaltende Kerne in ihrer Sattelpunktdeformation, eignet sich z. B. folgende Funktion:

$$f(z, \rho) = \rho^2 - \frac{1}{2} [\rho_1^2(z) + \rho_2^2(z) + \sqrt{(\rho_1^2(z) - \rho_2^2(z))^2 + 4a_0^4}], \quad (2.10)$$

²⁰ ACKER, H. L., and H. MARSHALL: Phys. Letters **19**, 127 (1965).

wobei

$$\rho_i^2(z) = -\frac{B_i^2}{A_i^2}(z - z_i)^2 + B_i^2 \quad (i=1; 2) \quad (2.11)$$

zwei Ellipsen mit den Hauptachsen A_i und B_i und den Mittelpunkten z_i sind (s. Fig. 2). Teile der sich schneidenden Ellipsen bilden im wesentlichen die Kontur des Kernes. Der Parameter a_0 sorgt dafür, daß im Schnittpunkt der Ellipse kein Knick der Kontur auftritt.

Die sechs Parameter A_i , B_i , $z_1 - z_2$ und a_0 sind nicht unabhängig voneinander, sondern werden so gewählt, daß das von der Kernoberfläche eingeschlossene Volumen V_k der Bedingung $V_k = \frac{4}{3} \pi r_0^3 A$ genügt. Hierdurch wird die „Inkompressibilität“ der Atomkerne berücksichtigt.

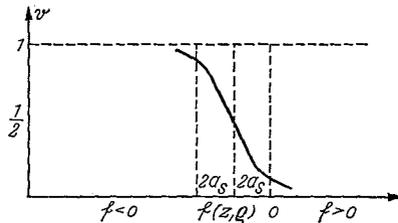


Fig. 1. Verlauf der Materiedichte senkrecht zur Kernoberfläche. In einem Bereich von etwa $4a_s$ variiert die Dichte zwischen 90% und 10% ihres Maximalwertes

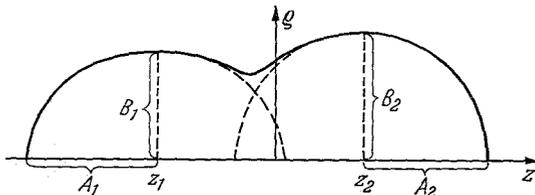


Fig. 2. Die Kernkontur wird von der geglätteten Umhüllung zweier sich schneidenden Ellipsoide gebildet

2.2.4. Die Eigenwertgleichungen. Eine Ortsdarstellung des Zustandsvektors ist für Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen die zweikomponentige Funktion

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi^{(1)}(z, \rho, \varphi) \\ \psi^{(2)}(z, \rho, \varphi) \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

$\psi^{(1)}$ beschreibt die Parallelstellung der z -Komponenten von Spin und Bahndrehimpuls, $\psi^{(2)}$ die Antiparallelstellung.

Da das Einteilchenpotential axialsymmetrisch ist, kommutiert J_z , die Komponente des Drehimpulses auf die Symmetrieachse z , mit H . Wir machen daher den Ansatz

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(z, \rho, \varphi) &= \psi^{(1)}(z, \rho) \cdot e^{i(\Omega - \frac{1}{2})\varphi}, \\ \psi^{(2)}(z, \rho, \varphi) &= \psi^{(2)}(z, \rho) \cdot e^{i(\Omega + \frac{1}{2})\varphi}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

wobei Ω ein Eigenwert von J_z ist. Ω nimmt die Werte $\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots$ an.

Die Einteilchenzustände sind Lösungen der Eigenwertgleichung

$$H(E)\Psi = E\Psi. \quad (2.14)$$

Setzt man hierin die Ortsdarstellung des Hamiltonoperators (2.8) und den Ansatz (2.12) für die Wellenfunktion Ψ ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned} H^{(11)}\psi^{(1)} + H^{(12)}\psi^{(2)} &= E\psi^{(1)}, \\ H^{(21)}\psi^{(1)} + H^{(22)}\psi^{(2)} &= E\psi^{(2)}, \end{aligned} \quad (2.15a)$$

wobei

$$\begin{aligned} H^{(11)} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{(\Omega - \frac{1}{2})^2}{\rho^2} \right) + V + \frac{c}{\rho} (\Omega - \frac{1}{2}) \frac{\partial V}{\partial \rho}, \\ H^{(12)} &= c \left(\frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{dz} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(\Omega + \frac{1}{2})}{\rho} \cdot \frac{\partial V}{\partial z} \right), \\ H^{(21)} &= c \left(\frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{dz} - \frac{(\Omega - \frac{1}{2})}{\rho} \cdot \frac{\partial V}{\partial z} \right), \\ H^{(22)} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{(\Omega + \frac{1}{2})^2}{\rho^2} \right) + V - \frac{c}{\rho} (\Omega + \frac{1}{2}) \frac{\partial V}{\partial \rho} \end{aligned} \quad (2.15b)$$

mit $V = U_L(E) v(z, \rho)$ und $c = -\sigma r_0^2/2$.

(2.15) ist ein gekoppeltes System von Eigenwertgleichungen zur Bestimmung der beiden Komponenten von Ψ .

2.2.5. *Eigenschaften der Eigenwertgleichungen.* 1. Das Gleichungssystem (2.15) ist invariant bei der Transformation (Zeitumkehr) $\Omega \rightarrow -\Omega$, $\psi^{(1)} \rightarrow \psi^{(2)}$, $\psi^{(2)} \rightarrow -\psi^{(1)}$.

Man kann sich daher darauf beschränken, Lösungen von (2.15) für positive Eigenwerte Ω von J_z zu suchen.

2. Das Zentrifugalpotential $(\Omega \mp \frac{1}{2})^2/\rho^2$ in $H^{(11)}$ bzw. $H^{(22)}$ bewirkt, daß $\psi^{(1)}(z, \rho)$ und $\psi^{(2)}(z, \rho)$ bei $\rho=0$ folgendes Verhalten zeigen:

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(z, \rho) &= \rho^{\Omega - \frac{1}{2}} \cdot \chi^{(1)}(z, \rho), \\ \psi^{(2)}(z, \rho) &= \rho^{\Omega + \frac{1}{2}} \cdot \chi^{(2)}(z, \rho). \end{aligned} \quad (2.16)$$

$\chi^{(1)}(z, \rho)$ und $\chi^{(2)}(z, \rho)$ sind bei $\rho=0$ nicht identisch null und haben eine horizontale Tangente, d. h.

$$\left. \frac{\partial \chi^{(i)}(z, \rho)}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} \equiv 0 \quad (i=1; 2). \quad (2.17)$$

3. Ist das Potential eine gerade Funktion von z , d. h. ist $V(z, \rho) = V(-z, \rho)$, dann gilt:

(i) $\psi^{(1)}(z, \rho)$ ist entweder eine gerade oder eine ungerade Funktion von z .

(ii) Ist $\psi^{(1)}$ gerade, dann ist $\psi^{(2)}$ ungerade; ist $\psi^{(1)}$ ungerade, dann ist $\psi^{(2)}$ gerade.

4. Die Eigenwertgleichungen (2.15) sind die Euler-Lagrangeschen Gleichungen folgender Variationsaufgabe. Gesucht werden stationäre Werte des Funktionals

$$E(\Psi) = \frac{(\Psi H \Psi)}{(\Psi \Psi)}, \quad (2.18)$$

wobei

$$(\Psi H \Psi) = \int_{\rho=0}^{\infty} \int_{z=-\infty}^{+\infty} \Psi H \Psi \, dz \, \rho \, d\rho \quad (2.19)$$

und

$$(\Psi \Psi) = \int_{\rho=0}^{\infty} \int_{z=-\infty}^{+\infty} \Psi \Psi \, dz \, \rho \, d\rho. \quad (2.20)$$

3. Ein Verfahren zur Lösung des Eigenwertproblems

3.1. Methoden zur Lösung der Eigenwertgleichungen

Wir betrachten zwei Methoden zur Bestimmung von Näherungslösungen für die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators.

3.1.1. *Das Ritzsche Verfahren.* Es ist das bekannteste Verfahren in der Quantenmechanik, und wir skizzieren es daher nur kurz. Man macht für Ψ den Ansatz

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi^{(1)}(z, \rho) \\ \psi^{(2)}(z, \rho) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N a_i^{(1)} \varphi_i^{(1)}(z, \rho) \\ \sum_{i=1}^N a_i^{(2)} \varphi_i^{(2)}(z, \rho) \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Die $\varphi_i^{(j)}(z, \rho)$ sind zweimal N orthonormierte Funktionen, d. h.

$$\int_{\rho=0}^{\infty} \int_{z=-\infty}^{+\infty} \varphi_i^{(j)}(z, \rho) \varphi_m^{(j)}(z, \rho) \, dz \, \rho \, d\rho = \delta_{i,m}, \quad \text{für } j=1, 2. \quad (3.2)$$

Die $a_j^{(i)}$ sind zunächst unbekannte Koeffizienten. Sie sollen so bestimmt werden, daß das Funktional (2.18) stationäre Werte annimmt. Diese Forderung führt zu einem algebraischen Eigenwertproblem für die $a_j^{(i)}$:

$$H \alpha = E \alpha. \quad (3.3)$$

H ist dabei die Matrix des Operators H bezüglich der Basisfunktionen $\varphi_j^{(i)}$.

Die Güte der gewonnenen Näherungslösungen hängt davon ab, wie gut die wahren Lösungen sich durch die vorgegebenen Basisfunktionen darstellen lassen.

3.1.2. Das Differenzenverfahren. Dies ist ein Verfahren zur Bestimmung einer Näherung für die Funktionswerte der Eigenvektoren Ψ von H an N diskreten Punkten $P_{ij} = (z_i, \rho_i)$, den sog. Netzknoten. Die Näherung besteht darin, daß man die gekoppelten Differentialgleichungen (2.15) diskret approximiert, d. h. die Differentialoperatoren, die auf die Wellenfunktion wirken, durch Differenzennäherungen ersetzt. Es resultiert ein algebraisches Eigenwertproblem

$$H\Psi = E\Psi, \quad (3.4)$$

wobei die Komponenten des Vektors Ψ die Näherungswerte der Wellenfunktion an den Netzknoten sind.

3.1.3. Vergleich der beiden Verfahren. Das Ritzsche Verfahren ist sicher dann dem Differenzenverfahren überlegen, wenn man schon gute Näherungen für die Eigenlösungen kennt, d. h. wenn sich eine Eigenlösung aus nur wenigen Basisfunktionen zusammensetzen läßt, und die Berechnung der Matrixelemente des Hamiltonoperators bezüglich der Basisfunktionen nicht zu aufwendig ist.

Das Differenzenverfahren ist dann vorteilhaft, wenn man die Zahl der Basisfunktionen beim Ritzschen Verfahren so groß wählen muß, daß sie mit der Zahl der Netzknoten beim Differenzenverfahren vergleichbar ist. Der Vorteil des Differenzenverfahrens besteht dann darin, daß sich die Matrixelemente des Hamiltonoperators leichter berechnen lassen als beim Ritzschen Verfahren. Sie sind oft null.

Die vorliegende Arbeit benutzt das Differenzenverfahren.

3.2. Symmetrische Differenzenmatrix

3.2.1. Wahl der Netzknoten. Bei der Wahl der Netzknoten berücksichtigt man, daß die Wellenfunktion im Kerninnern oszilliert und im Kernäußern exponentiell abfällt. Die Netzknoten werden daher im Kerninnern dichter gelegt als im Kernäußern. Ihre Lage läßt sich folgendermaßen leicht beschreiben. Zunächst wird die Halbebene $-\infty < z < \infty$, $0 < \rho < \infty$ durch die Transformation

$$\begin{aligned} z = z(s) &= p_z s \left(1 + \frac{q_z s^2}{1 - s^2} \right), \\ \rho = \rho(r) &= p_R r \left(1 + \frac{q_R r^2}{1 - r^2} \right) \end{aligned} \quad (3.5)$$

auf ein endliches Gebiet abgebildet. Die Konstanten p_z , p_R , q_z und q_R werden dabei so gewählt, daß das Kerninnere annähernd linear auf die s - r -Ebene abgebildet wird; das Kernäußere wird mit zunehmendem Abstand vom Kern immer stärker verkleinert.

Die Ableitungen von z und ρ nach den Variablen s und r werden durch Striche angedeutet:

$$z'(s) = \frac{dz(s)}{ds}; \quad \rho'(r) = \frac{d\rho(r)}{dr}.$$

Die Strecken $-1 < s < +1$ und $0 < r < 1$ werden nun jeweils äquidistant unterteilt, so daß sich ein rechteckiges Netz mit festen Maschenweiten in s - und r -Richtung ergibt (s. Fig. 4), dessen Knoten die Netzpunkte sind.

Ein Netzpunkt $P_{i,j}$ hat in der s - r -Ebene die Koordinaten

$$\begin{aligned} s_i &= (i - \frac{1}{2}) \cdot \text{SIGN}(i) \cdot h_I; \\ r_j &= (j - \frac{1}{2}) \cdot h_J; \\ (i &= -I, -I+1, \dots, I) \\ (j &= 1, 2, \dots, J) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Die Schrittweiten sind

$$h_I = \frac{1}{I + \frac{1}{2}}, \quad h_J = \frac{1}{J + \frac{1}{2}}. \quad (3.7)$$

Bei dieser Einteilung gibt es $N = J \cdot 2 \cdot I$ Netzpunkte. Die Koordinaten des Punktes $P_{i,j}$ in der z - ρ -Ebene erhält man nun leicht durch Einsetzen der Gln. (3.6) in die Gln. (3.5).

Die Abstände der Netzpunkte von den Achsen des Koordinatensystems sind halbzahlige Vielfache der Schrittweiten. Hierdurch lassen sich die Randbedingungen an die Wellenfunktion (s. unter 3.2.4) leichter berücksichtigen.

Um einen Netzpunkt durch nur einen Index kennzeichnen zu können, numerieren wir die Netzpunkte spaltenweise von unten nach oben

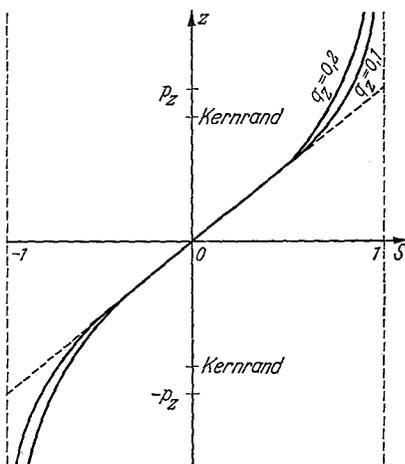


Fig. 3. Die Transformation $z = z(s)$. $2 \cdot p_z$ ist etwas größer als der größte Kerndurchmesser. q_z ist von der Größenordnung 0,1

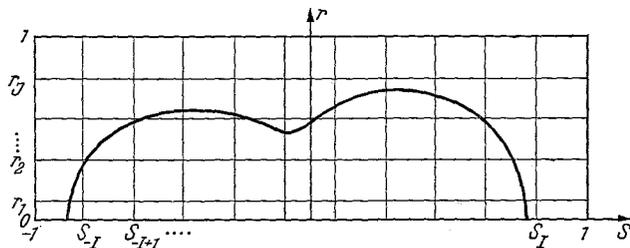


Fig. 4. Die Netzpunkte in der s - r -Ebene

(s. Fig. 4), beginnend mit der äußersten linken Spalte. Hierdurch ergibt sich:

$$P_n = P_{i,j}, \text{ wobei } n = (I+i) \cdot J + j. \quad (3.8)$$

3.2.2. *Symmetrisierung.* Um das Eigenwertproblem für den Differentialoperator H [Gl. (2.15)] durch ein algebraisches Eigenwertproblem mit einer symmetrischen Differenzenmatrix approximieren zu können, multiplizieren wir die Gln. (2.15) von links mit $\sqrt{\rho(r) \rho'(r) z'(s)}$ und substituieren

$$\sqrt{\rho(r) \cdot \rho'(r) \cdot z'(s)} \psi^{(i)}(z(s), \rho(r)) = \varphi^{(i)}(s, r), \quad (i=1; 2). \quad (3.9)$$

Hiermit erhält man aus den Gln. (2.15)

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(11)} \varphi^{(1)} + \hat{H}^{(12)} \varphi^{(2)} &= E \varphi^{(1)}, \\ \hat{H}^{(21)} \varphi^{(1)} + \hat{H}^{(22)} \varphi^{(2)} &= E \varphi^{(2)}, \end{aligned} \quad (3.10a)$$

wobei

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(11)} &= \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\rho^{\Omega-\frac{1}{2}} \sqrt{\rho \rho'}} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\rho^{2\Omega}}{\rho'} \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{\rho^{\Omega-\frac{1}{2}} \sqrt{\rho \rho'}} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\sqrt{z'}} \frac{\partial}{\partial s} \frac{1}{z'} \frac{\partial}{\partial s} \frac{1}{\sqrt{z'}} \right) + V + \frac{c(\Omega-\frac{1}{2})}{\sqrt{\rho \rho'}} \frac{\partial V}{\partial r} \frac{1}{\sqrt{\rho \rho'}}, \\ \hat{H}^{(12)} &= \frac{c}{\sqrt{\rho' z'}} \left(\frac{\partial V}{\partial r} \frac{\partial}{\partial s} - \frac{\partial V}{\partial s} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\Omega \rho'}{\rho \sqrt{z'}} \frac{\partial V}{\partial s} \right) \frac{1}{\sqrt{\rho' z'}}, \\ \hat{H}^{(21)} &= \frac{c}{\sqrt{\rho' z'}} \left(\frac{\partial V}{\partial s} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\partial V}{\partial r} \frac{\partial}{\partial s} - \frac{\Omega \rho'}{\rho \sqrt{z'}} \frac{\partial V}{\partial s} \right) \frac{1}{\sqrt{\rho' z'}}, \\ \hat{H}^{(22)} &= \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\rho^{\Omega-\frac{1}{2}} \sqrt{\rho \rho'}} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\rho^{2\Omega}}{\rho'} \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{\rho^{\Omega-\frac{1}{2}} \sqrt{\rho \rho'}} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\sqrt{z'}} \frac{\partial}{\partial s} \frac{1}{z'} \frac{\partial}{\partial s} \frac{1}{\sqrt{z'}} + \frac{2\Omega}{\rho^2} \right) + V - \frac{c(\Omega+\frac{1}{2})}{\sqrt{\rho \rho'}} \frac{\partial V}{\partial r} \frac{1}{\sqrt{\rho \rho'}}. \end{aligned} \quad (3.10b)$$

3.2.3. *Wahl der Differenzenformeln.* Wir verwenden folgende einfache Differenzenformeln²¹

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \varphi(s_i, r_j) &\approx \frac{1}{2h_j} [-\varphi(s_i, r_{j-1}) + \varphi(s_i, r_{j+1})], \\ f(r_j) \frac{\partial}{\partial r} g(r_j) \frac{\partial}{\partial r} f(r_j) \varphi(s_i, r_j) & \\ &\approx \frac{f(r_j)}{h_j^2} [g(r_{j-\frac{1}{2}}) f(r_{j-1}) \varphi(s_i, r_{j-1}) + \\ &\quad - (g(r_{j-\frac{1}{2}}) + g(r_{j+\frac{1}{2}})) f(r_j) \varphi(s_i, r_j) + g(r_{j+\frac{1}{2}}) f(r_{j+1}) \varphi(s_i, r_{j+1})], \end{aligned} \quad (3.11)$$

²¹ COLLATZ, L.: The numerical treatment of differential equations. Third edition. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer 1960.

wobei z. B.

$$f(r) = \frac{1}{\rho(r)^{\Omega - \frac{1}{2}} \cdot \sqrt{\rho(r) \cdot \rho'(r)}}, \quad \text{und} \quad g(r) = \rho^{2\Omega}(r) / \rho'(r) \cdot h_J$$

ist die Schrittweite in r -Richtung [Gl. (3.7)]. Diese Differenzenformeln und entsprechende Formeln für die Ableitungen nach s werden in die Differentialgleichungen (3.10) eingesetzt.

3.2.4. *Randbedingungen.* Als Randbedingungen stellen wir

$$1. \varphi^{(i)}(s, r) = 0 \text{ für } s = \pm 1 \text{ und für } r = 1; (i = 1, 2), \quad (3.12a)$$

$$2. \varphi^{(i)}(s, r) / \rho(r)^{\Omega - \frac{1}{2}} \text{ sei differenzierbar für } r = 0. \quad (3.12b)$$

Wenn das Einteilchenpotential spiegelsymmetrisch ist ($V(z, \rho) = V(-z, \rho)$), gilt (s. oben 2.2.5, Ziff. 3)

$$3. \varphi^{(i)}(-s, r) = \pm \varphi^{(i)}(+s, r). \quad (3.12c)$$

Man braucht daher nur Netzpunkte für positive s -Werte zu betrachten und verwendet Gl. (3.12c) als Randbedingung bei $s = 0$.

Die Berücksichtigung dieser Randbedingungen in den Differenzenformeln wird durch die günstige Wahl der Netzpunkte erleichtert. Wir betrachten obige drei Randbedingungen einzeln.

Zu 1. Schreibt man die Differenzenformeln (3.11) für Netzpunkte mit $r = r_J$ oder $s = s_{\pm I}$ (s. Fig. 3) an, so treten wegen $r_J + h_J = 1$ und $s_{\pm I} \pm h_I = \pm 1$ Werte der Wellenfunktion für $r = 1$ oder $s = \pm 1$ auf; diese sind nach den Randbedingungen (3.12a) null.

Zu 2. Wegen der Randbedingung (3.12b) kann man die zweite Differenzenformel (3.11) auch bei $r_1 = h_J/2$ anwenden. Funktionswerte der Wellenfunktion für

$$r = r_1 - h_J = -\frac{h_J}{2}$$

treten dabei nicht auf, weil

$$g\left(r_1 - \frac{h_J}{2}\right) = 0$$

[s. oben Gl. (3.11)ff.].

Zu 3. Die Randbedingung (3.12c) läßt sich ebenfalls leicht in die Differenzenformeln einsetzen, da $s_1 - h_I = s_{-1} = -s_1$ ist.

3.2.5. *Eigenschaften der Differenzenmatrix.* Schreibt man die Differenzennäherung der Differentialgleichungen (3.10) für alle Netzpunkte unter Berücksichtigung der Randbedingungen auf, so erhält man ein algebraisches Eigenwertproblem

$$H \Phi = E \Phi. \quad (3.13)$$

Dabei ist die Matrix H eine Differenzennäherung des Differentialoperators H und Φ ein Vektor mit $2N$ Komponenten ($N=2I \cdot J$ ist die Zahl der Netzpunkte). H hat folgende Eigenschaften:

1. Die Matrix ist symmetrisch, d. h. $H_{ik} = H_{ki}$.
2. Die Matrix hat viele Nullelemente, da die Differenzenformeln (3.11) den Wert der Wellenfunktion Φ an einem Netzpunkt P_n nur mit Werten von Φ an den nächsten Nachbarpunkten von P_n koppeln. In einer Matrixzeile sind von $2N$ Matrixelementen höchstens 10 von null verschieden. In Fig. 5 haben wir die von null verschiedenen Matrixelemente

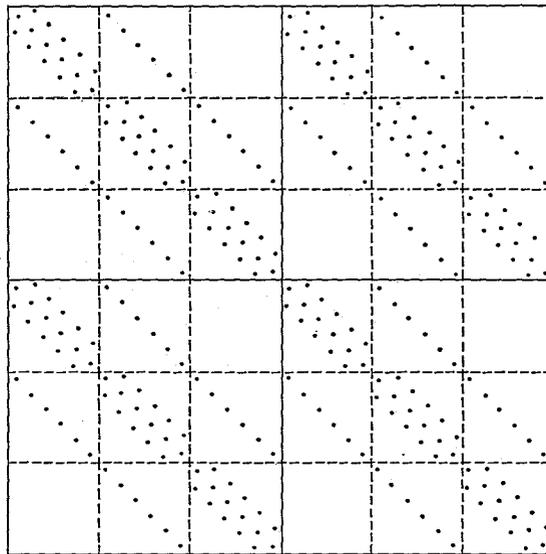


Fig. 5. Erläuterungen im Text § 3.2.5

durch Punkte angedeutet. Man erkennt, daß H in vier große Blöcke, die wir durch Striche voneinander getrennt haben, unterteilt ist. Jeder dieser Blöcke entspricht einem der Differentialoperatoren $H^{(ik)}$ [Gln. (2.15b)]. Die Blöcke $H^{(12)}$ und $H^{(21)}$ verkoppeln die Komponenten $\varphi^{(1)}$ und $\varphi^{(2)}$ von Φ miteinander (Spin-Bahn-Kopplung). Die vier großen Blöcke zerfallen ihrerseits wieder in Unterblöcke. Im Block $H^{(11)}$ z. B. verkoppelt jeder kleine Block außerhalb der Diagonalen die Werte von $\varphi^{(1)}$ an zwei benachbarte Spalten des Netzes. Innerhalb eines kleinen Diagonalblocks verkoppelt jedes Element außerhalb der Diagonalen die Werte von $\varphi^{(1)}$ an zwei benachbarten Netzpunkten in einer Spalte des Netzes.

3.2.6. *Genauigkeit der Approximation.* Über die Genauigkeit, mit der die Komponenten des Differenzenvektors mit den Werten der Lösung

der Differentialgleichungen an den einzelnen Netzpunkten übereinstimmen, lassen sich leicht zwei Aussagen machen.

1. Die Genauigkeit hängt von der zu berechnenden Wellenfunktion selbst ab. Höhere Einteilchenniveaus, für die die Wellenfunktion viele Knoten hat und daher stark oszilliert, werden durch das Differenzenverfahren ungenauer berechnet als die unteren Einteilchenniveaus, für die die Wellenfunktion vergleichsweise glatt ist.

2. Da wir die Differenzenformeln und die relative Lage der Netzpunkte vorgegeben haben, hängt die Genauigkeit noch von der Anzahl der Netzpunkte ab. Die Differenzenapproximation ist um so genauer je mehr Netzpunkte man verwendet. Die Genauigkeit kann jedoch durch Verwendung von mehr Netzpunkten in praxi nicht beliebig gesteigert werden. Zwei Gründe hierfür sind: 1. der größere Einfluß von Rundungsfehlern bei der numerischen Rechnung, 2. die Zunahme der Rechenzeit mit der Zahl der Netzpunkte.

3.3. Das Eigenwertverfahren

3.3.1. *Auswahl des Verfahrens.* Die Auswahl des numerischen Verfahrens zur Bestimmung von Eigenwerten und Eigenvektoren der Aufgabe (3.13) wird durch folgende Tatsachen bestimmt:

1. Die Zahl der Zeilen und Spalten von H ist von der Größenordnung 1000. (Ein Netz mit 12 Punkten in ρ -Richtung und 40 Punkten in z -Richtung hat $12 \cdot 40 = 480$ Netzpunkte und führt dadurch wegen der Spin-Bahn-Kopplung zu Matrizen mit $2 \cdot 480 = 960$ Zeilen und Spalten.)

2. Von den ca. 1000 Eigenwerten und Eigenvektoren braucht man nur einen.

Untersucht man die bekannten Eigenwertverfahren auf ihre Anwendbarkeit bei unserem Problem, so ergibt sich:

1. Direkte Verfahren sind bei Matrizen mit mehreren hundert Reihen zu aufwendig. (Bei direkten Verfahren wird zuerst in einer festen Anzahl von Rechenschritten das charakteristische Polynom der Matrix H aufgestellt. In einem zweiten Schritt werden die Eigenwerte, die die Nullstellen des Polynoms sind, bestimmt. Bei Kenntnis der Eigenwerte werden in einem dritten Schritt die Eigenvektoren berechnet; s. z. B. ZURMÜHL²².)

2. Von den iterativen Verfahren scheiden diejenigen als zu aufwendig aus, die die Matrix H in einer Folge von Transformationen nach und nach diagonalisieren. Man erhält bei diesen Verfahren schließlich alle Eigenwerte, braucht aber nur einen.

²² ZURMÜHL, R.: Matrizen und ihre technischen Anwendungen, 3. Aufl. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer 1961.

3. Die Potenz-Iteration (in der deutschen Literatur von Misessches Iterationsverfahren genannt, s. z.B. ²²) scheidet ebenfalls aus. Dieses Verfahren und seine Varianten sind geeignet zur Berechnung eines Eigenvektors, dessen Eigenwert an einem Ende des Eigenwertspektrums liegt.

4. Als für unser Problem geeignet erweist sich schließlich die gebrochene Iteration ^{23,24}. Dieses Verfahren bestimmt genau einen Eigenwert E_i und den zugehörigen Eigenvektor Φ_i , wobei E_i an beliebiger Stelle im Eigenwertspektrum liegen darf. Das Verfahren wird im folgenden erläutert.

3.3.2. *Beschreibung des Verfahrens und seiner Eigenschaften.* $E^{(0)}$ und $\Phi^{(0)}$ seien Schätzungen für einen gesuchten Eigenwert und den zugehörigen Eigenvektor. In der einfachsten Variante des Verfahrens ändert man nun allein die Eigenvektorschätzung nach der Vorschrift

$$(H - E^{(0)}) \Phi^{(n+1)} = \Phi^{(n)}. \quad (3.14a)$$

Hierbei wird angenommen, daß der Schätzwert $E^{(0)}$ nicht genau mit einem der Eigenwerte E_i übereinstimmt. Das Gleichungssystem (3.14a) zur Bestimmung von $\Phi^{(n+1)}$ hat dann eine eindeutig bestimmte Lösung. Aus (3.14a) folgt

$$\Phi^{(n)} = (H - E^{(0)})^{-n} \Phi^{(0)}. \quad (3.14b)$$

Die Eigenschaften des Iterationsverfahrens erkennt man leicht, wenn man $\Phi^{(0)}$ formal nach den noch unbekanntenen Eigenzuständen Φ_i entwickelt:

$$\Phi^{(0)} = \sum_{i=1}^{2N} \alpha_i^{(0)} \Phi_i. \quad (3.15a)$$

Setzt man Gl. (3.15a) in (3.14b) ein, so ergibt sich

$$\Phi^{(n)} = \sum_{i=1}^{2N} \frac{\alpha_i^{(0)}}{(E_i - E^{(0)})^n} \Phi_i = \sum_{i=1}^{2N} \alpha_i^{(n)} \Phi_i. \quad (3.15b)$$

Aus Gl. (3.15b) erkennt man:

1. Ist der Startvektor $\Phi^{(0)}$ auf eins normiert, d.h. ist $\sum_i \alpha_i^{(0)2} = 1$, so ist $\Phi^{(n)}$ i.a. nicht auf eins normiert, d.h. $\sum_i \alpha_i^{(n)2} \neq 1$. $\Phi^{(n)}$ ist also nur bis auf eine Normierungskonstante bestimmt.

2. Das Verfahren konvergiert auf den Eigenvektor Φ_j , dessen Koeffizient $\alpha_j^{(n)}$ relativ zu den anderen Koeffizienten als Funktion von n am stärksten wächst. Φ_j ist daher der Eigenvektor, dessen Eigenwert E_j

²³ WIELANDT, H.: Bestimmung höherer Eigenwerte durch gebrochene Iteration. Ber. B 44/J/37 der Aerodynam. Vers.-Anst. Göttingen 1944.

²⁴ OSTROWSKI, A. M.: Arch. Rational Mech. Anal. 1, 233 (1957).

näher bei $E^{(0)}$ liegt als irgendein anderer Eigenwert E_i . Das Verfahren konvergiert um so schneller auf Φ_j , je größer das Verhältnis $|E_m - E^{(0)}|/|E_j - E^{(0)}|$ ist, wobei E_m der am zweitnächsten bei $E^{(0)}$ gelegene Eigenwert ist.

3.4. Auflösung des Gleichungssystems $(H - E^{(0)}) \Phi^{(n+1)} = \Phi^{(n)}$

3.4.1. *Auswahl des Lösungsverfahrens.* Bei jedem Schritt der gebrochenen Iteration ist das Gleichungssystem (3.14a) nach $\Phi^{(n+1)}$ aufzulösen. Wir setzen $\Phi^{(n+1)} = \mathfrak{x}$ und $\Phi^{(n)} = b$, um uns von den Indizes n und $n+1$ zu befreien. Hiermit lautet die Gl. (3.14a)

$$(H - E^{(0)}) \mathfrak{x} = b. \quad (3.16)$$

Untersucht man die bekannten Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme auf ihre Anwendbarkeit bei unserem Problem, so ergibt sich:

1. Der Gaußsche Algorithmus, ein direktes Verfahren (s. z. B. ZURMÜHL²²), ist bei Matrizen mit mehreren hundert Reihen zu aufwendig. Die Zahl der Rechenoperationen ist nämlich dem Quadrat der Reihenzahl proportional, außerdem werden viele Nullelemente von H im Verlauf der Rechnung mit von null verschiedenen Elementen besetzt, wodurch sich der Bedarf an Speicherplätzen in der Rechenmaschine erhöht.

2. Iterative Verfahren sind bei großen Matrizen zu bevorzugen, wenn ihre Konvergenz nicht zu schlecht ist, denn der Rechenaufwand pro Zyklus steigt nur proportional zur Reihenzahl der Matrix H .

3. Das bekannteste iterative Verfahren, das Gauß-Seidelsche, konvergiert nicht. Wenn nämlich $E^{(0)}$ eine Schätzung für einen Eigenwert E_i ist, der nicht an einem Ende des Spektrums liegt, hat die Matrix $(H - E^{(0)})$ sowohl positive als auch negative Eigenwerte, und damit ist eine notwendige Konvergenzbedingung nicht erfüllt (Ostrowski-Reich-Theorem, s. z. B. VARGA²⁵).

4. Als für unser Problem geeignet erweist sich schließlich ein von KACZMARZ²⁶ (s. auch²⁷) angegebenes Iterationsverfahren, das im folgenden beschrieben wird.

3.4.2. *Beschreibung des Verfahrens und seiner Konvergenzeigenschaften.* $\mathfrak{x}^{(0)}$ sei ein Schätzvektor für die Lösung des Gleichungssystems (3.16).

²⁵ VARGA, R. S.: Matrix iterative analysis. Englewood Cliffs/N. J.: Prentice-Hall 1962.

²⁶ KACZMARZ, S.: Angenäherte Auflösung von Systemen linearer Gleichungen. Bull. Intern. acad. polon., Classe sci. nat. (A), sci. math. 1937, 355–357.

²⁷ FORSYTHE, G. E., and W. R. WASON: Finite-difference methods for partial differential equations; New York and London: John Wiley and Sons, second printing 1964.

Die Iterationsvorschrift von KACZMARZ lautet

$$\bar{x}^{(n)} = \bar{x}^{(n-1)} - t_n \alpha_n, \quad n=1, 2, \dots, 2N; \quad (3.17)$$

dabei ist α_n der n -te Zeilenvektor der Matrix $(H-E^{(0)})$. t_n ist ein Parameter, der so bestimmt wird, daß die n -te Gleichung des Systems (3.16) erfüllt ist:

$$\alpha_n (\bar{x}^{(n-1)} - t_n \alpha_n) = b_n.$$

Hieraus folgt

$$t_n = \frac{-b_n + (\alpha_n \bar{x}^{(n-1)})}{(\alpha_n \alpha_n)}. \quad (3.18)$$

Man erfüllt also in einem Schritt immer nur eine der $2N$ Gleichungen des Systems (3.16). Ist $\bar{x}^{(2N)}$ noch keine ausreichend gute Approximation für \bar{x} , so setzt man $\bar{x}^{(2N)} = \bar{x}^{(0)}$ und fängt einen neuen Zyklus an. Da die Zeilenvektoren α_n von $(H-E^{(0)})$ nur wenige von null verschiedene Komponenten haben, ist ein einzelner Iterationsschritt, bei dem t_n aus Gl. (3.18) und $\bar{x}^{(n)}$ aus Gl. (3.17) berechnet wird, schnell durchzuführen.

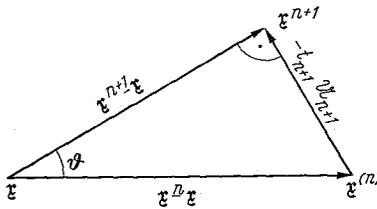


Fig. 6. Geometrische Interpretation des Kaczmarzverfahrens

Wir zeigen jetzt 1. daß das Verfahren konvergiert und 2. wovon die Konvergenzgeschwindigkeit abhängt.

Zu 1.: Die Lösung des Gleichungssystems (3.16) ist, geometrisch interpretiert, der Schnittpunkt von $2N$ -Hyperebenen. Jede der $2N$ Gleichungen von (3.16) ist dabei die Gleichung einer Hyperebene. Der

Normalenvektor der n -ten Hyperebene ist α_n , der n -te Zeilenvektor von $H-E^{(0)}$. Nach KACZMARZ fällt man nun vom Punkt $\bar{x}^{(n)}$ das Lot auf die Ebene $(n+1)$. $\bar{x}^{(n+1)}$ ist der Durchstoßpunkt des Lotes durch die $(n+1)$ -te Ebene. Der Abstand d_{n+1} von $\bar{x}^{(n+1)}$ zu \bar{x} ist i. a. kleiner als der Abstand d_n von $\bar{x}^{(n)}$ zu \bar{x} , denn es gilt (s. auch Fig. 6)

$$\frac{d_{n+1}^2}{d_n^2} = \frac{(\bar{x}^{(n+1)} - \bar{x})^2}{(\bar{x}^{(n)} - \bar{x})^2} = \cos^2 \vartheta \leq 1.$$

ϑ ist auch der Winkel zwischen den Normalenvektoren α_n und α_{n+1} . Wir können daher o. B. d. A. annehmen: $\cos^2 \vartheta < 1$. Hieraus folgt, daß die Größen d_n ($n=0, 1, 2, \dots$) eine Nullfolge bilden q.e.d.

Zu 2.: Der Vektor $\bar{x}^{(n)}$ erfüllt i. a. nur die n -te Gleichung. Die $(n-1)$ -te Gleichung, die man einen Schritt zuvor durch $\bar{x}^{(n-1)}$ erfüllt hatte, wird aber auch durch $\bar{x}^{(n)}$ immer dann erfüllt, wenn $(\alpha_{n-1} \alpha_n) = 0$ ist, d. h. wenn

der $(n-1)$ -te und n -te Zeilenvektor orthogonal sind. Durch Fortsetzung dieser Überlegung erhält man: die Lösung des Gleichungssystems (3.16) für einen beliebigen Startvektor $x^{(0)}$ ist schon nach einem Zyklus von $2N$ Schritten gefunden, wenn die $2N$ Zeilenvektoren von $(H-E^{(0)})$ paarweise orthogonal sind.

Wenn diese Orthogonalitätsforderung nur an einer einzigen Stelle schlecht erfüllt ist, d.h. wenn irgend zwei Zeilenvektoren fast proportional sind, konvergiert das Verfahren schlecht.

3.5. Konvergenzbeschleunigung

3.5.1. Bezeichnung und Vorüberlegungen. Das Verfahren der gebrochenen Iteration wird künftig auch als äußere Iteration bezeichnet, die Auflösung des linearen Gleichungssystems als innere Iteration. Diese Bezeichnungsweise ist für zwei ineinandergeschachtelte Iterationsverfahren üblich.

Wir wandeln jetzt die in 3.3.2 und 3.4.2 beschriebenen Verfahren für die äußere und innere Iteration ab. Das Ziel dabei ist, die Bestimmung der Eigenzustände zu beschleunigen. Man muß daher beachten, daß die beiden Iterationsverfahren in ihrer Konvergenzgeschwindigkeit gekoppelt sind, wie folgende Überlegung zeigt. Eine Konvergenzbeschleunigung der äußeren Iteration, die sich durch Verwendung einer besseren Eigenwertschätzung $E^{(0)}$ ergibt, führt zu einer Konvergenzverschlechterung der inneren Iteration, da, bei Annäherung von $E^{(0)}$ an einen Eigenwert E_i , die Zeilen von $(H-E^{(0)})$ linear abhängig werden. So kann trotz beschleunigter äußerer Iteration die Bestimmung des gesuchten Eigenzustandes länger dauern.

3.5.2. Äußere Iteration. Wir wandeln das in 3.3.2 beschriebene Verfahren in zweifacher Weise ab.

1. Wir arbeiten mit variabler Eigenwertschätzung (sog. Ostrowski-Verfahren²⁴). Bei Kenntnis von $\Phi^{(n)}$ bildet man

$$E^{(n)} = \frac{(\Phi^{(n)} H \Phi^{(n)})}{(\Phi^{(n)} \Phi^{(n)})}$$

und verwendet $E^{(n)}$ für $n > 0$ statt $E^{(0)}$ bei der Berechnung von $\Phi^{(n+1)}$ aus der Gleichung

$$(H - E^{(n)}) \Phi^{(n+1)} = \Phi^{(n)}. \quad (3.19)$$

2. Wir fügen auf der rechten Seite von Gl. (3.19) einen Faktor α ein und erhalten

$$(H - E^{(n)}) \Phi^{(n+1)} = \alpha \Phi^{(n)}. \quad (3.20)$$

Die Benutzung des Ostrowski-Verfahrens an Stelle des Wielandt-Verfahrens bringt eine Konvergenzbeschleunigung der äußeren Iteration.

Die Einführung des Faktors α bringt keine weitere Konvergenzbeschleunigung. Lediglich die Länge des Lösungsvektors $\Phi^{(n+1)}$ von Gl. (3.20) ist um den Faktor α größer als die des Lösungsvektors von Gl. (3.19). Die Richtung der beiden Vektoren ist gleich. Wir führen den Faktor α ein, um die innere Iteration abwandeln zu können.

3.5.3. *Innere Iteration.* Wir setzen

$$\alpha = \omega_1 \cdot \varepsilon^{(n+1)}, \quad (3.21)$$

wobei ω_1 eine vorgegebene Zahl ist (z. B. $\omega_1 = 1$). $\varepsilon^{(n+1)}$ wird als Variable betrachtet. Hiermit geht das inhomogene Gleichungssystem (3.20) über in das homogene System

$$(H - E^{(n)}) \Phi^{(n+1)} - \omega_1 \Phi^{(n)} \varepsilon^{(n+1)} = 0 \quad (3.22a)$$

von $2N$ Gleichungen für $2N+1$ Unbekannte. Zur Vereinfachung der Schreibweise fassen wir die $2N$ -Spaltenvektoren der Matrix $H - E^{(n)}$ mit dem $(2N+1)$ -ten Spaltenvektor $-\omega_1 \Phi^{(n)}$ zu einer rechteckigen Matrix A und die $2N$ Komponenten des Vektors $\Phi^{(n+1)}$ mit $\varepsilon^{(n+1)}$ zu einem Vektor

$$\mathfrak{x} = \begin{pmatrix} \Phi^{(n+1)} \\ \varepsilon^{(n+1)} \end{pmatrix}$$

zusammen. Hiermit lautet das Gleichungssystem (3.22a)

$$A \mathfrak{x} = 0. \quad (3.22b)$$

Zur Bestimmung eines Lösungsvektors verwenden wir nun das Kaczmarzverfahren mit

$$\mathfrak{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} \Phi^{(n)} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

als Startvektor. Wir vermerken folgende Eigenschaften des Gleichungssystems (3.22) und des Auflösungsverfahrens.

1. Neben dem Nullvektor $\mathfrak{x} = 0$ als trivialer Lösung hat das Gleichungssystem für beliebige Werte von $E^{(n)}$ stets eine nichttriviale Lösung [im Unterschied hierzu hat das Gleichungssystem (3.14) keine Lösung, wenn $E^{(0)}$ einer der Eigenwerte von H ist].

2. Das Kaczmarzverfahren konvergiert auf eine nichttriviale Lösung, falls der Startvektor $\mathfrak{x}^{(0)}$ keine Linearkombination der Zeilenvektoren von A ist. Der Beweis dieser Behauptung folgt aus der Konstruktionsvorschrift des Kaczmarzverfahrens. Danach wird der Startvektor $\mathfrak{x}^{(0)}$ um Vielfache der Zeilenvektoren von A vermindert. Enthält $\mathfrak{x}^{(0)}$ einen Teilvektor $\mathfrak{x}_1 \neq 0$, der orthogonal zu allen Zeilenvektoren von A ist, so wird dieser bei keinem Iterationsschritt verändert. Der Vektor $\mathfrak{x}^{(0)} - \mathfrak{x}_1$, der als Linearkombination der Zeilenvektoren darstellbar ist, wird dagegen

durch das Kaczmarzverfahren zu null gemacht, d. h. das Verfahren konvergiert auf \mathbf{x}_1 .

3. Ist $E^{(n)}$ gleich einem der Eigenwerte E_i von H , so ist \mathbf{x}_1 von der Form

$$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} \Phi_i \\ 0 \end{pmatrix},$$

wobei Φ_i ein zu E_i gehöriger Eigenvektor von H ist.

4. Hat H einen mehrfachen Eigenwert E_j und ist $E^{(n)} = E_j$, so kann man alle zu E_j gehörigen Eigenvektoren von H bestimmen, indem man das Iterationsverfahren mit mehreren Startvektoren durchführt.

5. Wenn $E^{(0)}$ eine gute Näherung für einen der Eigenwerte von H ist, konvergiert das Kaczmarzverfahren bei der Auflösung des Gleichungssystems (3.14) wesentlich langsamer als bei der Auflösung des Gleichungssystems (3.22). Der Beweis folgt aus der Tatsache, daß das Iterationsverfahren zur Auflösung von (3.14) divergiert, wenn $E^{(n)}$ gleich einem der Eigenwerte von H ist; aus Stetigkeitsgründen konvergiert es daher sehr langsam, wenn $E^{(0)}$ eine gute Eigenwertschätzung ist.

Wir betrachten jetzt drei weitere Maßnahmen, die die Konvergenz der inneren Iteration beschleunigen sollen.

1. Die Iterationsvorschrift zur Auflösung des Gleichungssystems (3.22) soll lauten

$$\mathbf{x}^{(n)} = \mathbf{x}^{(n-1)} - \sum_{i=1}^m \alpha_{ni} t_{ni}; \quad (3.24)$$

dabei ist α_{ni} der n_i -te Zeilenvektor von A . Die m Parameter ($m > 1$) t_{ni} sollen so bestimmt werden, daß $\mathbf{x}^{(n)}$ m Gleichungen mit den Zeilennummern n_1, n_2, \dots, n_m genügt. Durch Einsetzen von (3.24) in diese Gleichungen ergibt sich

$$\begin{aligned} (\alpha_{n_1} \alpha_{n_1}) t_{n_1} + (\alpha_{n_1} \alpha_{n_2}) t_{n_2} + \dots + (\alpha_{n_1} \alpha_{n_m}) t_{n_m} &= (\alpha_{n_1} \mathbf{x}^{(n-1)}), \\ (\alpha_{n_2} \alpha_{n_1}) t_{n_1} + (\alpha_{n_2} \alpha_{n_2}) t_{n_2} + \dots + (\alpha_{n_2} \alpha_{n_m}) t_{n_m} &= (\alpha_{n_2} \mathbf{x}^{(n-1)}), \\ \vdots & \\ (\alpha_{n_m} \alpha_{n_1}) t_{n_1} + (\alpha_{n_m} \alpha_{n_2}) t_{n_2} + \dots + (\alpha_{n_m} \alpha_{n_m}) t_{n_m} &= (\alpha_{n_m} \mathbf{x}^{(n-1)}). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Die Matrix dieses Gleichungssystems zur Bestimmung der t_{ni} ist symmetrisch. Sie reduziert sich auf eine Diagonalmatrix, wenn die Zeilenvektoren α_{ni} von A paarweise orthogonal sind. In diesem Fall ist unsere Variante des Kaczmarzverfahrens mit dem einfachen Kaczmarzverfahren ($m=1$) identisch. Im umgekehrten Fall, wenn die Determinante des Gleichungssystems (3.25) klein ist, gegen das Produkt ihrer Diagonalelemente, bewirkt die Zusammenfassung der m Gleichungen eine Konvergenzbeschleunigung.

2. Beim Überrelaxationsverfahren werden zunächst m Werte t_{n_i} aus Gl. (3.25) berechnet. Diese werden dann aber nicht in Gl. (3.24) eingesetzt, sondern in

$$\bar{x}^{(n)} = \bar{x}^{(n-1)} - \omega \sum_{i=1}^m \alpha_{n_i} t_{n_i}. \quad (3.26)$$

ω ist der sog. Überrelaxationsparameter. Durch geeignete Wahl von ω kann man eine Konvergenzbeschleunigung erzielen (s. z. B. VARGA²³).

3. Wir benutzen die Freiheit, das Gleichungssystem (3.22a) durch Wahl von ω_1 so abzuändern, daß sich eine Konvergenzbeschleunigung der inneren Iteration ergibt.

3.6. Energieabhängigkeit von H

Im 3. Kapitel haben wir bisher nicht beachtet, daß der Hamiltonoperator und damit auch die Differenzenmatrix $H(E)$ selbst von der Energie abhängt. Diese Abhängigkeit wird durch folgende Methode berücksichtigt. $E^{(0)}$ sei eine Eigenwertschätzung. Wir berechnen zunächst den am nächsten bei $E^{(0)}$ gelegenen Eigenwert E_1 von $H(E^{(0)})$, ersetzen dann $E^{(0)}$ durch E_1 usw. Das Verfahren konvergiert schnell, wenn die Nichtlokalität des Einteilchenpotentials $U_L(E)$ [Gl. (2.7)] nicht zu groß ist. In praxi wird als Argument von H immer die Energieschätzung der äußeren Iteration benutzt (s. 3.5.2).

3.7. Modellprobleme

3.7.1. *Zweidimensionaler Potentialtopf.* Wir betrachten zunächst ein sehr einfaches Eigenwertproblem, das keine Spin-Bahn-Kopplung enthält und bei dem die Eigenlösungen sowohl des Differentialoperators als auch des zugehörigen Differenzenoperators im voraus bekannt sind. Das Differenzeigenwertproblem wird numerisch gelöst mit dem Ziel, die Konvergenzeigenschaften der inneren Iteration zu untersuchen.

Gesucht werden Lösungen der Gleichung

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \Phi(x, y) = E \Phi(x, y), \quad (3.27 a)$$

die den Randbedingungen

$$\Phi(0, y) = \Phi(1, y) = \Phi(x, 0) = \Phi(x, 1) = 0 \quad (3.27 b)$$

genügen.

Die Eigenfunktionen sind bekanntlich

$$\Phi_{1,2}(x, y) = \sin(k_1 x) \cdot \sin(k_2 y), \quad (3.28)$$

wobei

$$k_1 = \pi(n_1 + 1); \quad k_2 = \pi(n_2 + 1); \quad (n_i = 0, 1, 2, \dots).$$

n_1 ist die Zahl der Knotenlinien der Eigenfunktion parallel zur y -Achse im Innern des Einquadrates. n_2 ist entsprechend die Zahl der Knotenlinien parallel zur x -Achse im Innern des Einheitsquadrates.

Die Eigenwerte lauten

$$E_{1,2} = k_1^2 + k_2^2 = \pi^2 [(n_1 + 1)^2 + (n_2 + 1)^2]. \quad (3.29)$$

Zur Behandlung dieses einfachen Modellproblems nach dem Differenzenverfahren unterteilen wir die Seiten des Einheitsquadrates (s. Fig. 7) in jeweils $(I + 1)$ Intervalle und erhalten $N = I^2$ Netzpunkte im Innern des Einheitsquadrates. Die Schrittweite in x - und y -Richtung ist $h = 1/(I + 1)$.

Als Differenzenapproximation der Eigenwertgleichung (3.29) wählen wir

$$\frac{1}{h^2} [-\Phi(x-h, y) - \Phi(x+h, y) - \Phi(x, y-h) - \Phi(x, y+h) + 4\Phi(x, y)] = E \Phi(x, y). \quad (3.30)$$

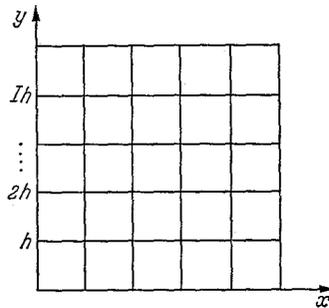


Fig. 7. Wahl der Netzpunkte

Der Lösungsvektor dieser Differenzgleichung mit der Randbedingung (3.27b) ist (3.28); er stimmt also mit der Lösung der zugehörigen Differentialgleichung überein. Die Eigenwerte der Differenzgleichung unterscheiden sich jedoch von denen der Differentialgleichung. Der Differenzeigenwert ist

$$E'_{1,2} = \frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{k_1 h}{2} + \frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{k_2 h}{2}. \quad (3.31)$$

$E'_{1,2}$ unterscheidet sich nur wenig von $E_{1,2}$ [Gl. (3.29)], wenn $k_i \cdot h/2 \ll 1$ für $i = 1, 2$. Es gilt

$$E'_{1,2} = \sum_{i=1}^2 k_i^2 [1 - (k_i h)^2/12 + O((k_i h)^4)], \quad (3.32)$$

d. h. die Differenz $E_{1,2} - E'_{1,2}$ ist in erster Näherung proportional h^2 .

Die Differenzenmatrix, die entsteht, wenn man Gl. (3.30) für alle Netzpunkte aufschreibt, sieht aus wie ein Viertel der in Fig. 5 skizzierten Matrix. Alle Diagonalelemente sind gleich und haben den Wert $H_{ii} = 4/h^2$. Die von null verschiedenen Nichtdiagonalelemente sind ebenfalls alle gleich und haben den Wert $H_{ik} = -1/h^2$.

Da wir speziell die innere Iteration untersuchen wollen, verwenden wir schon als erste Eigenwertschätzung für unsere Iterationsverfahren

einen genauen Eigenwert der Differenzenmatrix. Es gibt dann keine äußere Iteration. Folgende Startvektoren werden benutzt:

$$\Phi_{1,2}^{(0)}(x_i, y_k) = \begin{cases} +1, & \text{wenn } \Phi_{1,2}(x_i, y_k) \geq 0 \\ -1, & \text{wenn } \Phi_{1,2}(x_i, y_k) < 0 \end{cases} \quad (3.33)$$

und

$$\Phi_{1,2}^{(0)}(x_i, y_k) = [1 + x_i(1 - x_i)] \cdot [1 + y_k(1 - y_k)] \sin(k_1 x_i) \cdot \sin(k_2 y_k). \quad (3.34)$$

Die Ergebnisse unserer Rechnung sind in Tabelle 1 zusammengestellt. Die einzelnen Spalten der Tabelle haben folgende Bedeutung:

- n_1 ist die Zahl der Knotenlinien des Lösungsvektors parallel zur y -achse im Intervall $0 < x < 1$;
- n_2 ist entsprechend die Zahl der Knotenlinien des Lösungsvektors parallel zur x -Achse im Intervall $0 < y < 1$ (s. 328 ff.);
- m ist die Zahl der Gleichungen, die in einem Schritt der inneren Iteration behandelt werden (s. § 3.5.3). Es werden jeweils solche Gleichungen zusammengefaßt, die die Differentialgleichung an nahe benachbarten Netzpunkten approximieren.
- N ist die Zahl der Netzpunkte;
- ε wird für die Konvergenzabfrage gebraucht. Nach einem Zyklus der inneren Iteration, d.h. wenn alle Gleichungen einmal behandelt wurden, wird abgefragt, ob sich irgend eine Vektorkomponente um ε oder mehr geändert hat; wenn das nicht der Fall ist, wird die Iteration abgebrochen;
- ω_1 ist der in Gl. (3.21) eingeführte Parameter.
- ω ist der Überrelaxationsparameter (s. Gl. (3.26));
- Q ist definiert durch die Gleichung

$$Q = \sum_{i,k=1}^I h^2 [\Phi_{1,2}(x_i, y_k) - \Phi_{1,2}^{(NI)}(x_i, y_k)]^2. \quad (3.35)$$

Dabei ist $\Phi_{1,2}$ der exakte Lösungsvektor des Differenzeigenwertproblems, $\Phi_{1,2}^{(NI)}$ die Näherungslösung nach NI inneren Iterationen.

Durch Q wird das Quadrat der Länge des Fehlervektors $\Phi_{1,2} - \Phi_{1,2}^{(NI)}$ definiert. $\Phi_{1,2}$ und $\Phi_{1,2}^{(NI)}$ sind jeweils auf eins normiert:

$$\sum_{i,k=1}^I h^2 \Phi_{1,2}^2(x_i, y_k) = \sum_{i,k=1}^I h^2 \Phi_{1,2}^{(NI)2} = 1.$$

Die Tabellen 1a–d gelten für den Startvektor (3.33), Tabelle 1e für den Startvektor (3.34).

Wir entnehmen Tabelle 1:

1. ω_1 wurde im Bereich $0,05 \leq \omega_1 \leq 1$ variiert. Die Konvergenz war für die kleinen Werte von ω_1 etwas besser als für große. Der Einfluß von ω_1 ist jedoch gering. Die Zahl der inneren Iteration NI wird durch ω_1

Tabelle 1. *Ergebnisse für den zweidimensionalen Potentialtopf*
(Erläuterungen im Text § 3.7.1)

Tabelle 1 a

n_1	n_2	m	N	ε	ω_1	ω	$Q \cdot 10^{+8}$	NI
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,3	185	19
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,2	1,3	196	19
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,4	1,3	250	19
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,6	1,3	380	19
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,4	87	17
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,2	1,4	89	17
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,4	1,4	158	17
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,6	1,4	300	17
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,5	24	15
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,2	1,5	33,3	15
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,4	1,5	94,5	15
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,6	1,5	276	15
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,05	1,6	6,12	15
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,6	6,68	15
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,2	1,6	12,8	15
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,05	1,7	9,4	21
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,7	9,5	21
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,2	1,7	15,4	21
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,05	1,8	33	30
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,8	33	30
0	0	4	36	$1 \cdot 10^{-3}$	0,2	1,8	45	30
0	0	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,05	1,5	$1,2 \cdot 10^5$	23
0	0	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,5	$1,2 \cdot 10^5$	23
0	0	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,2	1,5	$1,2 \cdot 10^5$	23
0	0	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,05	1,6	$1,98 \cdot 10^5$	20
0	0	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,6	$1,98 \cdot 10^5$	20
0	0	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,2	1,6	$1,98 \cdot 10^5$	20
0	0	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,7	$1,095 \cdot 10^5$	29

Tabelle 1 b

n_1	n_2	m	N	ε	ω_1	ω	$Q \cdot 10^5$	NI
2	3	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,4	9,88	18
2	3	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,2	1,4	9,88	18
2	3	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	1,0	1,4	9,88	18
2	3	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,5	7,92	18
2	3	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,2	1,5	7,92	18
2	3	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	1,0	1,5	7,96	18
2	3	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,6	10,5	17
2	3	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,2	1,6	10,5	17
2	3	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	1,0	1,6	10,6	17
2	3	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,7	7,45	23
2	3	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	0,2	1,7	7,45	23
2	3	4	144	$5 \cdot 10^{-3}$	1,0	1,7	7,55	23
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,4	75	19
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,5	66	18
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,6	41	22
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,7	30	26

Tabelle 1c

n_1	n_2	m	N	ε	ω_1	ω	Q	NI
2	3	1	324	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,5	$2,54 \cdot 10^{-3}$	36
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,5	$7,92 \cdot 10^{-5}$	18
2	3	9	324	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,5	$5,4 \cdot 10^{-4}$	16

Tabelle 1d

n_1	n_2	m	N	ε	ω_1	ω	$Q \cdot 10^3$	NI
2	3	4	324	$1 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,0	5,35	12
2	3	4	324	$1 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,1	4,25	12
2	3	4	324	$1 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,2	3,33	12
2	3	4	324	$1 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,3	2,52	12
2	3	4	324	$1 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,4	1,58	13
2	3	4	324	$1 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,5	1,04	14
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,0	12,5	4
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,1	9,95	5
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,2	9,12	5
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,3	6,75	6
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,4	5,88	6
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,5	4,08	7
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,6	2,35	9
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-2}$	0,1	1,7	1,74	13

Tabelle 1e

n_1	n_2	m	N	ε	ω_1	ω	$Q \cdot 10^4$	NI
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,0	21,9	10
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,1	13,8	13
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,2	9,9	14
2	3	4	324	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1	1,3	7,6	14

nicht beeinflußt, lediglich der Wert von Q nimmt mit ω_1 etwas ab. Dies gilt sowohl für das Grundniveau als auch für das angeregte Niveau (s. Tabellen 1a und 1b).

2. Die Zahl NI der benötigten inneren Iteration bei der Zusammenfassung von m Gleichungen ist für $m=1$ wesentlich größer als für $m=4$, für $m=4$ aber nur unwesentlich größer als für $m=9$ (s. Tabelle 1c). Zur Bestimmung des optimalen Wertes von m muß man den gesamten Arbeitsaufwand beim Durchlaufen eines Zyklus der inneren Iteration abschätzen und mit der Zahl der benötigten Zyklen wichten. Es ergibt sich: der beste Wert ist $m=4$ vor $m=1$ und $m=9$.

3. Der günstigste Wert für den Überrelaxationsparameter liegt zwischen $\omega=1,5$ und $\omega=1,6$, sowohl für das Grundniveau als auch für das

angeregte Niveau (s. Tabellen 1 a und 1 b). Wenn man die Genauigkeitsforderungen herabsetzt, d.h. die Iteration schon früher abbricht, wird das günstigste ω kleiner (s. Tabelle 1 d).

4. Bei Verwendung des Startvektors (3.34), der die Sinusfunktion recht gut approximiert, werden weniger innere Iterationen benötigt als bei Verwendung des Startvektors (3.33).

Die Rechnungen wurden auf einer Maschine vom Typ IBM 7074 durchgeführt. Ein Zyklus der inneren Iteration für das Gleichungssystem mit 324 Reihen (und $m=4$) dauert ca. 2 sec.

3.7.2. *Harmonischer Oszillator mit Spin-Bahn-Kopplung.* Das Potential des kugelsymmetrischen Oszillators ist bekanntlich

$$V(z, \rho) = \frac{m}{2} \omega^2 (\rho^2 + z^2).$$

Setzt man dieses Potential in die Gln. (2.15) ein, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{(\Omega - \frac{1}{2})^2}{\rho^2} + \rho^2 + z^2 + 2c(\Omega - \frac{1}{2}) \right] \psi^{(1)} + \\ & \quad + 2c \left(\rho \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\Omega + \frac{1}{2}}{\rho} z \right) \psi^{(2)} = E \psi^{(1)} \\ & 2c \left(z \frac{\partial}{\partial \rho} - \rho \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\Omega - \frac{1}{2}}{\rho} z \right) \psi^{(1)} + \left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \right. \\ & \quad \left. + \frac{(\Omega + \frac{1}{2})^2}{\rho^2} + \rho^2 + z^2 - 2c(\Omega + \frac{1}{2}) \right] \psi^{(2)} = E \psi^{(2)}, \end{aligned} \quad (3.36)$$

wobei wir zur Vereinfachung der Schreibweise

$$\frac{\hbar^2}{2m} = 1 \quad \text{und} \quad \frac{m \omega^2}{2} = 1$$

gesetzt haben.

Die Eigenfunktionen und Eigenwerte von (3.36) sind

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(z, \rho) &= \sqrt{l + \frac{1}{2} \pm \Omega} \psi_{l, \Omega - \frac{1}{2}}^{(z, \rho)} \times \\ & \quad \times F(-n, l + \frac{3}{2}, \rho^2 + z^2) \cdot (\rho^2 + z^2)^{\frac{1}{2}l} \cdot e^{-\frac{1}{2}(\rho^2 + z^2)}, \\ \psi^{(2)}(z, \rho) &= \pm \sqrt{l + \frac{1}{2} \mp \Omega} \psi_{l, \Omega + \frac{1}{2}}^{(z, \rho)} \times \\ & \quad \times F(-n, l + \frac{3}{2}, \rho^2 + z^2) \cdot (\rho^2 + z^2)^{\frac{1}{2}l} \cdot e^{-\frac{1}{2}(\rho^2 + z^2)}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$E_{\Omega, l, n} = 2 \left[2n + l + \frac{3}{2} + c \begin{cases} l \\ -(l+1) \end{cases} \right]. \quad (3.38)$$

$\psi_{l,m}$ ist die zugeordnete Kugelfunktion (s. z. B. EDMONDS²⁸, S. 24), F die konfluente hypergeometrische Funktion. Die Bahndrehimpulsquantenzahl l nimmt die Werte $l = \Omega - \frac{1}{2}, \Omega + \frac{1}{2}, \Omega + \frac{3}{2} \dots$ an; n zählt die Knotenlinien der Wellenfunktion parallel zur ρ -Achse für $\rho > 0$ ($n = 0, 1, 2, \dots$).

Die Eigenwertgleichungen werden nun, wie in 3.2 beschrieben, durch Differenzgleichungen approximiert. Wir nutzen dabei die Spiegelsymmetrie des Potentials $V = z^2 + \rho^2$ aus (s. 2.2.5) und benötigen daher nur Netzpunkte für positive z -Werte. Zur Einsparung von Speicherplätzen in der Rechenmaschine bedienen wir uns der Symmetrieeigenschaften der Differenzenmatrix H . H ist symmetrisch (s. Fig. 3.3). Es werden daher nur die von null verschiedenen Elemente auf und oberhalb der Hauptdiagonalen gespeichert. Die Untermatrix $H^{(12)}$ ist die Summe einer Diagonalmatrix und einer antisymmetrischen Matrix. Matrixelemente unterhalb der Hauptdiagonalen von $H^{(12)}$ brauchen daher ebenfalls nicht gespeichert zu werden. Dadurch lassen sich Eigenwertprobleme für Differenzenmatrizen mit über 500 Reihen ohne Zuhilfenahme von Zwischenspeichern auf einer Rechenmaschine mit nur 10000 Kernspeichern behandeln.

Es sollen zwei Niveaus berechnet werden:

1. das Grundniveau ($\Omega = \frac{1}{2}, l = 0, n = 0$) und
2. das Niveau ($\Omega = \frac{3}{2}, l = 1, n = 1$).

Wir wollen die Genauigkeit des Differenzenverfahrens untersuchen und rechnen daher mit zwei verschiedenen Schrittweiten. Die berechneten Differenzeigenwerte werden anschließend korrigiert, um eine möglichst gute Näherung für den Eigenwert des Differentialoperators zu erhalten. Dies geschieht wie folgt. Die Abweichung des mit der Schrittweite $h^{(i)}$ berechneten Eigenwertes $E^{(i)}$ ($i = 1, 2$) der Differenzenmatrix von dem des Differentialoperators ist in erster Näherung proportional $h^{(i)2}$. Aus dem Gleichungssystem

$$E = E^{(1)} + \text{const} \cdot h^{(1)2},$$

$$E = E^{(2)} + \text{const} \cdot h^{(2)2}$$

kann man nun die unbekanntes Proportionalitätskonstante eliminieren und erhält eine verbesserte Eigenwertnäherung E . Diese Methode wird als Schrittweitenextrapolation bezeichnet.

Als Startweite für den Eigenvektor der Differenzenmatrix verwenden wir die Funktionswerte von $\psi^{(1)}(z, \rho)$ und $\psi^{(2)}(z, \rho)$ [Gln. (3.37)] an den

²⁸ EDMONDS, A. R.: Angular momentum in quantum mechanics, 2. ed. Princeton, N. J.: Princeton University Press 1960.

Netzpunkten. Dieser Startvektor $\Psi^{(0)}$ stellt bei nicht zu wenigen Netzpunkten schon eine gute Näherung für den gesuchten Eigenvektor der Differenzenmatrix H dar. Startwert für den Eigenwert ist

$$E^{(0)} = \frac{(\Psi^{(0)} H \Psi^{(0)})}{(\Psi^{(0)} \Psi^{(0)})},$$

der mit $\Psi^{(0)}$ gebildete Rayleighquotient von H .

Für die Konstante c der Spin-Bahn-Kopplung, die bis auf das Vorzeichen gleich dem Nilssonschen κ ist, wurde der Wert $c=0,05$ benutzt.

Tabelle 2. *Eigenwerte. N ist die Zahl der Netzpunkte; Ed der berechnete Eigenwert, Ee der durch Schrittweitenextrapolation korrigierte Wert und Ew der Eigenwert des Hamiltonoperators, der durch Ee approximiert wird*

Niveau	N	Ed	Ee	Ew
$\Omega = \frac{1}{2}; l=0; n=0$	10 · 10	2,975	3,000	3
	14 · 14	2,987		
$\Omega = \frac{3}{2}; l=1, n=1$	12 · 12	8,757	8,909	8,9
	16 · 16	8,822		

Die berechneten Eigenwerte sind in Tabelle 2 zusammengestellt. Sie stimmen bis auf ca. 10^{-6} mit den Eigenwerten der Differentialgleichung überein. Die berechneten Eigenvektoren* sind ebenfalls recht gute Näherungen für die Lösungen des Hamiltonoperators (die Startwerte); das Längenquadrat Q der Differenz zwischen Startvektor und Lösungsvektor ergab sich bei allen vier Beispielen zu $Q < 5 \cdot 10^{-5}$, wobei Startvektor und Lösungsvektor jeweils auf $Q=1$ normiert waren.

3.7.3. *Zusammenfassung.* Die Behandlung einfacher Modellprobleme zeigt:

1. Die Konvergenzeigenschaften des hier beschriebenen Verfahrens sind für seine Anwendung auf moderne Rechenmaschinen hinreichend gut.

2. Bei einer Maschine, die mit acht Dezimalen rechnet, kann man die Schrittweite so klein wählen, daß sich auch Eigenfunktionen, die eine größere Anzahl von Knotenlinien haben, mit befriedigender Genauigkeit berechnen lassen.

Das Verfahren läßt sich ohne besondere Schwierigkeiten zur Behandlung anderer als der hier behandelten Beispiele anwenden, da spezielle Eigenschaften des Potentials nicht ausgenutzt werden.

* Siehe Fußnote** auf der Titelseite.

4. Kernphysikalische Anwendungsmöglichkeiten

Die für schwach deformierte Kerne erprobten Anwendungsmöglichkeiten des Einteilchenmodells, z.B. die Berechnung von Kernspektren, Gleichgewichtszuständen und Trägheitsmomenten, lassen sich auch für stärker deformierte Kerne anwenden, wenn die Einteilchenwellenfunktionen und Energien bekannt sind. Insbesondere kann man spaltende Kerne in ihrer Sattelpunktsdeformation im Rahmen des Einteilchenmodells untersuchen.

4.1. Paarungseffekt-Korrektur

Das extreme Einteilchenmodell (Fermigasmodell) muß zunächst durch die Berücksichtigung von Restwechselwirkungen (Paarungseffekt) korrigiert werden^{2,3}. Bei Benutzung des feldtheoretischen Formalismus lautet der Hamiltonoperator des Kerns

$$H = \sum_i E_i a_i^+ a_i - G_n \sum_{\alpha, \alpha'} a_{\alpha+}^+ a_{\alpha-}^+ a_{\alpha'-} a_{\alpha'+} - G_p \sum_{\beta, \beta'} a_{\beta+}^+ a_{\beta-}^+ a_{\beta'-} a_{\beta'+}. \quad (4.1)$$

Dabei ist E_i ein Einteilchenenergieniveau. Der Erzeugungsoperator $a_{\alpha+}^+$ besetzt einen Neutronenzustand $\alpha+$ (mit positiver z -Komponente des Drehimpulses); $a_{\alpha-}^+$ besetzt den zu $\alpha+$ zeitgespiegelten Neutronenzustand $\alpha-$ (mit negativer z -Komponente des Drehimpulses). G_n ist die Paarwirkungskonstante für Neutronen. Entsprechendes gilt für Protonen. Die Paarwirkkraft wirkt nur zwischen Teilchen in zeitgespiegelten Zuständen. Sie wird einfachheitshalber konstant angenommen (anziehend). Zwischen Protonen und Neutronen wird keine Restwechselwirkung berücksichtigt.

Wir fassen einige Ergebnisse der Paarwirkkrafttheorie kurz zusammen. Die Grundzustandsenergie eines $g-g$ -Kerns als Funktion seiner Potentialdeformation ist

$$E = \sum_{\alpha} E_{\alpha} v_{\alpha}^2 - \frac{\Delta_n^2}{G_n} + \sum_{\beta} E_{\beta} v_{\beta}^2 - \frac{\Delta_p^2}{G_p}, \quad (4.2)$$

wobei die bekannten Gleichungen der Paarwirkkrafttheorie

$$v_{\alpha}^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{E_{\alpha} - \lambda_n}{\sqrt{(E_{\alpha} - \lambda_n)^2 + \Delta_n^2}} \right\},$$

$$\frac{2}{G_n} = \sum_{\alpha} \frac{1}{\sqrt{(E_{\alpha} - \lambda_n)^2 + \Delta_n^2}}, \quad (4.3)$$

$$N = \sum_{\alpha} 2 v_{\alpha}^2$$

zur Bestimmung von v_{α} und Δ_n sowie zur Elimination von λ_n , des chemischen Potentials der Neutronen, dienen. N ist die Neutronenzahl des Kerns. In praxi ist meist Δ_n empirisch gegeben und G_n wird berechnet.

v_α^2 ist die Besetzungswahrscheinlichkeit eines Paares $\alpha+$, $\alpha-$ von Einteilchenneutronenniveaus.

Die E_α , v_α , E_β und v_β sind deformationsabhängig. Eine Deformationsabhängigkeit von A ist ebenfalls zu erwarten. Der Wert von A für Sattelpunktskerne ist jedoch nicht genau bekannt^{29, 30}.

4.2. Gleichgewichtsdeformationen

Ein Kern befindet sich in einer Gleichgewichtsdeformation, wenn seine Energie bei kleinen Änderungen der Deformationsparameter stationär ist. Die Grundzustandsdeformation der Kerne ist ein stabiles Gleichgewicht (die zweiten Ableitungen der Energie bezüglich aller Deformationsparameter sind positiv); die Sattelpunktsdeformation spaltender Kerne ist ein labiles Gleichgewicht (nicht alle zweiten Ableitungen der Energie bezüglich der Deformationsparameter sind positiv).

Zur Bestimmung von Gleichgewichtsdeformationen für einen $g-g$ -Kern sucht man gewöhnlich stationäre Werte der Energie E [Gl. (4.2)] als Funktion der Einteilchenpotentialparameter (s. oben 2.2.3) auf. Man erhält Gleichgewichtswerte für die Energie und zugehörige Werte für die Parameter des Einteilchenpotentials. Die mit diesen Parameterwerten ermittelten Einteilchenfunktionen liefern die Massendichte $\rho(\mathbf{r})$ des Kerns in den Gleichgewichtszuständen

$$\rho(\mathbf{r}) \sim \sum_{\alpha} 2v_{\alpha}^2 \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) + \sum_{\beta} 2v_{\beta}^2 \Psi_{\beta}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}(\mathbf{r}). \quad (4.4)$$

Der erste Term beschreibt die Neutronendichte, der zweite die Protonendichte.

Paßt man die Funktion v [s. oben Gl. (2.9)], die die Form des Einteilchenpotentials bestimmt, durch geeignete Wahl der Einteilchenpotentialparameter an die Massendichte $\rho(\mathbf{r})$ an, so erhält man einen Satz von Parameterwerten; diesen kann man mit dem Wertesatz, der zur Berechnung von $\rho(\mathbf{r})$ benutzt wurde, vergleichen. Eine notwendige Bedingung für die Selbstkonsistenz des verwendeten phänomenologischen Einteilchenpotentials ist, daß die beiden Wertesätze näherungsweise übereinstimmen. Diese Forderung wird durch die kurze Reichweite der Kernkräfte begründet².

4.3. Trägheitsmomente

Die niedrigsten Anregungen deformierter $g-g$ -Kerne sind kollektive Rotationen mit Spin 0, 2, 4, Auch spaltende Kerne rotieren³¹. Diese

²⁹ GRIFFIN, J. J.: Phys. Rev. **132**, 2204 (1963).

³⁰ STRUTINSKI, V. M., and V. A. PAVLINCUK: IAEA Symposium on the Physics and Chemistry of Fission, Salzburg 1965.

³¹ BRITT, H. C., and F. PLASIL: Phys. Rev. **144**, 1046 (1966).

Rotation beeinflusst die Winkelverteilung der Spaltbruchstücke. Trägheitsmomente rotierender Kerne kann man nach dem Kurbelmodell von INGLIS³² berechnen. Bei Berücksichtigung von Paarungseffekten ergibt sich²

$$\Theta = 2\hbar^2 \left[\sum_{\nu, \nu'} \frac{|\langle \nu | J_x | \nu' \rangle|^2 (u_\nu v_{\nu'} - v_\nu u_{\nu'})^2}{\sqrt{(E_\nu - \lambda_n)^2 + \Delta_n^2} + \sqrt{(E_{\nu'} - \lambda_n)^2 + \Delta_n^2}} + \sum_{\mu, \mu'} \frac{|\langle \mu | J_x | \mu' \rangle|^2 (u_\mu v_{\mu'} - v_\mu u_{\mu'})^2}{\sqrt{(E_\mu - \lambda_p)^2 + \Delta_p^2} + \sqrt{(E_{\mu'} - \lambda_p)^2 + \Delta_p^2}} \right] \quad (4.5)$$

dabei ist J_x eine Komponente des Drehimpulsoperators senkrecht zur Rotationsachse des Kerns; ν und ν' sind Quasiteilchenzustände.

Herrn Prof. G. SÜSSMANN danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit und für viele wertvolle Diskussionen. Herrn Prof. K. WIRTZ möchte ich für die Möglichkeit, diese Arbeit am Kernforschungszentrum Karlsruhe durchzuführen, und für sein Interesse an ihrem Fortgang danken.

³² INGLIS, D. R.: Phys. Rev. **96**, 1059 (1954).